

Блохинцев Д.И.

Избранные труды

Том 2



МОСКВА
ФИЗМАТЛИТ ®

УДК 534, 535, 539.1

ББК 72.3

Б 70

Блохинцев Д.И. **Избранные труды.** В 2 т. Т.2. — М.: ФИЗМАТЛИТ, 2009. — 744 с. — ISBN 978-5-9221-1203-1.

Д.И. Блохинцев (1908–1979) — выдающийся ученый-физик с энциклопедической широтой интересов, автор многочисленных монографий и классического учебника по квантовой механике, научный руководитель работ по созданию первой в мире атомной электростанции, организатор и первый директор Объединенного института ядерных исследований в Дубне, Герой Социалистического Труда, кавалер многих высших орденов СССР, лауреат Ленинской и Государственных премий СССР, член-корреспондент АН СССР и член ряда зарубежных академий.

В настоящий том включены работы Д.И. Блохинцева по принципиальным вопросам квантовой механики, статьи, посвященные существенно-нелинейной и нелокальной теории поля и теории элементарных частиц, выступления по общим вопросам науки и философским вопросам естествознания, а также некоторые научно-популярные статьи.

Издание рассчитано на научных работников — физиков-теоретиков, аспирантов и студентов старших курсов университетов.

РЕДКОЛЛЕГИЯ

А. Н. Сисакян (председатель)
Б. М. Барбашов (зам. председателя)
Л. Д. Блохинцев
В. И. Журавлев
А. В. Зродников
Л. М. Лямшев
В. В. Нестеренко
А. Д. Суханов
А. А. Тяпкин
Л. Н. Усачев
Е. П. Шабалин

Ответственные редакторы:
Б. М. Барбашов, В. В. Нестеренко

ОГЛАВЛЕНИЕ

Предисловие	6
-----------------------	---

Часть VI. Основы квантовой механики

61. Квантовый ансамбль Гиббса и его связь с классическим ансамблем. 1940	8
62. Связь квантового ансамбля с классическим ансамблем Гиббса. II. Совместно с П. Э. Немировским. 1940	17
63. О разделении системы на части — квантовую и классическую. Совместно с Я. Б. Дашевским. 1941	25
64. Атом в поле зрения электронного микроскопа. 1947	33
65. Принцип детального равновесия и квантовая механика. 1947	40
66. Связь математического аппарата квантовой механики с аппаратом механики классической. Совместно с Ч. М. Брискиной. 1948	50
67. Принципиальные вопросы квантовой механики. 1966	58
68. О взаимодействии микросистемы с измерительным прибором. 1968	175
69. Классическая статистическая физика и квантовая механика. 1977	195
70. Квантовая механика (Лекции по избранным вопросам). 1978	213
71. Перечитывая Д. И. Блохинцева: размышления над основаниями неклассической физики. А. Д. Суханов, О. Н. Голубева. 2009	286

Часть VII. Квантовая теория поля и теория элементарных частиц

72. Смещение спектральных линий, вызванное обратным действием поля излучения. 1938	307
73. Замечания о возможном релятивистски-инвариантном обобщении понятия поля. 1946	319
74. Уравнение для рассеяния частиц с учетом реакции излучения. 1946	323
75. К теории движения частицы в кулоновском поле. 1946	328
76. О негамильтоновом методе в теории элементарных частиц. 1947	330
77. Теория поля протяженных частиц. 1948	336
78. Прохождение нуклонов через вещество. 1949	347
79. Элементарные частицы и поле. 1950	355

80.	Всегда ли существует «дуализм» волн и частиц? 1951	370
81.	О распространении сигналов в нелинейной теории поля. 1952	375
82.	О распространении сигналов в нелинейной электродинамике. Совместно с В. В. Орловым. 1953	379
83.	Замечания о применимости гидродинамического описания к квантовым системам. 1957	396
84.	Нелокальные и нелинейные теории поля. 1957	400
85.	О флуктуациях ядерного вещества. 1957	427
86.	Когда слабое взаимодействие становится сильным? 1957	433
87.	О возможном пределе применимости квантовой электродинамики. 1958	436
88.	Замечание к оптической теореме. 1960	440
89.	Новые функциональные методы в теории поля. 1960	442
90.	О причинности в современной теории поля. 1963	449
91.	Геометрическая оптика элементарных частиц. 1964	457
92.	О распространении сигналов высокой частоты в среде со случайными характеристиками. 1966	461
93.	Метрика пространства–времени и нелинейные поля. 1966	465
94.	Условия макроскопической причинности для матрицы рассеяния. Совместно с Г. И. Колеровым. 1965	469
95.	Почти локальная матрица рассеяния. Совместно с Г. И. Колеровым. 1968	479
96.	О квантовании существенно-нелинейного поля. 1970	486
97.	Современное состояние нелокальной и существенно-нелинейной теории поля. 1970	494
98.	Стохастические пространства. 1972	503
99.	Применения функциональных интегралов в квантовой механике и теории поля. Совместно с Б. М. Барбашовым. 1972	510
100.	Стохастическое пространство и нелокальное поле. 1973	540
101.	«Элементарная длина» и эффект Мёссбауэра. 1973	548
102.	Проектирование новых ускорителей и задачи современной физики элементарных частиц. Совместно с А. В. Ефремовым, Р. М. Мурадяном. 1973	557
103.	Геометрия и физика микромира. 1973	568
104.	Стохастические пространства. 1974	588
105.	Существенно-нелинейные поля и поляризация вакуума.	628
106.	О гипотезе расширяющейся Вселенной. 1976	634

107. Динамика кварков. 1977.....	639
108. Кварки в квантованном пространстве. 1978	643
109. Представление о флуктонах и передача большого импульса сложным системам. Совместно с А. В. Ефремовым, В. К. Лукьяновым, А. И. Титовым. 1978	650
110. Вселенная как газ фридмонов. 1979	661

Часть VIII. Выступления по общим проблемам науки

111. Гипотеза нейтрино и закон сохранения энергии. Совместно с Ф. М. Гальпериным. 1934	664
112. Новые представления об электроны. 1959	677
113. Некоторые вопросы развития современной физики. 1959.	684
114. На пороге глубочайшей научной революции. 1965	691
115. Физика высоких энергий и основные принципы современной теории. 1965	696
116. Ленин и физика. 1970	700
117. Пропорции в науке. 1974	720
118. Две ветви познания мира. 1982	731

Предисловие

Д. И. Блохинцев — выдающийся физик и организатор науки, член-корреспондент АН СССР. Для научного творчества Дмитрия Ивановича характерна поистине энциклопедическая широта интересов.

Во второй том избранных трудов включены его работы по основам квантовой механики, статьи по существенно-нелинейной и нелокальной теории поля, по теории элементарных частиц, выступления по общим вопросам науки и по философским вопросам естествознания, а также некоторые научно-популярные статьи.

Д. И. Блохинцев внес важный вклад в разработку последовательной интерпретации квантовой механики на основе созданной им теории квантовых ансамблей. Им построена теория квантовых измерений и выяснена роль классического прибора в процессе измерения. Эти результаты являются общепризнанными в научном сообществе. Д. И. Блохинцев — автор первого университетского учебника по квантовой механике, который выдержал 7 изданий в нашей стране и переведен на многие языки мира. Этот учебник не потерял своего значения и в наши дни.

Дмитрий Иванович первым (1938) предложил теорию существенно квантово-полевого эффекта — лэмбовского сдвига задолго до построения математического аппарата квантовой теории поля и теории перенормировок. К сожалению, эта работа не получила тогда должной оценки и не была опубликована. Лишь в послевоенный период стало ясно важность этого физически наглядного подхода к данной проблеме.

Дмитрий Иванович первым высказал идею о возможности существования нескольких вакуумов в квантово-полевой системе и спонтанных переходов между ними. Он впервые оценил поведение слабого взаимодействия элементарных частиц в области высоких энергий и указал на существование унитарного предела, за которым неизбежно должна появиться новая физика микромира.

Для решения проблемы устранения ультрафиолетовых расходимостей в квантовой теории поля Д. И. Блохинцев одним из первых обратился к изучению нелокальных и нелинейных взаимодействий. Исследуя существенно-нелинейные поля, он пришел к выводу о том, что понятие точечных координат частиц теряет смысл, если спектр масс частиц ограничен сверху. В конечном счете, это приводит к необходимости изменения геометрии микромира.

Дмитрию Ивановичу принадлежит плодотворная идея флуктонов — флуктуаций плотности ядерного вещества, способных как единое целое воспринимать большой импульс налетающей частицы. Это позволило объяснить рождение «кумулятивных» частиц в реакциях с релятивистскими ядрами.

Оригинальные идеи и конкретные исследования Дмитрия Ивановича нашли широкое применение в квантовой теории поля и в теории элементарных

частиц, они и сейчас представляют большой научный интерес. Несомненно, интересен и ход его рассуждений и эволюция его взглядов на важнейшие проблемы, которые волнуют физиков. Все это можно найти в данном издании избранных научных трудов Д. И. Блохинцева. Здесь же помещены репродукции нескольких его картин.

При подготовке издания большую помощь редколлегии оказали физики-теоретики, написавшие комментарии ко многим статьям Д. И. Блохинцева: А. Л. Куземский, Г. В. Ефимов, А. В. Ефремов, В. Д. Тонеев, Х. Намсрай, Н. М. Плакида, А. Б. Пестов. В своей работе редколлегия постоянно пользовалась советами и помощью Татьяны Дмитриевны Блохинцевой. Большую работу по электронному набору и верстке выполнили сотрудники Издательского отдела ОИЯИ Е. Н. Водоватова, Е. В. Сабаева, Л. В. Пахомова и Е. М. Граменицкая. В подготовке фотоматериалов большая заслуга принадлежит Б. М. Старченко и Ю. А. Туманову. Полный и детальный библиографический список трудов Д. И. Блохинцева был подготовлен сотрудниками Научно-технической библиотеки ОИЯИ Е. В. Ивановой и В. В. Лицитис. Следует отметить высокий профессионализм и ответственное отношение к делу сотрудников издательства «Физматлит» и прежде всего генерального директора издательства М. Н. Андреевой, Е. С. Артоболевской, Ю. А. Тюриной и В. Р. Игнатовой. Нам помогали также В. Л. Аксенов, И. Г. Андреева, А. В. Малых, С. Н. Неделько, Ю. В. Фролов, А. Е. Шабат, А. Н. Шабашова. Редколлегия выражает всем им глубокую благодарность.

Редколлегия

Часть VI

ОСНОВЫ КВАНТОВОЙ МЕХАНИКИ

61

КВАНТОВЫЙ АНСАМБЛЬ ГИББСА И ЕГО СВЯЗЬ С КЛАССИЧЕСКИМ АНСАМБЛЕМ*

Исследуется предельный переход от квантовых уравнений движения для матрицы плотности, описывающей ансамбль Гиббса в квантовой механике, к уравнениям движения для классических функций распределения. Установлена особая роль условия различия частиц.

Наиболее общий квантовый ансамбль N частиц описывается матрицей плотности (или же статистическим оператором согласно терминологии фон Неймана) ρ . Элементы этой матрицы могут быть записаны в следующем виде:

$$(q_1 q_2 \dots q_k \dots q_N | \rho | q'_1 q'_2 \dots q'_k \dots q'_N) = (q | \rho | q'), \quad (1)$$

где q_k обозначает совокупность координат k -й частицы. Матрица ρ удовлетворяет уравнению движения

$$i\hbar \frac{\partial \rho}{\partial t} = H\rho - \rho H, \quad (2)$$

где H — гамильтониан системы исследуемых частиц. На матрицу ρ накладываются следующие условия:

$$(q | \rho | q') = (q' | \rho | q)^* \quad (3)$$

(свойство эрмитовости) и, если дополнительно наложено свойство неразличимости частиц, то

$$P_q(q | \rho | q') = \pm (q | \rho | q'), \quad (3a)$$

$$P'_q(q | \rho | q') = \pm (q | \rho | q'), \quad (3б)$$

$$P_q P'_q(q | \rho | q') = + (q | \rho | q'). \quad (3в)$$

Здесь P_q обозначает перестановку координат q_i i -й частицы и координат q_k k -й частицы. Аналогично P'_q означает перестановку координат q'_i и q'_k . $P_q P'_q$ означает перестановку i -й и k -й частиц. Знак плюс или минус выбирается в зависимости от того, какой статистике (Бозе или Ферми) подчиняются

* J. Phys. 1940. V. 2. P. 71–74.

© В. В. Нестеренко (Перевод), 2009.

частицы. Условие симметрии при перестановке частиц (3в) (неразличимость частиц) можно рассматривать как следствие (3а) и (3б)¹.

На первый взгляд и матрица ρ (1), и уравнение (2), которому она удовлетворяет, значительно отличаются от классической функции распределения $f(q, p)$ в фазовом пространстве (p обозначает импульсы частиц) и от уравнения, которому удовлетворяет эта функция,

$$\frac{\partial f}{\partial t} = - \left(\frac{\partial H}{\partial p} \frac{\partial f}{\partial q} - \frac{\partial f}{\partial q} \frac{\partial H}{\partial p} \right) \equiv -[H, f]_1, \quad (4)$$

где $H = H(p, q)$ — классическая функция Гамильтона для системы частиц².

