

ЭЛЕМЕНТЫ ВОЛНОВОЙ МЕХАНИКИ.

Н. Н. Андреев. Ленинград.

За последние годы механика атома явным образом переживала кризис: выяснилось, что квантование движений составных частей атома только в простейших случаях одного электрона приводит к результатам, согласным с опытом; кроме того, оставался непонятным процесс излучения атомом электромагнитной энергии, и все попытки истолковать его кончались неудачно. Никакие лекарства не помогали против этих двух основных болезней квантовой теории, и постепенно выросло убеждение, что для дальнейшего развития теории необходимо выставить какие-то совершенно новые принципы. В настоящее время мы имеем две таких попытки¹⁾: первая принадлежит Гейзенбергу, Борну и Иордану, — так называемая матричная механика атома; автором второй является Шрёдингер, и ей правильнее всего присвоить название волновой механики. Очень скоро выяснилось, что несмотря на резкое различие как физических предпосылок, так и математических методов, обе теории совершенно равнозначны: и результаты их и возможности одинаковы. Но теория Шрёдингера оказалась много шире по своему содержанию и смогла подойти к более глубоким вопросам, чем теория Гейзенберга-Борна-Иордана.

1. Жизнь атома не может быть описываема языком механики системы конечного числа точек, даже если применять то обобщение, которое дает специальный принцип относительности и из допускаемых Ньютоновской механикой решений искусственно — квантованием — выбирать наиболее подходящие, — вот основная мысль, рождающаяся у каждого, знакомого с современной теорией атома. Естественны поэтому неоднократно возникавшие попытки описывать состояние атома дифференциальными уравнениями в частных производных, иначе говоря, вместо того, чтобы смотреть на атом, как на дискретную систему точек, считать его непрерывной системой. Первые попытки такого описания явлений в атоме довольно стары,

¹⁾ Общую характеристику этих новых течений в теории квантов см. В. Гейзенберг — Квантовая механика. Усп. Физ. Наук, 6, 425. 1926. *Ред.*

и отчет о них имеется в Handbuch der Spectroskopie Кайзера; самая замечательная из них принадлежала безвременно умершему швейцарскому физiku Ритцу¹⁾; в ней он считает атом двухмерной непрерывной системой, наподобие мембраны, но описываемой дифференциальным уравнением в частных производных десятого порядка. Результаты, полученные Ритцем, замечательны, но дать какое-нибудь физическое истолкование своим уравнениям он не смог, и вскоре сам от них отказался, перейдя к совсем другой точке зрения.

Совершенно иного рода обобщение было предложено в 1924 г. молодым французским физиком Л. де-Бройлем²⁾; основное утверждение его было: с каждой частицей, будь то квант света, электрон или протон, связана некоторая „фазовая“ волна. Следствия из этой основной мысли выводились де-Бройлем при существенной помощи специального принципа относительности и оказались очень обещающими; в частности, получило физический смысл квантование замкнутых путей водородного электрона; именно, оказалось, что на каждом из этих путей укладывается целое число фазовых волн. Однако, несмотря на двухлетнее существование, теория де-Бройля дальнейшего развития не получила, очевидно, вследствие узости выбранного ею пути обобщения.

Шрёдингер, однако, сумел, воспользовавшись идеями де-Бройля, — об этом он сам неоднократно упоминает, — сделать столь крупный шаг вперед, что не было бы несправедливым присвоить созданной им теории его имя. Его основной мыслью было³⁾: обобщение современной, Боровской, квантовой механики надо вести по тому же пути, по которому ведется обобщение геометрической оптики в оптику волновую. На целесообразность такого пути указывает известная с давних времен аналогия между геометрической оптикой и Ньютоновской механикой.

Так как волновая оптика исходит из дифференциального уравнения в частных производных, то задачей теории атома является нахождение соответственного уравнения в частных производных и для атомной системы.

¹⁾ Zur Theorie der Serienspektren. Ann. d. Phys. 12, 264, 1903 и Phys. ZS. 4, 406, 1903.

²⁾ L. de-Broglie. A Tentative Theory of Light Quanta, Phil. Mag. 47, 446, 1924; Thèses, Ann. de Physique (см. также Усп. Физ. Наук, 4, 329, 1924. Реферат И. И. Френкеля).

³⁾ Трудно определенно утверждать, что именно такова была первая мысль Шрёдингера, в особенности потому, что в его первой статье: Quantisierung als Eigenwertproblem, Ann. d. Phys. 79, 361, 1926, его исходная точка — другая. Но главная мысль его теории, несомненно, такова, как мы утверждаем; кроме того, она наиболее убедительна и дидактически, хотя по причинам, о которых будет сказано ниже, ныне она оставлена.