Тем не менее связь между классической функцией распределения $f(q, p)$ и квантовой матрицей ρ может быть установлена, если обратиться к так называемому смешанному представлению (p, q) матрицы ρ . Поэтому определим матрицу ρ в смешанном представлении ($q|\rho|p$) с помощью фурье-преобразования матрицы ($q|\rho|q'$):

$$(q|\rho|p) = \int (q|\rho|q') \frac{e^{ipq'/\hbar}}{\sqrt{2\pi\hbar}} dq', \quad (5)$$

$$(q|\rho|q') = \int (q|\rho|p) \frac{e^{-ipq'/\hbar}}{\sqrt{2\pi\hbar}} dp. \quad (5')$$

Аналогично для любой механической величины L введем вместо матричных элементов ($q|L|q'$) смешанные элементы

$$(q|L|p) = \int (q|L|q') \frac{e^{ipq'/\hbar}}{\sqrt{2\pi\hbar}} dq', \quad (6)$$

$$(q|L|q') = \int (q|L|p) \frac{e^{-ipq'/\hbar}}{\sqrt{2\pi\hbar}} dp. \quad (6')$$

Смешанные матричные элементы могут быть заменены новыми величинами, которые связаны с ними следующими соотношениями:

$$R(q, p) = (q|\rho|p) e^{-ipq/\hbar} \sqrt{2\pi\hbar}, \quad (7)$$

$$L(q, p) = (q|L|p) e^{-ipq/\hbar} \sqrt{2\pi\hbar}. \quad (8)$$

Эти величины, которые являются функциями p, q , полностью заменяют исходные ($q|\rho|q'$) и ($q|L|q'$). Действительно, полагая $q' = q + \xi$, мы получаем с помощью (5'), (6'), (7) и (8)

$$(q|\rho|q + \xi) = \int R(q, p) \frac{e^{-ip\xi/\hbar}}{2\pi\hbar} dp, \quad (7')$$

¹ Условия (3а) и (3б) эквивалентны условию симметрии или антисимметрии волновых функций по отношению к перестановке любой пары частиц.

² Мы рассматриваем здесь только одну пару канонически сопряженных координат и импульсов (p, q). Таким же образом мы будем поступать и далее, хотя все наши рассуждения легко обобщаются на случай произвольного числа степеней свободы за исключением одного момента, который будет ниже специально отмечен.

$$(q|L|q + \xi) = \int L(q, p) \frac{e^{-ip\xi/\hbar}}{2\pi\hbar} dp. \quad (8')$$

Величина $L(q, p)$ в (8) обладает замечательными свойствами, а именно, если соответствующая классическая величина $L_{\text{кл}}(q, p)$ не содержит произведений некоммутирующих (в квантовой механике) величин, т. е. она имеет вид $L_{\text{кл}}(q, p) = f(q) + \varphi(p)$, то величина $L(q, p)$, определяемая согласно (8), равна $L_{\text{кл}}(q, p)$. Однако, если такие произведения встречаются (например, $p \cdot q$), то $L(q, p) = L_{\text{кл}}(q, p)$ плюс члены более высокого порядка по \hbar^1 .

Поэтому можно ожидать, что не матрица $(q|\rho|p)$, а функция $R(q, p)$, которую мы ввели, будет аналогом классической функции распределения $f(q, p)$, и именно она будет стремиться к $f(q, p)$ при $\hbar \rightarrow 0$. Это предположение оправдывается, хотя, как будет показано ниже, и не во всех отношениях.

Прежде чем переходить к установлению связи между $R(q, p)$ и $f(q, p)$, сформулируем условия (3), (3а), (3б) и (3в), накладываемые на матрицу ρ , в терминах новой функции R .

Для того чтобы переформулировать условие самосопряженности (3) для $R(q, p)$, мы выразим $(p|\rho|q') = (q|\rho|q + \xi)$ в (3) в терминах $R(q, p)$ с помощью (7'). Далее без труда получаем

$$R^*(q, p) = \int R(q + \xi, p + \eta) e^{i\xi\eta/\hbar} \frac{d\xi d\eta}{2\pi\hbar}. \quad (9)$$

Условие эрмитовости для $L(q, p)$ формулируется точно так же. В том случае, когда $L(q, p) = f(q) + \varphi(p)$, это условие записывается наиболее просто, а именно $L^*(q, p) = L(q, p)$.

Что касается дополнительных условий симметрии, накладываемых на функцию $R(q, p)$, то ситуация здесь совершенно другая. С учетом (5) и того, что произведение pq в показателе экспоненты в случае нескольких частиц есть сумма $\sum_k p_k q_k$, из (3а), (3б) и (3в) следует

$$P_q(q|\rho|p) = \pm(q|\rho|p), \quad (3а')$$

$$P_p(q|\rho|p) = \pm(q|\rho|p), \quad (3б')$$

$$P_q P_p(q|\rho|p) = +(q|\rho|p). \quad (3в')$$

Кроме того, P_q сохраняет свое первоначальное значение, в то время как P_p означает перестановку импульсов p_i и p_k i -й и k -й частиц.

С помощью (7) получаем для $R(q, p)$ из (3а'), (3б') и (3в') следующие соотношения:

$$P_q R(q, p) = \pm R(q, p) e^{-\frac{i}{\hbar}(p_i - p_k)(x_i - x_k)}, \quad (10а)$$

$$P_p R(q, p) = \pm R(q, p) e^{-\frac{i}{\hbar}(p_i - p_k)(x_i - x_k)}, \quad (10б)$$

$$P_q P_p R(q, p) = R(q, p). \quad (10в)$$

¹ См. статью Я.П. Терлецкого «О предельном переходе квантовой механики в классическую». ЖЭТФ. 1937. Т.7. С.1290. В этой работе не уделяется внимания связи между излагаемыми нами рассуждениями, с одной стороны, и общей теорией преобразований и методом матрицы плотности, с другой.

Таким образом, последнее условие (симметрия по частицам) не содержит \hbar и может быть сформулирована так же, как и в классике. В противоположность этому специальные условия симметрии по импульсам и координатам (10а) и (10б) содержат \hbar , причем эта зависимость имеет существенную особенность при $\hbar \rightarrow 0$.

Функция $R(q, p)$, так же как и $(p|\rho|q')$, позволяет вычислить среднее значение любой величины $L(q, p)$. Действительно, если величина L представлена оператором L , то среднее значение \bar{L} определяется формулой

$$\bar{L} = \text{Sp}(L\rho) = \int (q|L|q')(q'|\rho|q) dq dq'.$$

Выражая с помощью (7') и (8') $(q|L|q')$ и $(q'|\rho|q)$ через $L(q, p)$ и $R(q, p)$ соответственно, получаем

$$\bar{L} = \int \frac{d\xi d\eta dp dq}{(2\pi\hbar)^2} e^{i\xi\eta/\hbar} L(q, p) R(q + \xi, p + \eta), \quad (11)$$

или

$$\bar{L} = \int \frac{dp dq}{2\pi\hbar} L(q, p) R^*(q, p), \quad (11')$$

что полностью аналогично классическому среднему

$$\bar{L} = \int \frac{dp dq}{2\pi\hbar} L_{\text{кл}}(q, p) f(q, p). \quad (11'')$$

Далее легко убедиться в том, что среднее значение (11) или (11') для эрмитова оператора L является действительной величиной, как это и должно быть¹.

Заменяя в уравнении (2) $(q|\rho|q')$ на $R(q, p)$ с помощью (7) и $(q|H|q')$ на $H(q, p)$ с помощью (8), мы получаем уравнение движения для $R(q, p)$:

$$i\hbar \frac{\partial R(q, p)}{\partial t} = \int \frac{d\xi d\eta}{2\pi\hbar} e^{-i\xi\eta/\hbar} [H(q, p + \eta)R(q + \xi, p) - H(q + \xi, p)R(q, p + \eta)], \quad (12)$$

где $H(q, p)$ есть не что иное, как классическая функция Гамильтона рассматриваемой системы частиц. Нетрудно проверить, что условия (9) и (10) остаются справедливыми для всех моментов времени, если они выполнялись в некоторый фиксированный момент.

Для того чтобы установить связь с уравнением для классической функции распределения (4), мы разложим R и H в (9) и (12) в ряды по ξ и η . В результате возникает сумма интегралов следующего вида:

$$I_{nm} = \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\xi d\eta}{2\pi\hbar} e^{\pm i\xi\eta/\hbar} \xi^n \eta^m. \quad (13)$$

¹ Чтобы проверить это, необходимо воспользоваться уравнением (9), применяя его к $L(q, p)$.

Эти интегралы могут быть легко вычислены с помощью δ -функции. Действительно,

$$I_{nm} = \left(\pm \frac{\hbar}{i}\right)^m \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\xi^n d\xi d\eta}{2\pi\hbar} \frac{\partial}{\partial \xi^m} e^{\pm i\xi\eta/\hbar} =$$

$$= (\mp i\hbar)^m \int_{-\infty}^{\infty} \xi^n \frac{d^m \delta(\xi)}{d\xi^m} d\xi = (\pm i\hbar)^m m! \delta_{nm}, \quad (13')$$

где $\delta_{nm} = 1$, если $n = m$, и $\delta_{nm} = 0$, если $n \neq m$.

Используя эту формулу, получаем вместо (9) и (12)

$$R^*(q, p) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(i\hbar)^n}{n!} \frac{\partial^{2n} R(q, p)}{\partial p^n \partial q^n}, \quad (14)$$

$$\frac{\partial R(q, p)}{\partial t} = - \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(-i\hbar)^{n-1}}{n!} [H, R]_n, \quad (15)$$

где

$$[H, R]_n \equiv \frac{\partial^n H}{\partial p^n} \frac{\partial^n R}{\partial q^n} - \frac{\partial^n H}{\partial q^n} \frac{\partial^n R}{\partial p^n} \quad (16)$$

есть скобка Пуассона n -го порядка¹.

Для того чтобы эти уравнения при $\hbar \rightarrow 0$ являлись приближением для классического уравнения, необходимо, чтобы функция R могла быть разложена в ряд по степеням \hbar . Такое разложение может быть выполнено только в том случае, если мы пренебрежем условиями симметрии или антисимметрии (10а) и (10б).

В частности, эти условия отсутствуют для ансамбля Гиббса, образованного системами, состоящими из одной частицы или же из различных частиц.

Разлагая в этом случае R в ряд

$$R = \sum_{n=0}^{\infty} R_n \hbar^n, \quad (17)$$

получаем вместо (14) и (15) систему уравнений для функций² R_n^* :

$$R_n^* = \sum_{k=0}^{k \leq n} i^k \frac{\partial^{2k} R_{n-k}}{\partial p^k \partial q^k}, \quad (14')$$

$$\frac{\partial R_n}{\partial t} = - \sum_{k=0}^{k \leq n+1} \frac{(-i)^{k-1}}{k!} [H, R_{n+1-k}]_k. \quad (15')$$

¹ Уравнения (15) и (16) легко обобщаются на любое число степеней свободы.

² Легко проверить, что как только уравнение (15') для R_n выполнено, то уравнение для R_n^* выполняется тождественно в силу (14'), т.е. условие (14') инвариантно относительно временной эволюции.

Первые уравнения в этих системах записываются в следующем виде:

$$R_0 = R_0^*, \quad R_1^* = R_1 + \frac{i}{1!} \frac{\partial^2 R_0}{\partial p \partial q}, \quad (14'')$$

$$R_2^* = R_2 + \frac{i}{1!} \frac{\partial^2 R_1}{\partial p \partial q} - \frac{1}{2!} \frac{\partial^4 R_0}{\partial p^2 \partial q^2}, \dots;$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial R_0}{\partial t} &= -[H, R_0]_1, & \frac{\partial R_1}{\partial t} &= -[H, R_1]_1 + \frac{i}{2!} [H, R_0]_2, \\ \frac{\partial R_2}{\partial t} &= -[H, R_2]_1 + \frac{1}{2!} [H, R_1]_2 + \frac{1}{3!} [H, R_0]_3, \dots \end{aligned} \quad (15'')$$

В частности, уравнение для R_0 в точности совпадает с уравнением (4) для классической функции распределения $f(q, p)$, и это доказывает прямую связь между $R(p, q)$ и $f(q, p)$.

В то же время мы должны сделать вывод, что условие неразличимости частиц является «более квантовым» по сравнению с уравнениями движения, так как при выполнении этого условия функция R не может быть разложена по степеням \hbar .

Причину такого заключения наиболее просто понять, если мы обратимся к представлению матрицы ρ , данному в (1) (аналогичное рассмотрение может быть проведено также и в (q, p) -представлении).

Волновые функции $\psi(q)$ (а также и $\psi(p)$), как известно, не могут быть разложены по степеням \hbar , и когда $\hbar \rightarrow 0$

$$\psi(q) = A(q) e^{iS(q)/\hbar},$$

где $S(q)$ — функция действия. С другой стороны, матрица ρ билинейна по $\psi(q)$, причем отдельные слагаемые имеют следующий характерный вид:

$$\psi(q)\psi^*(q') = A(q)A(q') e^{i[S(q)-S(q')]/\hbar}.$$

Для диагональных членов ($q = q'$) зависимость от \hbar в показателе экспоненты исчезает. Поэтому матрица ρ может быть разложена по степеням \hbar . Это справедливо также и для ансамбля, образованного многими частицами, если условие симметрии или антисимметрии на ψ не наложено. Однако, если это условие имеет место, то ситуация будет иной. Это легко пояснить на примере двух частиц. Выпишем для этого случая симметризованную волновую функцию $\psi(q_1 q_2)$

$$\psi(q_1 q_2) = A(q_1 q_2) e^{iS(q_1 q_2)/\hbar} \pm A(q_2 q_1) e^{iS(q_2 q_1)/\hbar}.$$

Здесь знак «плюс» соответствует статистике Бозе, а знак «минус» — статистике Ферми. Отдельные слагаемые в $(q|\rho|q')$ имеют следующий вид:

$$\begin{aligned} \psi(q_1 q_2)\psi^*(q'_1 q'_2) &= \\ &= A(q_1 q_2)A(q'_1 q'_2) e^{i[S(q_1 q_2)-S(q'_1 q'_2)]/\hbar} + A(q_2 q_1)A(q'_2 q'_1) e^{i[S(q_2 q_1)-S(q'_2 q'_1)]/\hbar} \pm \\ &\pm A(q_2 q_1)A(q'_1 q'_2) e^{i[S(q_2 q_1)-S(q'_1 q'_2)]/\hbar} \pm A(q_1 q_2)A(q'_2 q'_1) e^{i[S(q_1 q_2)-S(q'_2 q'_1)]/\hbar}. \end{aligned}$$

Диагональный элемент матрицы ρ определяется формулой

$$\psi(q_1 q_2) \psi^*(q_1 q_2) = A(q_1 q_2) A(q_1 q_2) + A(q_2 q_1) A(q_2 q_1) \pm \pm 2A(q_1 q_2) A(q_2 q_1) \cos \{ [S(q_1 q_2) - S(q_2 q_1)] / \hbar \},$$

т. е. он сингулярен, если постоянная Планка \hbar стремится к нулю.

Таким образом, квантовая функция $R(q, p)$ при $\hbar \rightarrow 0$ аппроксимируется классической функцией $f(q, p)$ только для ансамбля различных частиц (отличающихся друг от друга как угодно мало, но тем не менее нетождественных).

Физический институт им. П. Н. Лебедева
Академии наук СССР

Поступила
18 июля 1939 г.

Комментарий. В 1940 г. внимание Блохинцева привлекают проблемы статистического описания квантовых систем. Интерес к этим вопросам возник у него благодаря лекциям и работам по квантовой механике Л. И. Мандельштама и К. В. Никольского. В 1936 г. К. В. Никольский публикует работу «Принципы квантовой механики. I» [1], в которой он, по его словам, «... строго сформулировал основное различие между классическим и квантовым процессом». Свою цель Никольский видел в том, чтобы «... развить независимо от физики наиболее рациональный для этих целей статистический метод, а затем, посредством его, сформулировать количественные квантовые законы» [1]. В более развернутом виде содержание этой статьи вошло в основную монографию Никольского «Квантовые процессы» [2], где была сформулирована интерпретация квантовой механики на основе концепции квантовых ансамблей.

В работе Блохинцева № 61, которая во многом является пионерской, исследовался предельный переход от квантовых уравнений движения для матрицы плотности к уравнениям движения для классической функции распределения. (О матрице плотности см. разд. 46 в книге Блохинцева [3], а также книгу [4]). Вопрос о предельном переходе от квантовой механики к классической механике интересовал и Л. И. Мандельштама. В 1936 г. его студент, Я. П. Терлецкий, выполнил под его руководством работу «О предельном переходе квантовой механики в классическую» [5]. В данной работе Блохинцева, с общей точки зрения, изучалась возможность установить соответствие между классической функцией распределения $f(q, p)$ и квантовой матрицей плотности ρ . Для этого использовалось «смешанное» (q, p) -представление для матрицы плотности ρ . Далее вводилась функция $R(q, p)$, которая, как предполагалось, может быть аналогом классической функции распределения $f(q, p)$ при $\hbar \rightarrow 0$. Эта функция является полным аналогом классической плотности в пространстве фаз $f(q, p)$ для ансамбля Гиббса. Функция $R(q, p)$, подобно функции $\langle q | \rho | q' \rangle$, позволяет найти средние значения любой величины

$L(q, p)$. Однако, исследование возможности разложения функции $R(q, p)$ по степеням \hbar при $\hbar \rightarrow 0$ показало, что это можно сделать только в том случае, когда не учитывается симметрия или антисимметрия волновых функций. По словам самого Блохинцева, «в работе № 61 было показано, что не существует какой-либо функции распределения, зависящей от (q, p) , которая могла бы изобразить квантовый ансамбль» [3]. В своем автореферате он также замечает, что «аналогия квантового ансамбля с классическим ансамблем Гиббса оказалась столь далеко идущей, что меня одно время одолевали мысли о возможности сформулировать всю квантовую механику в терминах матрицы плотности в фазовом пространстве $R(q, p)$ » (см. работу [6] и книги [7–9]). Однако впоследствии выяснилось, что при конструировании квантового ансамбля Гиббса возникает много проблем [10], полных ответов на которые не дано до сих пор (см. обзор [11]). Например, в книге [12] рассмотрена ситуация, когда измерения производятся над статистическим ансамблем, состоящем из N подсистем, которые могут находиться в различных квантовых состояниях. Обсуждается вопрос о вычислении средних значений в чистом состоянии и в состоянии описываемом матрицей плотности ρ . «Следует заметить, ... что в квантовой статистической механике выражение $S = -(\ln \rho) = -(\rho \ln \rho)$ определяет энтропию статистического ансамбля, описываемого матрицей плотности ρ . Энтропия обращается в нуль в случае чистого состояния, и только в этом случае. Используя этот способ, можно обойтись без понятия «фазового пространства», вводимого в классической механике и не имеющего смысла в квантовой механике в силу того, что импульс и координата являются несовместимыми характеристиками» [12]. Однако дальнейшее развитие квантовой физики показало, что вопрос о соответствии квантового и классического описания весьма многогранен и чрезвычайно сложен и требует тщательного и всестороннего анализа (см. работы [10–20]). В настоящее время проблема систематического вывода функций распределения в обобщенных фазовых пространствах продолжает интенсивно изучаться (см. работы [21–23]).

Подробное обсуждение предельного перехода от квантовой статистики к классической дано в книге [24]. Здесь рассмотрен предельный переход как для статистических сумм, так и для равновесных статистических операторов. См. также обсуждение этого вопроса и дополнительные ссылки в работе [25].

1. *Никольский К. В.* // УФН. 1936. Т. 16. С. 537.
2. *Никольский К. В.* Квантовые процессы. М.: ГТТИ, 1940.
3. *Блохинцев Д. И.* Основы квантовой механики. 5-е изд. М.: Наука, 1976.
4. *Белоусов Ю. М., Манько В. И.* Матрица плотности. Представления и применения в статистической механике. М.: Изд-во МФТИ, 2004.
5. *Терлецкий Я. П.* // ЖЭТФ. 1937. Т. 7. С. 1290.
6. *O'Connell R. F., Wigner E. P.* Quantum Mechanical Distribution Functions: Conditions for Uniqueness // Phys. Lett. A. 1981. V. 83. P. 145.
7. *Zachos C., Fairlie D., Curtright T.* Quantum Mechanics in Phase Space. Singapore: World Scientific, 2005.
8. *Robinet R. W.* Quantum Mechanics: Classical Results, Modern Systems, and Visualized Examples. Oxford: Oxford Uni. Press, 1997.

9. *Ballentine L. E.* Quantum Mechanics: A Modern Development. Singapore: World Scientific, 1998.
10. *Wichmann E. H.* Density Matrices Arising from Incomplete Measurements // *J. Math. Phys.* 1963. V. 4. P. 884.
11. *Kuzemsky A. L.* // *Intern. J. Mod. Phys. B.* 2007. V. 21. P. 2821–2942. (cond-mat/0707.0753).
12. *Кемпфер Ф.* Основные положения квантовой механики. М.: Мир, 1967. Гл. 4.
13. *Khaljin L. A., Tsirelson B. S.* Quantum/Classical Correspondence in the Light of Bell Inequalities // *Foundat. Phys.* 1992. V. 22. P. 879.
14. *Heller E., Tomsovic S.* Postmodern Quantum Mechanics // *Phys. Today.* 1993. No. 7. P. 38.
15. *de Polavieja G. G.* Nonstatistical Quantum–Classical Correspondence in Phase Space // *Foundat. Phys. Lett.* 1996. V. 9. P. 411.
16. *Omnes R.* Quantum–Classical Correspondence Using Projection Operators // *J. Math. Phys.* 1997. V. 38. P. 697.
17. *Galapon E. A.* Quantum–Classical Correspondence of Dynamical Observables, Quantization, and the Time of Arrival Correspondence Problem // *Optics and Spectroscopy.* 2001. V. 91. P. 399.
18. *Sewell G. L.* Quantum Mechanics and its Emergent Macrophysics. Princeton: Princeton Uni. Press, 2002.
19. *Esposito G., Marmo G., Sudarshan G.* From Classical to Quantum Mechanics. An Introduction to the Formalism, Foundations and Applications. Cambridge: Cambridge Uni. Press, 2004.
20. *Ball P.* Quantum All the Way // *Nature.* 2008. V. 453. P. 22.
21. *Wlodarz J. J.* On Phase–Space Representation of Quantum Mechanics // *Phys. Lett. A.* 2001. V. 286. P. 97.
22. *Kakazu K., Kiyuna M., Sakai E.* Systematic Derivation of the Number-Phase Distribution Functions // *Prog. Theor. Phys.* 2007. V. 118. P. 827.
23. *Kakazu K., Kiyuna M., Sakai E.* The Number-Phase and Position-Momentum Distribution Functions // *Prog. Theor. Phys.* 2009. V. 121. P. 217.
24. *Зубарев Д. Н.* Неравновесная статистическая термодинамика. М.: Наука, 1971.
25. *Куземский А. Л.* // *ЭЧАЯ.* 2008. Т. 39, вып. 1. С. 5–81.

А. Л. Куземский

СВЯЗЬ КВАНТОВОГО АНСАМБЛЯ С КЛАССИЧЕСКИМ АНСАМБЛЕМ ГИББСА. II*

Совместно с П. Э. Немировским

Рассматривается вопрос об условиях аппроксимации квантовой статистики классической. Показано, что от квантового ансамбля, состоящего из одинаковых частиц, нет предельного перехода ($\hbar \rightarrow 0$) к классическому. Классическое описание получается в том случае, когда состояние систем характеризуется положением в фазовых ячейках $\Omega \gg \hbar$.

В предыдущей работе¹ было показано, что наиболее общий квантовый ансамбль может быть описан с помощью некоторой функции — импульсов (p) и координат (q) — $R(p, q)$, являющейся полным аналогом классической плотности в пространстве фаз $f(p, q)$ для ансамбля Гиббса. Ради определенности мы будем называть функцию $R(p, q)$ также «плотностью в пространстве фаз (p, q)». Невозможность одновременного измерения координат (q) и импульсов (p) в таком представлении выражается в обязательной комплексности введенной «плотности фаз» $R(p, q)$. Однако величины

$$W(q) = \int R(p, q) \frac{dp}{2\pi\hbar}, \quad (1)$$

$$W(p) = \int R(p, q) \frac{dq}{2\pi\hbar} \quad (2)$$

действительны, и первая из них есть плотность вероятности в пространстве конфигураций (q), а вторая имеет то же значение для пространства импульсов (p). В I было также показано, что в случае возможности разложения квантовой плотности в пространстве фаз $R(p, q)$ по степеням \hbar , последняя аппроксимируется классической плотностью фаз $f(p, q)$ и удовлетворяет уравнению

$$\frac{\partial R}{\partial t} = -[H, R]_1 + \sum_{n \geq 2} \frac{(-i\hbar)^{n-1}}{n!} [H, R]_n, \quad (3)$$

* ЖЭТФ. 1940. Т. 10, вып. 11. С. 1263–1266.

¹ J. Phys. 1940. V. 2. P. 71 (предыдущая статья в данном издании). Далее цитируется как I.