2. Аналогия между механикой и геометрической оптикой. Эта аналогия, в особенности совершенно развитая Гамильтоном, несмотря на ее полезность (Гамильтон при ее помощи пришел как к носящим его имя уравнениям механики, так и к так называемому Якоби-Гамильтонову уравнению) была прочно забыта; не воскресила ее и пропаганда знаменитого геттингенского математика Феликса Клейна, пользовавшегося ею в своих лекциях по механике и указывавшего на нее в своих докладах; поэтому не будет излишним вкратце изложить ее содержание¹⁾. Сущность ее в том, что траектория движущейся точки может быть рассматриваема как путь светового луча в изотропной среде с определенно подобранным показателем преломления; именно, пользуясь этим замечанием, Иоганн Бернулли решил задачу брахистохроны²⁾; оно же, очевидно, лежит и в основе Ньютоновой теории света.

Самая полная формулировка этой аналогии лучше всего осуществляется сравнением принципа Фермата с принципом Гамильтона-Якоби. Если мы обозначим показатель преломления через n , элемент пути светового луча — через dl , то принцип Фермата утверждает, что путь светового луча между двумя точками A и B удовлетворяет условию стационарности интеграла от показателя преломления, взятого по пути луча, т.-е.

$$\delta J = \delta \int_A^B n dl = 0. \quad (1)$$

Мы не будем здесь входить в доказательство этого положения³⁾, но иллюстрируем справедливость принципа Фермата для важнейшего частного случая — закона преломления. Сравним два пути: фактический путь луча от A до B (рис. 1) и бесконечно близкий к нему $AO'B$. Для первого имеем:

$$J = AO \cdot n_1 + OB \cdot n_2,$$

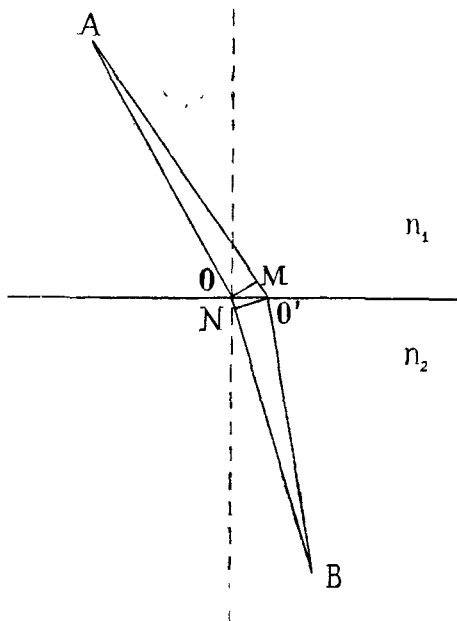


Рис. 1.

¹⁾ См. также Whittaker, Analytische Dynamik. Berlin, 1924, а также английский оригинал этой книги. На русском яз. см. мою статью в сборнике „Основания новой квантовой механики“, Ленинград. 1926.

²⁾ См. Э. Мах. Механика. С.-Петербург, 1909, р. 361.

³⁾ См. мою вышецитированную статью.

для второго:

$$J = AO' \cdot n_1 + O'B \cdot n_2$$

и, следовательно,

$$\delta J = (AO - AO')n_1 + (OB - O'B)n_2.$$

Отложив $AM = AO$, $NB = O'B$, найдем:

$$\delta J = -MO'n_1 + NO'n_2.$$

Но так как треугольники OMO' , ONN' можно при малости углов A и B считать прямоугольными, а в области OO' оба пути AOB и $A'O'B$ образуют с перпендикуляром к поверхности углы, удовлетворяющие закону преломления (все это с точностью до бесконечно малых второго порядка), то легко заметить, что

$$\frac{NO}{MO'} = \frac{n_1}{n_2},$$

т.-е. что $\delta J = 0$.

Сам Фермат и Герон, формулировавший этот принцип для отражения света, излагали его несколько иначе, именно, что свет выбирает такой путь от A до B , при котором прохождение его требует кратчайшего времени. Действительно, если стать на точку зрения элементарного принципа Гюйгенса, из которого, как известно, вытекает, что показатель преломления есть отношение скоростей, то вместо n можем написать $\frac{c}{v}$ (c — скорость света в пустоте, v — в рассматриваемой среде), а следовательно:

$$\delta J = \delta c \int_A^B \frac{dl}{v} = c \delta \int_{t_A}^{t_B} dt = 0. \quad (2)$$

В этой форме принцип Фермата теряет свой чисто-геометрический смысл, так как теперь в его формулировку уже входит понятие скорости. Поэтому (2) представляет собою уже принцип не геометрической оптики, не имеющей в себе никаких кинематических элементов, но принцип примитивной волновой оптики, в духе Гюйгенса.