где

$$[H, R]_n = \frac{\partial^n H}{\partial p^n} \frac{\partial^n R}{\partial q^n} - \frac{\partial^n H}{\partial p^n} \frac{\partial^n R}{\partial q^n}, \quad n = 1, 2, \dots \quad (4)$$

и $H(p, q)$ есть функция Гамильтона. В частности для

$$H = \frac{p^2}{2m} + V(q) \quad (5)$$

уравнение (3) в раскрытой форме имеет вид

$$\frac{\partial R}{\partial t} = -\frac{p}{m} \frac{\partial R}{\partial q} + \frac{\partial V}{\partial q} \frac{\partial R}{\partial p} + \frac{i\hbar}{2m} \frac{\partial^2 R}{\partial p^2} - \sum_{n \geq 2} \frac{(-i\hbar)^{n-1}}{n!} \frac{\partial^n V}{\partial q^n} \frac{\partial^n R}{\partial p^n}. \quad (3')$$

Написанное в (3') разложение требует гладкости $R(p, q)$ и $V(q)$, причем для первой величины как в отношении p , так и в отношении q , т. е. требуется гладкость в пространстве фаз.

С этой точки зрения непосредственно видно, что квантовые ансамбли, имеющие близкие к себе классические ансамбли, должны характеризоваться большой величиной дисперсии как для p (Δp^2), так и для q (Δq^2), порознь.

По этой причине более благоприятными в смысле наличия близкого классического ансамбля будут смешанные квантовые ансамбли (смеси), характеризующиеся, в отличие от чистых ансамблей, не одной, а целым набором волновых функций, и соответствующих вероятностей. Как пример приведем состояние, описываемое волновой функцией:

$$\psi_{p_0 q_0}(p, q) = N \exp \left[-\frac{(q - q_0)^2}{2a^2} + i \frac{p_0(q - q_0)}{\hbar} \right]. \quad (6)$$

Для этого состояния, согласно определению (см. I, (7)), имеем

$$R_{p_0 q_0}(p, q) = \sqrt{2} \exp \left[-\frac{(q - q_0)^2}{a^2} - \frac{(p_0 - p)^2 a^2}{2\hbar^2} + i \frac{(p_0 - p)(q - q_0)}{\hbar} \right]. \quad (7)$$

Эта плотность не разлагается по степеням \hbar и при $\hbar \rightarrow 0$ переходит в

$$f_{p_0 q_0}(p, q) = \sqrt{2} \exp \left[-\frac{(q - q_0)^2}{a^2} \right] \delta(p - p_0). \quad (7')$$

При наличии поля $V(q)$ из-за δ -функции мы будем иметь бесконечно большие производные $\partial^n R / \partial p^n$ и закон движения для R (3') не будет аппроксимироваться классическим. Представим теперь себе, что мы имеем дело с набором состояний $\psi_{p_0 q_0}$ (смесь), причем каждое состояние встречается с вероятностью $W(p_0, q_0)$.

Тогда плотность фаз R для такого смешанного ансамбля равна

$$R(p, q) = \int W(p_0, q_0) R_{p_0 q_0}(p, q) dp_0 dq_0. \quad (8)$$

Если $W(p_0, q_0)$ — гладкая функция p_0, q_0 , то и R будет гладкой функцией p, q , хотя $R_{p_0 q_0}$ этим свойством не обладает. Возьмем, например, $W(p_0, q_0)$ в виде

$$W(p_0, q_0) = N \exp \left(-\frac{q_0^2}{A^2} - \frac{p_0^2}{B^2} \right). \quad (9)$$

Тогда для $A^2 B^2 \geq \hbar^2$, $A^2 \gg a^2$ получаем из (8) и (9)

$$R(p, q) = \sqrt{2} \exp \left(-\frac{q^2}{A^2} - \frac{p^2}{B^2} - i \frac{2pq\hbar}{A^2 B^2} \right). \quad (8')$$

Получаемая плотность R уже разлагается по степеням p, q , и аппроксимируется классической плотностью f

$$f(p, q) = \exp \left[-\frac{(q - q_0)^2}{A^2} + \frac{(p - p_0)^2}{B^2} \right]. \quad (8)$$

Как уже было отмечено в (1), мы встречаемся с существенно иным положением вещей, если имеем дело с ансамблем, состоящим из одинаковых частиц. Тогда плотность фаз R подчиняется дополнительным условиям (см. I, (10a), (10б), (10в)), относящимся к перестановке ее аргументов. Именно

$$P_q R(p, q) = \pm R(p, q) \exp \left[-\frac{i}{\hbar} (p_i - p_k)(q_i - q_k) \right], \quad (10)$$

$$P_p R(p, q) = \pm R(p, q) \exp \left[-\frac{i}{\hbar} (p_i - p_k)(q_i - q_k) \right]. \quad (10')$$

Здесь P_q — оператор, переставляющий q_i, q_k , а P_p — оператор, переставляющий p_i, p_k ¹. Знак (−) соответствует частицам Ферми–Дирака, а знак (+) — частицам Бозе–Эйнштейна.

Для частиц Ферми–Дирака $R(p, q)$, как следует из (10) и (10'), обращается в нуль на всех гиперповерхностях в пространстве фаз, где $p_i = p_k$ или $q_i = q_k$ (с учетом спина, следовало бы добавить $\sigma_i = \sigma_k, \sigma'_i = \sigma'_k$). Для частиц Бозе–Эйнштейна на этих же гиперповерхностях плотность фаз имеет экстремум $\left(\frac{\partial R}{\partial p_i} = \frac{\partial R}{\partial p_k} = 0, \frac{\partial R}{\partial q_i} = \frac{\partial R}{\partial q_k} = 0 \right)$.

Вместе с тем из (10) и (10') следует, что плотность фаз R не является теперь гладкой функцией p и q ни для чистого ансамбля, ни для смешанного, т.е. для квантового ансамбля из одинаковых частиц не может существовать близкого к нему классического (разложение R по степеням \hbar невозможно). Поэтому возникает вопрос, какова в этом случае связь с классическим ансамблем Гиббса?

¹ Если учесть спин частиц σ_i , то плотность R следует писать в виде: $R(p, \sigma, q, \sigma')$ и разуметь под операторами P_p и P_q — операторы, переставляющие пары $(p_i, \sigma_i), (p_k, \sigma_k)$ и $(q_i, \sigma'_i), (q_k, \sigma'_k)$ соответственно.

Чтобы осветить этот вопрос, рассмотрим две не взаимодействующие частицы. Тогда, обозначая через $r(p_1, p_2, q_1, q_2)$ плотность фаз для нашего ансамбля без учета симметрии частиц, мы получим симметризованную плотность фаз R , удовлетворяющую условиям (10) и (10') в виде

$$R = \frac{1}{2!} \left\{ r \pm P_p r \exp \left[-\frac{i}{\hbar} (p_1 - p_2)(q_1 - q_2) \right] \pm \right. \\ \left. \pm P_q r \exp \left[-\frac{i}{\hbar} (p_1 - p_2)(q_1 - q_2) \right] + P_p P_q r \right\}. \quad (11)$$

Плотность r (также и $P_p r$, $P_q r$, $P_p P_q r$) может быть гладкой функцией p и q (например для смеси), симметризованная же плотность R содержит осциллирующие члены. Если r и $V(q)$ гладкие функции, то мы можем ограничиться более грубым описанием системы и рассматривать вместо плотности R усредненную \tilde{R} по некоторой ячейке в фазовом пространстве. Определим \tilde{R} формулой

$$\tilde{R} = \frac{1}{\Omega^2} \int_{\Omega^2} R dp_1 dq_1 dp_2 dq_2, \quad (12)$$

где Ω^2 — объем области

$$P_1 - \frac{1}{2}\Delta \leq p_1 \leq P_1 + \frac{1}{2}\Delta, \quad Q_1 - \frac{1}{2}\delta \leq q_1 \leq Q_1 + \frac{1}{2}\delta, \\ P_2 - \frac{1}{2}\Delta \leq p_2 \leq P_2 + \frac{1}{2}\Delta, \quad Q_2 - \frac{1}{2}\delta \leq q_2 \leq Q_2 + \frac{1}{2}\delta.$$

Считая r гладкой функцией p, q в объеме Ω , мы можем вынести r за знак интеграла (12):

$$\tilde{R} = \frac{1}{2!} (r + P_p P_q r) \pm (P_p r + P_q r) \frac{1}{\Omega^2} \int_{\Omega^2} e^{-\frac{i}{\hbar} (p_1 - p_2)(q_1 - q_2)} dp_1 dq_1 dp_2 dq_2. \quad (13)$$

Для выполнения интегрирования полагаем $q_1 - q_2 = \xi$, $q_1 + q_2 = q$. Интеграл в (12) дает

$$\frac{1}{\Omega^2} \int_{\Omega^2} e^{-\frac{i}{\hbar} (p_1 - p_2)(q_1 - q_2)} dp_1 dq_1 dp_2 dq_2 = \frac{1}{\Omega^2} \int \frac{e^{-\frac{i}{\hbar} (P_1 - P_2)\xi} \sin^2 \frac{\Delta}{2\hbar} \xi d\xi dq}{\xi^2 / \hbar^2}. \quad (14)$$

Этот интеграл имеет наибольшее значение при $P_1 = P_2$ или $Q_1 = Q_2$. Оно равно $\hbar\pi/\Omega\sqrt{2}$.

Таким образом

$$\tilde{R} = \frac{1}{2!} (r + P_p P_q r) + O\left(\frac{\hbar}{\Omega}\right) = r + O\left(\frac{\hbar}{\Omega}\right). \quad (15)$$

Первый член представляет симметричное распределение, которое может быть близким к классическому, а второй меньше первого в отношении $\hbar/\Delta\delta$, т. е. в отношении постоянной Планка \hbar к размеру выбранных фазовых ячеек $\Omega = \Delta\delta$.

Таким образом, если мы производим очень точные измерения, то мы всегда встретимся с областями пространства фаз, в которых имеют место существенные отступления от классических. Если же характеризовать состояние систем положением в той или иной ячейке $\Omega \gg \hbar$, то такие области оказываются несущественными¹.

Рассмотрим теперь случай произвольного числа частиц N . Опять-таки для не взаимодействующих частиц получим в полной параллели с (11):

$$R = \frac{1}{N!} \left[r + \sum_{(P_p P_q)} (P_p P_q) r \right] + \frac{1}{N!} \sum_{P_p \neq P_q} \pm P_p P_q r \exp \left[\frac{i}{\hbar} \left(\sum_{p,q} p \cdot q - P_p P_q \sum_{p,q} p \cdot q \right) \right], \quad (16)$$

где r — несимметризованная плотность фаз, а P_p и P_q , как и прежде, означают перестановки импульсов и координат соответственно. Далее

$$\sum_{p,q} p \cdot q = \sum_{i=1}^N p_i q_i.$$

В этом случае мы также можем ввести усредненную плотность \tilde{R} по формуле

$$\tilde{R} = \frac{1}{\Omega^N} \int_{\Omega^N} R dp_1 dq_1 \dots dp_N dq_N, \quad (17)$$

но придем к прежнему результату (15) в отношении различия

$$\frac{1}{N!} \left[r + \sum_{(P_p P_q)} (P_p P_q) r \right]$$

и \tilde{R} только в случае малой плотности систем в пространстве фаз (p, q) . Вычисление \tilde{R} протекает в полной аналогии с расчетом вириальных коэффициентов для не идеальных газов по методу Урселля². Именно, мы должны произвести группировку частиц по группам, содержащим близкие частицы.

¹ При точном измерении речь может идти только об измерении либо p либо q . Тогда наше рассмотрение имеет такое значение: оно показывает, что отступления от классики будут как в пространстве (p) , так и в пространстве (q) .

² См. особенно новое изложение в работах: *Uhlenbeck G. E., Kahn B.* // *Physica*. 1938. V. 5. P. 399; *Ursell H. D.* // *Proc. Cambr. Phil. Soc.* 1927. V. 23. P. 685.

Не останавливаясь подробнее на этой стороне дела, заметим, что требование, чтобы \tilde{R} и

$$\frac{1}{N!} \left[r + \sum_{(P_p P_q)} (P_p P_q) r \right]$$

мало различались, означает малость r в тех областях пространства фаз, где координаты частиц или их импульсы совпадают, так как только в этих областях усредненные фазовые множители $\exp \left[-\frac{i}{\hbar} \left(\sum_{p,q} p \cdot q - P_p P_q \sum_{p,q} p \cdot q \right) \right]$

имеют заметно отличающиеся от 0 значения (ср. (14)). Представление R в виде (16) дает метод приближенного учета обменных сил. Действительно, этот вид R сохраняется не только для взаимодействующих частиц во внешнем поле, но и для взаимодействующих, при условии, что обменные силы малы. (Это соответствует построению симметризованной волновой функции из несимметризованных.)

Допустив, что несимметризованная фазовая плотность r каким-либо путем найдена, мы получаем симметризованную фазовую плотность R по формуле (16). Вычисленные с помощью этой плотности средние значения какой-либо величины $L(p, q)$ (например энергии) по формуле (см. I, формула (12))

$$\bar{L} = \int L(p, q) R^*(p, q) \frac{dp dq}{2\pi\hbar} \quad (18)$$

дадут среднее значение \bar{L} с приближенным учетом обмена. Если

$$L(p, q) = H(p, q) = \frac{p^2}{2m} + V(q),$$

то (18) даст среднее значение энергии в ансамбле с учетом обменной энергии.

Физический институт им. П. Н. Лебедева
Академии наук СССР

Поступила
1 июля 1940 г.

Комментарий. Данная работа является прямым продолжением предыдущей работы. Здесь рассматривался вопрос об условиях аппроксимации квантовой статистики классической. Было показано, что от квантового ансамбля, состоящего из одинаковых частиц, нет предельного перехода ($\hbar \rightarrow 0$) к классическому. Классическое описание получается в том случае, когда состояние систем характеризуется положением в фазовой ячейке $\Omega \gg \hbar$. Таким образом, в работах Блохинцева № 61, № 62 было положено начало нового направления: квантовая механика в фазовом пространстве [1, 2].

Еще раньше, в 1932 г., Вигнер [3] предложил подход для вычисления статистических средних измеряемых наблюдаемых величин. При этом вво-

дилась «весовая» функция $w(Q)$, связанная с матрицей плотности; причем статистическая информация как бы «перемещалась» от матрицы плотности к «весовой» функции. Комплексный аргумент «весовой» функции Q представляет точку фазового пространства (q, p) исследуемой системы. Основная цель работы Вигнера состояла в том, чтобы *вместо* волновой функции использовать функцию распределения вероятностей в фазовом пространстве. Функция Вигнера нашла большое применение в статистической физике, изучении когерентных свойств света [4–7] и т. п. По существу, Вигнер предложил специальный метод усреднения по квантово-механическому ансамблю, состоящий из процедуры интегрирования по c -числовым переменным в фазовом пространстве [4]. Было установлено, что этой цели могут служить большое разнообразие функций распределения квазивероятностей в фазовом пространстве [8]; функция Вигнера является одним специальным случаем подобного рода распределений. Термин «квазивероятность» необходимо подчеркнуть; функция Вигнера *играет роль* функции распределения вероятностей в фазовом пространстве, но она не удовлетворяет всем свойствам нормального распределения вероятностей. При этом были найдены общие рецепты установления соответствия между функциями распределения в фазовом пространстве и правилами сопоставления классическим величинам их квантово-механических аналогов — т. е. операторов [4–8]. Существует большое число функций распределения квазивероятностей в фазовом пространстве, служащих тем же целям, что и функция Вигнера [8–10]. В частности, Мойэл [10] в 1949 г. сформулировал общий подход к квантовой механике как статистической теории, или, точнее, как виду «индетерминистической статистической динамики». В этом подходе «функции распределения для полных систем динамических переменных, характеризующих систему, выражаются через волновые векторы квантовой теории. Эти фазовые функции распределения играют основную роль в статистической теории. Показано, что используемая процедура эквивалентна выбору определенного типа теории функций некоммутирующих операторов и, следовательно, может рассматриваться как интерпретация квантовой кинематики» [10]. Далее, на основании уравнений движения квантовой динамики выводились соотношения, определяющие изменения этих фазовых распределений со временем. Оказалось, что они имеют вид, характерный для динамических стохастических процессов. Было показано, что этими уравнениями эволюции в фазовом пространстве можно пользоваться вместо уравнения Шрёдингера. Функция Вигнера и другие функции распределения в фазовом пространстве продолжают интенсивно изучаться и находят все новые области приложения [11–14]. Недавно было показано (в том числе экспериментально), что можно охарактеризовать меру неклассичности квантовых состояний, измеряя объем отрицательной части функции Вигнера [15]. Другие аспекты квантовой теории в фазовом пространстве и разнообразные приложения можно найти в книгах и обзорах [1, 2, 5, 16–20].

1. Kim Y.S., Noz M.E. Phase Space Picture of Quantum Mechanics. Singapore: World Scientific, 1991.
2. Zachos C., Fairlie D., Curtright T. Quantum Mechanics in Phase Space. Singapore: World Scientific, 2005.

3. *Wigner E. P.* The General Properties of the Distribution Function and Remarks on its Weakness // The Physics of Phase Space / Eds. Y. S. Kim, W. W. Zachary. Berlin: Springer, 1987. P. 162.
4. *Kim Y. S., Wigner E. P.* Covariant Phase Space Representation for Localized Light Waves // Phys. Rev. A. 1987. V. 36. P. 1293.
5. *Татарский В. И.* Вигнеровское представление в квантовой механике // УФН. 1983. Т. 139. С. 587.
6. *Reusen M.* The Wigner Function as Distribution Function // Found. Phys. 2006. V. 36. P. 546.
7. *Cahill K. E., Glauber R. J.* Density Operators and Quasiprobability Distributions // Phys. Rev. 1969. V. 177. P. 1882.
8. *Cohen L.* Generalized Phase-Space Distribution Functions // J. Math. Phys. 1966. V. 7. P. 781.
9. *Schleich W., Walls D. F., Wheeler J. A.* Area of Overlap and Interference in Phase Space versus Wigner Pseudoprobabilities // Phys. Rev. A. 1988. V. 38. P. 1177.
10. *Мойэл Дж.* Квантовая механика как статистическая теория // Вопросы причинности в квантовой механике. М.: Изд-во иностр. лит., 1955. С. 208; *Moyle J. E.* // Proc. Camb. Phil. Soc. 1949. V. 45. P. 99.
11. *Torres-Vega Go., Frederick J. H.* Numerical Method for the Propagation of Quantum-Mechanical Wave Function in Phase Space // Phys. Rev. Lett. 1991. V. 67. P. 2601.
12. *Hug M., Menke C., Schleich W.* Modified Spectral Method in Phase Space: Calculation of the Wigner Function. I. Fundamentals // Phys. Rev. A. 1998. V. 57. P. 3188.
13. *Hug M., Menke C., Schleich W.* Modified Spectral Method in Phase Space: Calculation of the Wigner Function. II. Generalizations // Phys. Rev. A. 1998. V. 57. P. 3206.
14. *Leibfried D., Pfau T., Monroe C.* Shadows and Mirrors: Reconstructing Quantum States of Atom Motion // Phys.Today. 1998. No. 4. P. 22.
15. *Kenfack A., Życzkowski K.* Negativity of the Wigner Function as an Indicator of Non-Classicality // J. Opt. B: Quantum Semiclass. Opt. 2004. V. 6. P. 396.
16. *Hillery M., O'Connell R. F., Scully M. O., Wigner E. P.* Distribution Functions in Physics: Fundamentals // Phys. Rep. 1984. V. 106. P. 121.
17. *Balazs N. L., Jennings B. K.* Wigner's Function and Other Distribution Functions in Mock Phase Space // Phys. Rep. 1984. V. 104. P. 347.
18. *Lee H.-W.* Theory and Application of the Quantum Phase-Space Distribution Functions // Phys. Rep. 1995. V. 259. P. 147.
19. *Bayfield J. E.* Quantum Evolution. New York: John Wiley and Sons, 1999.
20. *Куземский А. Л.* // Физика элементарных частиц и атомного ядра. 2008. Т. 39. вып. 1. С. 5–81.

А. Л. Куземский

О РАЗДЕЛЕНИИ СИСТЕМЫ НА ЧАСТИ — КВАНТОВУЮ И КЛАССИЧЕСКУЮ *

Совместно с Я. Б. Дашевским

Исследуются возможности разделения взаимодействующей системы на части: квантовую и классическую. Указывается вид возмущения, оказываемого классической частью на квантовую. Рассмотрены примеры столкновений и уравнений для модулированных движений.

§ 1. Введение

Среди физических задач, которые должны быть решены методами квантовой механики, имеются такие, когда подлежащая исследованию система взаимодействующих частиц обладает тем свойством, что одна ее часть во время процессов, происходящих в системе, движется так, как если бы она подчинялась классическим законам движения, т. е. ее движение происходит по траектории. В этом случае эта часть взаимодействующей системы на языке квантовой механики может быть описана с помощью волнового пакета, который настолько медленно расплывается, что то время, в течение которого он успеет сколько-нибудь заметным образом расплыться, будет велико по сравнению с длительностью интересующих нас квантовых процессов, происходящих в той части системы, которая подчиняется существенно квантовым законам. В этом случае рассматриваемую систему взаимодействующих частиц удобно разделить на две части: «квантовую» и «классическую».

Так, например, в теории столкновений одна часть взаимодействующей системы рассматривается как заданный движущийся силовой центр, подчиняющийся классическим законам, в то время как вторая часть — «квантовая» (атом, молекула) подвергается возмущению со стороны «силового центра».

Мы ставим здесь задачу указать некоторый общий метод, с помощью которого возможно произвести разделение системы и указать вид возмущения, оказываемого «классической» частью на «квантовую».

§ 2. Разделение системы

Мы будем исходить из уравнения Шрёдингера для взаимодействующих частиц (или степеней свободы)

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = [H_0(x) + H_0(X) + W(x, X)]\Psi, \quad (1)$$

* ЖЭТФ. 1941. Т. 11. С. 222–225.

где x — совокупность координат (степеней свободы) частиц, подчиняющихся существенно «квантовым» законам; X — совокупность координат (степеней свободы) частиц, подчиняющихся «классическим» законам движения; $W(x, X)$ — потенциальная энергия их взаимодействия, а $H_0(x)$ и $H_0(X)$ — независимые от времени гамильтонианы, действующие на x и X соответственно. Если бы взаимодействия не существовало, то система разделилась бы на две:

$$i\hbar \frac{\partial \varphi}{\partial t} = H_0(x) \varphi(x, t), \quad (1a)$$

$$i\hbar \frac{\partial \Phi}{\partial t} = H_0(X) \Phi(X, t). \quad (1б)$$

Мы предположим, что с помощью собственных функций уравнения (1б) можно построить очень медленно расплывающийся волновой пакет, описывающий поведение частицы (или степени свободы) X . Тот факт, что совокупность X подчиняется «классическим» законам движения, выразим тем, что будем пренебрегать в дальнейшем реакцией, оказываемой на нее «квантовой частью», когда взаимодействие между ними существует.

Для момента времени $t = 0$ мы можем выбрать решение (1) совершенно произвольно. Выберем его в форме

$$\Psi_0 = \psi(x, 0) \Phi(X, 0).$$

Теперь мы хотим функцию ψ выбрать таким образом, чтобы функция

$$\Psi = \psi(x, t) \Phi(X, t) \quad (2)$$

представляла собой с достаточной точностью решение уравнения (1) и в дальнейшем, т. е. для $t > 0$. Для этого рассмотрим уравнение

$$i\hbar \frac{\partial \psi(x, t)}{\partial t} = H_0(x) \psi(x, t) + v(x, t) \psi(x, t), \quad (1a')$$

где

$$v(x, t) = \int \Phi^* W(x, X) \Phi dX.$$

Это уравнение отличается от (1a) последним членом. Покажем, что если в (2) подразумевать под $\psi(x, t)$ решение (1a'), то при некоторых условиях, которые мы в дальнейшем установим, (2) является достаточно хорошим приближением для решения (1). Представление решения (1) в виде (2) и дает возможность разделить взаимодействующую систему на части «квантовую» и «классическую».

Чтобы оценить, насколько (2) является хорошим приближением для точного решения (1), мы будем искать точное решение (1) в виде

$$\Psi = \psi(x, t) \Phi(X, t) + U(x, X, t). \quad (3)$$

Рассматриваем U как поправку, тогда степень приближения будет определяться поведением функции U . В силу произвольности выбора Ψ при $t = 0$, мы

положим $U(x, X, 0) = U_0 = 0$. Подставляя (3) в (1) и принимая во внимание (1а') и (1б), получим для функции U уравнение

$$i\hbar \frac{\partial U}{\partial t} = \left[W(x, X) - \int \Phi^* W(x, X) \Phi dX \right] \psi \Phi + [H_0(x) + H_0(X) + W(x, X)] U. \quad (4)$$

Таким образом, степень приближения определяется малостью члена

$$\Delta = W(x, X) - \int \Phi^* W(x, X) \Phi dX.$$

Если бы имело место условие $\Delta = 0$, то U удовлетворяло бы тому же самому уравнению, что и Ψ , тогда (2) было бы точным решением (как разность двух решений).

Теперь установим условие малости функции U .

Из (4) следует, что

$$i\hbar \frac{\partial U}{\partial t} \Big|_{t=0} = \left[W(x, X) - \int \Phi^* W(x, X) \Phi dX \right] \psi \Phi. \quad (5)$$

Рассмотрим матричный элемент

$$\begin{aligned} \int \Phi^* W(x, X) \Phi dX &= \int \Phi^*(\bar{X} + \xi) W(x, \bar{X} + \xi) \Phi(x, \bar{X} + \xi) d\xi = \\ &= W(x, \bar{X}) + \frac{1}{2!} \frac{\partial^2 W}{\partial \bar{X}^2} \overline{\Delta X^2} + \dots, \end{aligned}$$

где \bar{X} — центр тяжести волнового пакета, $\overline{\Delta X^2} = \int \Phi^*(X - \bar{X})^2 \Phi d\xi$. Подставляя последнее в (5) и разлагая $W(x, X)$ в ряд Тейлора в окрестности \bar{X} , получим

$$i\hbar \frac{\partial U}{\partial t} \Big|_{t=0} = \frac{\partial W}{\partial \bar{X}} (X - \bar{X}) \psi \Phi + \dots + \text{члены третьего порядка.}$$

В первом приближении можно положить

$$U = U_1 = \frac{1}{i\hbar} \int_0^t \frac{\partial W}{\partial \bar{X}} (X - \bar{X}) \Phi \psi dt.$$

Далее, U_1 можно рассматривать как малую поправку, если

$$|U_1| = \left| \frac{1}{i\hbar} \int_0^t \frac{\partial W}{\partial \bar{X}} (X - \bar{X}) \Phi \psi dt \right| \ll |\psi \Phi|. \quad (6)$$

По порядку величины это неравенство означает, что

$$\frac{\Delta W(t)t}{\hbar} \ll 1,$$

где $\Delta W(t) = (\partial W / \partial X) \Delta X$ — изменение потенциальной энергии на протяжении размеров пакета, а ΔX — размеры пакета, которые, вообще говоря, возрастают со временем.

§ 3. Столкновения

Рассуждения § 2 включают в себя теорию столкновений, основанную на методе параметра удара (или так называемого прицельного расстояния). Функцию $v(x, t)$ в уравнении (1a') можно трактовать как возмущение, которое оказывает на атом — движущийся силовой центр в теории столкновений, развитой Каунтом [1].

При очень больших энергиях падающей частицы, таких, что изменение импульса или энергии падающей частицы при неупругих столкновениях будет мало по сравнению с ее полным импульсом,

$$v(x, t) = \int \Phi^* W(x, X) \Phi dX = -\frac{eE_{st}}{vt - r},$$

где e, E_{st} — заряды электрона и падающей частицы, v — скорость ее движения¹.

Легко видеть, что в этом случае условие (6) есть условие применимости метода параметра удара, которое сводится к тому, что применимость метода оправдана тогда, когда удается построить для падающей частицы волновой пакет, размеры которого малы по сравнению с размерами атома и продолжают оставаться малыми при прохождении его через атом [3, 4]. Это всегда имеет место для α -частиц и быстрых электронов, для которых, как уже указывалось, потери энергии или изменение импульса ничтожны по сравнению с ее полным импульсом.

§ 4. Уравнения для модулированных движений

Под уравнениями для модулированных движений мы будем понимать такие уравнения, в которых параметры системы (момент инерции, масса, частота и т. д.) являются периодическими функциями времени, описывающими малые колебания этих параметров.

Мы получим уравнения для модулированных движений, заставляя «квантовую» систему взаимодействовать с «классической».

$$v(x, t) = \int \Phi^* W(x, X) \Phi dX$$

имеет такой вид, что уравнение (1a') может быть рассмотрено как изменение параметров уравнения (1a). Возможность такого рассмотрения определяется неравенством (6). Разъясним вышеизложенное примером модуляций вращения малыми колебаниями.

Пусть частица массы m находится в силовом поле $V(r)$. Для простоты рассмотрим вращение и колебание в плоскости. Уравнение Шрёдингера будет иметь вид

$$i\hbar \frac{\partial \Psi(r, \varphi)}{\partial t} = H(r) \Psi + \frac{p_\varphi^2}{2I(r)} \Psi,$$

где $I(r)$ — момент инерции, p_φ — оператор импульса.

¹ Если предположить, как это делает Мотт [2], что падающая частица описывается точечным пакетом.

Чтобы отделить колебания, которые мы будем считать заданными, от вращения, будем искать Ψ в виде

$$\Psi(r, \varphi, t) = \Phi(t) \psi(\varphi, t) + U(r, \varphi, t).$$

Уравнения (1б) и (1а) будут иметь вид

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial \Phi}{\partial t} &= H(r)\Phi, \\ i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} &= \frac{p_\varphi^2}{2I(\bar{r})}\psi, \end{aligned} \quad (7)$$

где $\bar{r} = \bar{r}(t)$ — центр тяжести волнового пакета, описывающего колебания. Уравнение (7) описывает вращение с модулированным моментом инерции. Такое представление возможно, если выполнено условие

$$|U| = \left| \frac{1}{i\hbar} \int_0^t \frac{p_\varphi^2}{2} \left[\frac{1}{I(\bar{r})} - \frac{1}{I(r)} \right] \Phi \psi dt \right| \ll \Phi \psi.$$

Мы здесь не будем заниматься нахождением решений таких уравнений. Они могут быть решены методами теории возмущений¹.

Список литературы

1. *Count* // Proc. Cambr. Phil. Soc. 1937. V. 23. P. 732.
2. *Mott N. F.* // Proc. Cambr. Phil. Soc. 1931. V. 27. P. 553.
3. *Williams E.* // Proc. Roy. Soc. A. 1933. V. 139. P. 163.
4. *Mott H., Messu G.* Теория атомных столкновений. М.–Л.: ОНТИ, 1936. С. 216.

Физический институт
Академии Наук УССР, Киев

Поступила
15 октября 1940 г.

Комментарий. Данная работа Д. И. Блохинцева не только интересна сама по себе, но и демонстрирует его глубокую интуицию и способность к предвидению важности исследуемых им проблем. По словам авторов, «среди физических задач, которые должны быть решены методами квантовой механики, имеются такие, когда подлежащая исследованию система взаимодействующих частиц обладает тем свойством, что одна ее часть во время процессов, происходящих в системе, движется так, как если бы она

¹ Один тип уравнений для модулированных движений (осциллятор с частотой $\omega = \omega_0(1 + \alpha \cos pt)$) был весьма изящным методом решен С. М. Рытовым (Москва, неопубликованная работа).

подчинялась классическим законам движения, т. е. движение происходит по траектории».

В работе исследовалась возможность разделения взаимодействующей системы на части: квантовую и классическую. Был указан вид возмущения при воздействии классической части на квантовую. Были рассмотрены также примеры из теории столкновений и уравнений для модулированных движений. Сам Д. И. Блохинцев пишет об этой работе в своем автореферате следующее: «Эта работа проводилась совместно с Я. Б. Дашевским (трагически погибшем в Дарницком лагере от рук фашистов) и вытекала из моего давнего интереса к вопросу о взаимодействии классической системы с квантовой. Позднее это привело меня к важному шагу в понимании механизма квантово-механических измерений».

Эта проблематика в последующие годы приобрела большой интерес [1–3], в особенности во многих задачах физической химии [4–6]. На эту тему написано большое число работ, часть из которых подробно рассмотрена в обзорах [6–12]. Важно отметить, что данная проблематика имеет выход на фундаментальные проблемы квантовой теории, а именно проблему взаимодействия классической системы с квантовой системой [13–14], т. е. проблему взаимодействия квантовой системы с прибором. Выход на проблему измерения в квантовой механике здесь только намечается и будет развит Блохинцевым в дальнейшем в работах № 68 и № 70.

1. Герасименко В. И., Петрина Д. Я. Статистическая механика квантовых-классических систем. Неравновесные системы // ТМФ. 1980. Т. 42. С. 88.
2. Герасименко В. И. Динамические уравнения квантовых-классических систем // ТМФ. 1982. Т. 50. С. 77.
3. Петрина Д. Я., Герасименко В. И., Энольский В. З. Уравнения движения для одного класса квантовых-классических систем // ДАН СССР. 1990. Т. 315. С. 75.
4. Kapral R., Ciccotti G. Mixed Quantum-Classical Dynamics // J. Chem. Phys. 1999. V. 110. P. 8919.
5. Nielsen S., Kapral R., Ciccotti G. Non-Adiabatic Dynamics in Mixed Quantum-Classical Systems // J. Stat. Phys. 2000. V. 101. P. 225.
6. Kapral R., Sergi A. Quantum-Classical Wigner-Liouville Equation // Ukrain. Math. J. 2005. V. 57. P. 891.
7. Kapral R., Ciccotti G. A Statistical Mechanical Theory of Quantum Dynamics in Classical Environments // Bridging Time Scales: Molecular Simulations for the Next Decade / Eds. P. Nielaba, M. Mareshal, G. Ciccotti. Lect. Notes Phys. Berlin: Springer, 2002. V. 605. P. 445.
8. Kapral R. Progress in the Theory of Mixed Quantum-Classical Dynamics // Annu. Rev. Phys. Chem. 2006. V. 57. P. 129.
9. Kapral R., Ciccotti G. Transport Coefficients of Quantum-Classical Systems // Lect. Notes Phys. Berlin: Springer, 2006. V. 703. P. 519.
10. Wyatt R. E. Quantum Dynamics with Trajectories. Berlin: Springer, 2005. Ch. 12. Mixed Quantum-Classical Dynamics.
11. Ciccotti G., Coker D. F., Kapral R. Quantum Statistical Dynamics with Trajectories // Quantum Dynamics of Complex Molecular Systems (Springer Series in

- Chemical Physics. V. 83) / Eds. D. A. Micha, I. Burghardt. Berlin: Springer, 2007. P. 275.
12. *Hanna G., Kim H., Kapral R.* Quantum-Classical Reaction Rate Theory // Quantum Dynamics of Complex Molecular Systems (Springer Series in Chemical Physics. V. 83) / Eds. D. A. Micha, I. Burghardt. Berlin: Springer, 2007. P. 295.
 13. *Halliwell J. J.* Effective Theories of Coupled Classical and Quantum Variables // Open Systems and Measurement in Relativistic Quantum Theory / Eds. H. P. Breuer, F. Petruccione. Lect. Notes Phys. Berlin: Springer, 1999. V. 526. P. 153.
 14. *Truhlar D. G.* Decoherence in Combined Quantum Mechanical and Quantum Mechanical Methods for Dynamics as Illustrated for Non-Born-Oppenheimer Trajectories // Quantum Dynamics of Complex Molecular Systems (Springer Series in Chemical Physics. V. 83) / Eds. D. A. Micha, I. Burghardt. Berlin: Springer, 2007. P. 227.
 15. *Leibfried D., Pfau T., Monroe C.* // Phys. Today. 2003. V. 56, № 4. P. 22.
 16. *Zachos C., Fairlie D., Curtright T.* Quantum Mechanics in Phase Space. Singapore: World Scientific, 2005.
 17. *Wigner E. P.* The General Properties of the Distribution Function and Remarks on its Weakness // The Physics of Phase Space / Eds. Y. S. Kim, W. W. Zachary. Berlin: Springer, 1987. P. 162.
 18. *Kim Y. S., Wigner E. P.* Covariant Phase Space Representation for Localized Light Waves // Phys. Rev. A. 1987. V. 36. P. 1293.
 19. *Stenholm S.* The Wigner Function. I: The Physical Interpretation // Eur. J. Phys. 1980. V. 1. P. 244.
 20. *Татарский В. И.* Вигнеровское представление в квантовой механике // УФН. 1983. Т. 139. С. 587.
 21. *Reusen M.* The Wigner Function as Distribution Function // Found. Phys. 2006. V. 36. P. 546.
 22. *Cahill K. E., Glauber R. J.* Density Operators and Quasiprobability Distributions // Phys. Rev. 1969. V. 177. P. 1882.
 23. *Cohen L.* Generalized Phase-Space Distribution Functions // J. Math. Phys. 1966. V. 7. P. 781.
 24. *Schleich W., Walls D. F., Wheeler J. A.* Area of Overlap and Interference in Phase Space versus Wigner Pseudoprobabilities // Phys. Rev. A. 1988. V. 38. P. 1177.
 25. *Мойэл Дж.* Квантовая механика как статистическая теория // Вопросы причинности в квантовой механике. М.: Изд-во иностр. лит., 1955. С. 208. [*Moyal J. E.* // Proc. Camb. Phil. Soc. 1949. V. 45. P. 99.]
 26. *Torres-Vega Go., Frederick J. H.* Numerical Method for the Propagation of Quantum-Mechanical Wave Function in Phase Space // Phys. Rev. Lett. 1991. V. 67. P. 2601.
 27. *Hug M., Menke C., Schleich W.* Modified Spectral Method in Phase Space: Calculation of the Wigner Function. I. Fundamentals // Phys. Rev. A. 1998. V. 57. P. 3188.
 28. *Hug M., Menke C., Schleich W.* Modified Spectral Method in Phase Space: Calculation of the Wigner Function. II. Generalizations // Phys. Rev. A. 1998. V. 57. P. 3206.
 29. *Leibfried D., Pfau T., Monroe C.* // Phys. Today. 2003. V. 56, № 4. P. 22.

30. *Kenfack A., Zyczkowski K.* Negativity of the Wigner Function as an Indicator of Non-Classicality // J. Opt. B: Quantum Semiclass. Opt. 2004. V. 6. P. 396.
31. *Hillery M., O'Connell R. F., Scully M. O., Wigner E. P.* Distribution Functions in Physics: Fundamentals // Phys. Rep. 1984. V. 106. P. 121.
32. *Balazs N. L., Jennings B. K.* Wigner's Function and Other Distribution Functions in Mock Phase Space // Phys. Rep. 1984. V. 104. P. 347.
33. *Lee H.-W.* Theory and Application of the Quantum Phase-Space Distribution Functions // Phys. Rep. 1995. V. 259. P. 47.
34. *Bayfield J. E.* Quantum Evolution. New York: John Wiley and Sons, 1999.
35. *Куземский А. Л.* // Физика элементарных частиц и атомного ядра. 2008. Т. 39, вып. 1. С. 5–81.

А. Л. Куземский

АТОМ В ПОЛЕ ЗРЕНИЯ ЭЛЕКТРОННОГО МИКРОСКОПА*

Обсуждается положение, возникающее при наблюдении атома в электронный микроскоп. Показано, что возможно получить несколько тысяч рассеянных электронов, прежде чем атом будет выбит из занимаемого им места.

В связи с намечающейся тенденцией к увеличению разрешающей силы электронного микроскопа как путем перехода к более коротким волнам, так и путем усовершенствования оптической системы, вопрос о возможности наблюдать отдельный атом начинает приобретать практический интерес. Он представляет также интерес и с теоретической точки зрения, так как при наблюдении в электронный микроскоп одного атомарного объекта изображение будет возникать в результате повторения единичных актов рассеяния на одном и том же объекте, в то время как в квантовой механике обычно формулируют результаты по отношению к совокупности объектов, находящихся в одном и том же исходном состоянии. В силу воздействия на атом каждый новый акт рассеяния будет, вообще говоря, заставлять атом в новом исходном состоянии¹. Поэтому важно проанализировать, как будет влиять рассеяние электронов на состояние наблюдаемого атома².

Во-первых, мы хотим отметить, что возбуждение атома не играет существенной роли. В самом деле, плотность тока j в месте нахождения объекта наблюдения не превышает $0,1 \text{ А/см}^2$ (ср. [1]), поэтому промежуток времени τ между отдельными актами рассеяния

$$\tau = \frac{e}{Qj} \quad (1)$$

(e — заряд электрона, Q — полное эффективное сечение атома $Q < 10^{-16} \text{ см}^2$), будет больше 10^{-2} с . За это время атом успеет возвратиться из возбужденного состояния в нормальное (время жизни $\sim 10^{-8} \text{ с}$), которое будет, таким образом, благодаря излучению само собой восстанавливаться. Особого

* ЖЭТФ. 1947. Т. 17, вып. 9. С. 814–817.

¹ Если атом находится первоначально в «чистом» состоянии ψ_0 , то после удара электрона он будет находиться в одном из состояний $\psi_0, \psi_1, \psi_2, \dots$ с вероятностями W_0, W_1, W_2, \dots («смешанное» состояние). При следующем ударе эта смесь перейдет в новую W'_0, W'_1, W'_2, \dots и т. д.

² Этот вопрос отчасти обсуждается в книге Арденне [1]; однако требуется более основательное рассмотрение, которое мы предлагаем в этой статье. Недавняя работа де Бройля [2] вполне перекрывается результатами Арденне и не имеет отношения к реальным случаям.

рассмотрения требовала бы ионизация, так как рекомбинация существенно зависит от условий, в которых находится атом (например, от природы «предметного стекла»).

Однако из дальнейшего будет видно, что и это явление не имеет большого значения в сравнении с эффектом отдачи при упругом рассеянии. Эта отдача особенно опасна, так как при достаточно большой отдаче атом может быть, вообще, сбит с места (мы будем считать, что атом адсорбирован на поверхности пленки «предметного стекла»), и тем самым изображение будет полностью испорчено (фотографирующийся «клиент» сбежит со своего стула!). Именно эту сторону дела мы и намерены рассмотреть в этой работе.

Известным путем, в борновском приближении, для эффективного поперечника рассеяния электрона в угол $d\Omega$ получается формула

$$dQ_{p'E'n'}(\vartheta) = d\Omega \frac{\mu^2}{4\pi\hbar^4} \frac{v'}{v} |(\mathbf{p}'E'n'|w|\mathbf{p}En)|^2, \quad (2)$$

где μ — масса электрона, \mathbf{p} — импульс первичного электрона, E — энергия (и другие квантовые числа), относящаяся к движению атома как целого, n — квантовые числа электронов в атоме, v — скорость первичного электрона, \mathbf{p}' , E' , n' , v' — те же величины после рассеяния, ϑ — угол рассеяния (угол между \mathbf{p}' и \mathbf{p}). Простое вычисление показывает, что матричный элемент в (2) равен

$$(\mathbf{p}'E'n'|w|\mathbf{p}En) = \int \Phi_{E'}^*(\mathbf{x}) \zeta_{n'n}(\Delta\mathbf{p}, \mathbf{x}) e^{i\Delta\mathbf{p}\mathbf{x}/\hbar} \Phi_E(\mathbf{x}) d\mathbf{x}, \quad (3)$$

где \mathbf{x} есть координата центра тяжести атома, а $\Phi_E(\mathbf{x})$ — волновая функция, описывающая движение центра тяжести адсорбированного атома, $\Delta\mathbf{p} = \mathbf{p}' - \mathbf{p}$ есть изменение импульса электрона при рассеянии, $\zeta_{n'n}(\Delta\mathbf{p}, \mathbf{x})$ есть атомный фактор (электронов и ядра атома). Зависимость его от \mathbf{x} выражает влияние на рассеяние деформации электронной оболочки, имеющей место при колебаниях атома. Этим влиянием мы будем пренебрегать. Тогда $\zeta_{n'n}$ попросту совпадает с атомным фактором свободного атома. Мы будем далее считать атом настолько тяжелым, что его волновая функция для возбужденного состояния (E') может быть взята в квазиклассическом приближении

$$\Phi_{E'}(x) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \sin \frac{S_{E'}(x)}{\hbar}, \quad (4)$$

где $S_{E'}(x)$ есть функция действия. Что касается нижнего (исходного состояния), то здесь предпочтительней использовать квантовую функцию осциллятора

$$\Phi_E(x) = \Phi_0(x) = \frac{1}{\sqrt{a\sqrt{\pi}}} e^{-x^2/2a^2}, \quad a = \sqrt{\frac{\hbar}{M\omega}}, \quad (5)$$

где M — масса атома, а ω — частота нулевых колебаний атома в адсорбированном состоянии.

Атом будет выбит со своего места, если $E' > D$, где D — энергия адсорбции. Приближение (4) будет верно, если энергия адсорбции $D \gg \hbar\omega/2$ ($\hbar\omega/2$ — энергия нулевых колебаний $\sim 0,1$ эВ, а $D \sim 1$ эВ).

Разлагая (4) около $x = 0$

$$\Phi_{E'} = \frac{1}{2i\sqrt{\pi}} \left\{ \exp \left[-\frac{i}{\hbar} S_{E'}(0) - \frac{i}{\hbar} P_{E'} x + \dots \right] - \text{компл. сопряженн.} \right\}, \quad (4')$$

где $P_{E'} = (\partial S_{E'}/\partial x)_0$ есть проекция импульса атома на ось Ox в состоянии E' , в точке $x = 0$, и, подставляя (4') в (3), после простого интегрирования получаем

$$|(\mathbf{p}' E' n' | w | \mathbf{p} E n)|^2 = |\zeta_{n'n}|^2 \left(\frac{a}{\sqrt{\pi}} \right)^3 \exp \left[-\frac{a}{\hbar^2} (\mathbf{p}' E' - \Delta \mathbf{p})^2 \right]. \quad (6)$$

Появляющийся здесь множитель имеет δ -образный характер. Ширина этой δ -функции — порядка средней величины импульса в нижнем состоянии, которая составляет $P_0 = \sqrt{M\hbar\omega/2}$, а $P_{E'} > \sqrt{2MD}$, поэтому $P_{E'}/P_0 = \sqrt{4D/\hbar\omega}$ и при $D \gg \hbar\omega/2$ мы можем пренебречь импульсом нулевых колебаний, а вместе с тем считать множитель при $|\zeta_{n'n}|^2$ δ -функцией. Это означает, что мы можем в этом случае при подсчете матричного элемента (6) считать, что имеет место закон сохранения импульса¹

$$\mathbf{p}'_{E'} = \Delta \mathbf{p}. \quad (7)$$

Приобретаемая атомом энергия E' будет равна

$$E' = \frac{\mathbf{p}'_{E'}{}^2}{2M} = \frac{\Delta \mathbf{p}^2}{2M} = \frac{2}{Mc^2} (\varepsilon^2 - \mu^2 c^2) \sin^2 \frac{\vartheta}{2}, \quad (8)$$

где $\varepsilon = T + \mu c^2$, T — кинетическая энергия электрона, а μc^2 — энергия покоящегося электрона.

Разрешающая сила микроскопа, поскольку она зависит от характера рассеяния, определяется величиной $\min(2\pi\hbar/|\Delta \mathbf{p}|)$. Эта величина равна $\lambda/2 \sin(\vartheta/2)$ (λ — длина волны электрона), если допускаются любые углы рассеяния ϑ . Если же иметь в виду, что при достаточно больших изменениях импульса электрона $\Delta \mathbf{p}$ энергия E' может стать больше D и атом будет выбит со своего места, то из (8) найдем, что максимальное значение $|\Delta \mathbf{p}|$ будет $\sqrt{2MD}$. Поэтому разрешающая сила определяется большей из величин:

$$\Delta x \geq \frac{\lambda}{2} \sin \frac{\vartheta}{2} \quad \text{или} \quad 2\pi \sqrt{\frac{\hbar^2}{2MD}}. \quad (9)$$

Вторая граница вступает в силу, когда $(2/Mc^2)(\varepsilon^2 - \mu^2 c^4) \sin^2 \vartheta/2 > D$; при $D \sim 1$ эВ для тяжелых атомов (атомный вес $A > 10$) это будет при $T \sim 10^5$ эВ, т. е. для релятивистских электронов.

¹ Если условие $D \gg \hbar\omega/2$ не выполняется, то требуются более подробные модельные представления о характере адсорбционных сил. Расчеты для этого случая проводятся.

В кинематической области, определяемой второй границей, возможны опасные удары, когда передаваемая энергия будет больше D . Вычислим, каково будет отношение этих опасных ударов к полному их числу. Если через $Q(D)$ обозначить эффективное сечение для опасных ударов ($E' > D$), а через Q — полное сечение, то мы будем иметь один опасный удар на N безопасных, причем

$$N = \frac{Q}{Q(D)}. \quad (10)$$

Полное сечение $Q = Q' + Q''$, где Q' — сечение для упругих ударов, а Q'' — для неупругих (включая ионизацию). Q'' мы можем определить из известных формул для торможения (см. [3])

$$Q'' = \frac{3}{16} \Phi_0 \frac{4\mu c^2}{I\beta^2} \left(\ln \frac{\varepsilon - \mu c^2}{2\mu c^2} \frac{\varepsilon^2 \beta^2}{I^2 Z^2} + \frac{\mu^2 c^4}{\varepsilon^2} \right), \quad (11)$$

где $\Phi_0 = 2,5 \cdot 10^{-25}$ см², $\beta = v/c$, $I Z$ — средняя потеря энергии при ударе ($I = 13,5$ эВ), Z — номер элемента.

С другой стороны, для упругого рассеяния на ядре на угол ϑ имеем [3]

$$Q'(\vartheta) = \frac{3}{16} \Phi_0 Z^2 \frac{2\varepsilon^2 \mu^2 c^4}{(\varepsilon^2 - \mu^2 c^4)^2} \left(\frac{1}{\sin^2 \vartheta/2} - 1 - 2 \frac{\varepsilon^2 - \mu^2 c^4}{\varepsilon^2} \ln \sin \frac{\vartheta}{2} \right). \quad (12)$$

Полное эффективное сечение для упругих ударов получим, если вместо ϑ подставить в (12) угол ϑ_{\min} , соответствующий полному экранированию заряда ядра зарядом электронной оболочки. Последнее наступает при $\sin^2 \vartheta_{\min}/2 = \frac{c^2}{4(\varepsilon^2 - \mu^2 c^4)} \frac{\hbar^2}{a^2}$, где $a = a_0 Z^{-1/3}$; $a_0 = \hbar^2/\mu c^2$ — радиус боровской орбиты, а a — радиус атома по Томасу–Ферми. Из (11) и (12) получаем

$$\frac{Q''}{Q'(\vartheta_{\min})} = \left(\frac{e^2}{\hbar c} \right)^2 Z^{2/3} \frac{\mu c^2}{I Z^2} \frac{\varepsilon^2 - \mu^2 c^4}{2\varepsilon^2 \beta^2} \left(\ln \frac{\varepsilon - \mu c^2}{2\mu c^2} \frac{\varepsilon^2 \beta^2}{I^2 Z^2} + \frac{\mu^2 c^4}{\varepsilon^2} \right). \quad (13)$$

Это отношение для тяжелых атомов мало, и в этом случае полное сечение можно отождествить с $Q'(\vartheta_{\min})$. В опасные удары следует включить те упругие удары, при которых угол отклонения больше ϑ_0 , причем (ср. (8))

$$\sin^2 \frac{\vartheta_0}{2} = \frac{M c^2 D}{2(\varepsilon^2 - \mu^2 c^4)}.$$

Что касается неупругих ударов и ударов, при которых имеет место ионизация, то ими можно пренебречь. В самом деле, амплитуда вероятности возбуждения атома (ζ_{n0}) мала в сравнении с амплитудой для упругого столкновения (ζ_{00}), если передаваемый при неупругом ударе импульс $\Delta p \gg \hbar/a^*$, где $a^* = a_0/Z^*$ есть эффективный радиус той электронной оболочки, которой принадлежит возбуждающийся в атоме электрон, а Z^* — эффективный заряд ядра.

Нас интересуют $\Delta p^2 > 2MD$, а величина $2MD > \hbar^2/a^{*2}$, так как последнее неравенство равносильно неравенству $140AD/Z^{*2} > 1$ (A — атомный вес атома, D в электронвольтах), которое выполнено для всех атомов и для всех электронных оболочек (при $D \sim 1$ эВ). Импульс, передаваемый ядру при ионизации, по порядку величины равен импульсу электрона в атоме p_0 . Последний составляет $p_0 = (\mu V_i)^{1/2}$, где V_i — потенциал ионизации. Из условия $\Delta p^2 = p_0^2 > 2MD$ получаем $V_i > 3700AD$, что для $D \sim 1$ эВ невозможно; поэтому передаваемый при этом процессе импульс оказывается недостаточным, чтобы выбить атом. Следовательно, роль неупругих столкновений сводится к поправке, которую мы будем игнорировать. В этом приближении $Q(D) = Q'(\vartheta_0)$ и мы получаем, что N попросту равно отношению $Q'(\vartheta_{\min})/Q'(\vartheta_0)$. Подставляя сюда значение Q' из (12) и игнорируя в $Q'(\vartheta_{\min})$ единицу и логарифмический член в сравнении с $\sin^{-2} \vartheta_{\min}/2$, находим

$$N = \frac{140AD}{Z^{2/3}} \left[1 - \frac{AD \cdot 10^9}{2(\varepsilon^2 - \mu^2 c^4)} - \frac{AD \cdot 10^9}{2\varepsilon^2} \ln \frac{AD \cdot 10^9}{2(\varepsilon^2 - \mu^2 c^4)} \right]^{-1}, \quad (14)$$

где ε , μc^2 и D выражены в электронвольтах.

При $D = 1$ эВ, $T = \varepsilon - \mu c^2 = 10^5$ эВ имеем для Cu: $N = 2250$, $\vartheta_0 = 64^\circ$ и для Hg: $N = 15000$, $\vartheta_0 = 144^\circ$. Таким образом, получаются сравнительно благоприятные числа. Тем не менее вряд ли можно рассчитывать на что-либо большее, чем констатирование факта наличия тяжелого атома.

Причина этого лежит в том, что электронная бомбардировка «предметного стекла» может поддерживать столь высокую температуру среды, окружающей атом, что амплитуда его колебаний может стать нежелательно большой. Эта сторона дела заслуживает специального рассмотрения.

Список литературы

1. von Ardenne M. // Elektronenübermikroskopie. 5.5. Berlin, 1940. V. 106. P. 291.
2. De-Broglie L. // Compt. Ren. 1946.
3. Гайтлер В. Квантовая теория излучения. М.: ИЛ, 1940.

Физический институт им. П. Н. Лебедева
Академии наук СССР

Поступила
20 января 1947 г.

Комментарий. В 1947 г. Д. И. Блохинцев публикует работу «Атом в поле зрения электронного микроскопа» (см. также разд. 16 книги Д. И. Блохинцева [1]). Известно, что в связи с дискуссией о физической интерпретации методов квантовой теории проблема оценки возможностей измерения была детально проанализирована Н. Бором [2] и В. Гейзенбергом [3]. Дискуссия между Бором и Гейзенбергом по этому вопросу привела к существенному продвижению в понимании квантовой теории [4]. Гейзенберг использовал

мысленный эксперимент с гамма-лучевым микроскопом для иллюстрации принципа неопределенности [5]. Этот прием стал впоследствии популярным и использовался неоднократно [6–11]. Д. И. Блохинцев существенно углубляет и расширяет круг обсуждаемых проблем по оценке возможностей измерения. Он пишет: «Эта работа, посвященная очень специальному вопросу, заслуживает упоминания ввиду несколько необычной постановки вопроса. Происхождение ее таково. Я обратил внимание на то, что под действием рассеянного электрона атом будет получать отдачу и может быть выбит из своей позиции на поверхности «предметного стекла». Если он не будет выбит при первом рассеянии, то он может быть выбит при последующих. Следует заметить, этот опыт не обычен с точки зрения привычной постановки измерений в квантовом ансамбле. Действительно, в этом случае мы имеем дело с повторением измерений на одном и том же экземпляре атома, а не на их совокупности, как это обычно делается. После каждого измерения состояние атома, вообще говоря, меняется, и он становится экземпляром другого квантового ансамбля. Таким образом, необходимая для получения изображения атома серия рассеяний состоит из серии рассеяний, относящихся к объектам, взятых из разных квантовых ансамблей. Кажется, это единственный случай подобной ситуации». Далее в своей статье Д. И. Блохинцев замечает: «В связи с намечающейся тенденцией к увеличению разрешающей силы электронного микроскопа как путем перехода к более коротким волнам, так и путем усовершенствования оптической системы, вопрос о возможности наблюдать отдельный атом начинает приобретать практический интерес». Поскольку в усовершенствовании микроскопа нуждались физики, химики, металлурги, биологи и т. д., то этот вопрос всегда вызывал повышенный интерес; в частности этой проблемой занимался Л. И. Мандельштам. Работа Д. И. Блохинцева продолжает развитие теории микроскопа, но уже на новом, квантовом этапе. Но не только прикладное значение обуславливало интерес к данной проблеме. Согласно Блохинцеву, развитие теории микроскопа «...представляет интерес и с теоретической точки зрения, так как при наблюдении в электронный микроскоп одного атомарного объекта изображение будет возникать в результате повторения единичных актов рассеяния на одном и том же объекте, в то время как в квантовой механике обычно формулируют результаты по отношению к совокупности объектов, находящихся в одном и том же исходном состоянии. В силу воздействия на атом каждый новый акт рассеяния будет, вообще говоря, заставлять атом в новом исходном состоянии. Поэтому важно проанализировать, как будет влиять рассеяние электронов на состояние наблюдаемого атома». Проведя такой анализ, Д. И. Блохинцев показал, что «...возможно получить несколько тысяч рассеянных электронов, прежде чем атом будет выбит из занимаемого им места» (см. разд. 16 книги Д. И. Блохинцева [1]). Он делает вывод: «Произведенные вычисления показали, что есть возможность получить многие тысячи рассеяний на тяжелом атоме типа Cu , Hg и т. д., без того, чтобы атом был полностью выбит из своей позиции. Как я тогда выразился, «фотографируемый клиент может быть выбит из кресла». В то время не удалось получить подобного портрета. Фотография отдельного атома была получена только недавно, американскими исследователями».

Последующее развитие физики подтвердило оправданность интереса Л. И. Мандельштама и Д. И. Блохинцева к проблемам теории микроскопа. Это направление получило большое развитие в последующие годы и продолжает интенсивно развиваться. При этом наряду с прикладными достижениями это направление стимулирует развитие самых фундаментальных аспектов квантовой теории. Подробный обзор различных типов современной техники микроскопии и их разнообразных приложений дан в книгах и обзорах [12–16].

1. *Блохинцев Д. И.* Основы квантовой механики. 5-е изд. М.: Наука, 1976.
2. *Bohr N.* The Quantum Postulate and the Recent Development of Atomic Theory // *Nature*. 1928. V. 121. P. 580.
3. *Heisenberg W.* The Physical Principles of the Quantum Theory. New York: Dover, 1949.
4. *Tanona S.* Uncertainty in Bohr's Response to the Heisenberg Microscope // *Studies in History and Philosophy of Science Part B: Studies in History and Philosophy of Modern Physics*. 2004. V. 35. P. 483.
5. *Busch P., Heinonen T., Lahti P.* Heisenberg's Uncertainty Principle // *Phys. Rep.* 2007. V. 452. P. 155.
6. *Roychoudhuri C.* Heisenberg's microscope — A misleading illustration // *Found. Phys.* 1978. V. 8. P. 845.
7. *Clauser J. F., Li S. F.* «Heisenberg microscope» decoherence atom interferometry // *Phys. Rev. A*. 1994. V. 50. P. 2430.
8. *Kurtsiefer Ch., Pfau T., Spalter S., Ekstrom C. R., Mlynek J.* A Heisenberg Microscope for Atoms // *Annals of the New York Academy of Sciences*. 1995. V. 755. P. 162.
9. *Vyatchanin S. P., Lavrenov A. Yu.* Heisenberg microscope and quantum variation measurement // *Phys. Lett. A*. 1997. V. 231. P. 38.
10. *Tomomura A.* Quantum Phenomena Visualized by Electron Waves // *Intern. J. Mod. Phys. B*. 2007. V. 21. P. 5291.
11. *Hadzidaki P.* The Heisenberg Microscope: A Powerful Instructional Tool for Promoting Meta-Cognitive and Meta-Scientific Thinking on Quantum Mechanics and the «Nature of Science» // *Science and Education*. 2008. V. 17. P. 613.
12. Атомы «глазами» электронов. М.: Знание, 1988.
13. *Binnig G.* In Touch with Atoms // *Rev. Mod. Phys.* 1999. V. 71. P. S324.
14. *Studer F., Hervieu M., Constantini J.-M., Toulemonde M.* High Resolution Electron Microscopy of Track in Solids // *Nucl. Instr. Meth. in Phys. Research B*. 1997. V. 122. P. 449.
15. *Phaneuf R. J., Schmid A. K.* Low-Energy Electron Microscopy: Imaging Surface Dynamics // *Phys. Today*. 2003. №3. P. 50.
16. Scanning Probe Microscopies Beyond Imaging. Manipulation of Molecules and Nanostructures / Ed. P. Samori. New York: Wiley-VCH, 2006.
17. *Куземский А. Л.* // *Физика элементарных частиц и атомного ядра*. 2008. Т. 39, вып. 1. С. 5–81.

А. Л. Куземский

ПРИНЦИП ДЕТАЛЬНОГО РАВНОВЕСИЯ И КВАНТОВАЯ МЕХАНИКА*

Показано, что квантовая механика приводит к равенству вероятности перехода из состояния l в состояние k и вероятности обратного перехода из k в l , если все скорости, спины частиц и внешнее магнитное поле в последнем случае заменены на противоположные. Установлено условие справедливости принципа детального равновесия, согласно которому вероятности прямого и обратного перехода равны между собой. Приведен пример системы, для которой не соблюдается принцип детального равновесия.

1. Принцип детального равновесия и обратимость

Согласно принципу детального равновесия (п. д. р.) вероятность перехода P_{kl} из некоторого состояния l в другое состояние k равна вероятности обратного перехода из состояния k в состояние l (в такой форме этот принцип используется при доказательстве H -теоремы). Весьма распространено неверное мнение, предполагающее, что этот принцип является прямым следствием законов квантовой механики [1]¹. Между тем, известно, что этот принцип, вообще говоря, не соблюдается уже и в классической механике [4]. Это положение побудило нас рассмотреть подробнее этот принцип с точки зрения квантовой механики. При этом мы сознательно ограничиваемся нерелятивистской квантовой механикой, чтобы избежать известных трудностей, связанных с квантовой теорией поля. Тем не менее наши выводы будут применимы и к релятивистской квантовой механике в той мере, в какой ее можно считать существующей.

Как известно, в классической механике в тех случаях, когда силы инвариантны относительно перемены знака всех скоростей², имеет место принцип обратимости. Согласно этому принципу при изменении знака всех скоростей или, что то же, при изменении знака времени движение протекает в обрат-

* ЖЭТФ. 1947. Т. 17, вып. 10. С. 924–929.

¹ В новом издании книги Гайтлера [2] имеется замечание, указывающее на несоблюдение этого принципа применительно к теории мезона. Именно, Гамильтон и Пенг [3] обнаружили на ряде примеров, относящихся к теории мезона, несоблюдение п. д. р. При усреднении же по направлению спина мезона этот принцип оказывается вновь верным. Гайтлер отмечает, что нарушение п. д. р. оказывается поэтому «не слишком сильным». Гайтлер выражает также мнение, что этот принцип не будет справедлив в «будущей теории». Между тем, ниже показано, что п. д. р., вообще говоря, несправедлив уже и в современной теории.

² В случае наличия внешнего магнитного поля его направление должно быть изменено одновременно с изменением знака скоростей.