3. Наиболее известный из вариационных принципов механики есть принцип Гамильтона:

$$\delta \int_{t_A}^{t_B} (T - U) dt = 0. \quad (3)$$

Здесь T — кинетическая, U — потенциальная энергия точки — функция только координат ее, т.-е. места. Якоби получил из него

принцип чисто-геометрического характера, исключив время при помощи соотношения

$$T^2 = (E - U) \frac{m}{2} \left(\frac{dl}{dt} \right)^2$$

$$T = \sqrt{\frac{m}{2}} \sqrt{E - U} \cdot \frac{dl}{dt}.$$

Внося в (3) вместо U величину $E - T$ (E — полная энергия точки), находим прежде всего

$$\oint_{t_A}^{t_B} 2T \cdot dt = 0, \quad (4)$$

так называемый принцип Мопертюи (вариирование производить, считая E постоянным!), а отсюда, путем вышеуказанной подстановки, вытекает:

$$\oint_A^B \sqrt{2m(E - U)} \cdot dl = 0 \quad (5)$$

принцип Гамильтона—Якоби, не содержащий в себе никаких кинематических элементов, а потому имеющий чисто-геометрический характер. Выполняя вариирование по координатам, мы находим из (5) уравнения траектории движущейся точки, но никаких заключений о скорости ее, очевидно, получить не можем.

Аналогия между (1) и (5) очевидна: материальная точка, полная энергия E которой дана, движется в силовом поле U по той же траектории, которую имеет световой луч, движущийся в среде с показателем преломления

$$n = \sqrt{2m(E - U)}. \quad (6)$$

Но здесь, собственно говоря, аналогия и кончается; расширить ее и на область кинематики не удастся. В самом деле, в примитивной волновой оптике показатель преломления обратно пропорционален скорости луча, тогда как (6) показывает нам, что соответствующая ему в механике величина прямо пропорциональна скорости; именно это обстоятельство и погубило эмиссионную теорию Ньютона, утверждавшую, что в среде с большим показателем преломления и скорость световой частицы больше.

4. Де-Бройль сумел, однако, сделать еще один шаг на пути развития нашей аналогии ¹⁾, обратившись к понятию не волновой,

¹⁾ См. вышецитированные работы и в особенности Journal de Physique, 7, p. 1. 1926. Наше изложение ближе всего к этой последней его работе.

а групповой скорости. Если в обладающей дисперсией среде распространяется группа волн мало различающейся частоты, то вследствие интерференции их наблюдаются биения, скорость распространения которых оказывается уже не $\frac{c}{n}$, а $\frac{c}{\frac{d(n\nu)}{d\nu}}$ ¹⁾. Пользуясь этой

формулой, мы сейчас покажем, что скорость движущейся точки совпадает с групповой скоростью волн в среде с показателем преломления (6); но для этого необходима некоторая новая гипотеза. Чтобы выражение (6) определяло диспергирующую среду (иначе $\frac{d(n\nu)}{d\nu} = n$, и группа волн распространяется с той же скоростью $\frac{c}{n}$, что и отдельная волна), мы положим:

$$E = h\nu. \quad (7)$$

Это, конечно, чрезвычайно существенная гипотеза, но уже привычная для всякого физика; не пытаюсь пока ее истолковать, будем ею пользоваться; отметим только одну важную ее особенность: она определяет энергию вполне, а не только с точностью до произвольной постоянной, как это имеет место в Ньютоновой механике.

Прежде всего заметим, что выражение (6) не имеет размерности 0, как это следует для показателя преломления. Поэтому вместо (6) напомним:

$$n = \frac{\sqrt{2mc^2(E - \Gamma)}}{E}. \quad (8)$$

Это — вторая гипотеза, выставленная де-Бройлем. Конечно, с точки зрения механической введение в принцип Якоби (5), или в принцип Мопертюи (4) постоянного множителя $\frac{c^2}{E}$ вполне возможно, так как в этих принципах вариирование подразумевается именно при постоянной энергии; но при наличии соотношения (7) мы вводим

¹⁾ Напомним, как получается этот результат при наличии простейшей группы из двух волн, имеющих частоты ν и $\nu + d\nu$. Мы имеем:

$$\begin{aligned} & \sin 2\pi \left(\nu t - \frac{x n \nu}{c} \right) + \sin 2\pi \left((\nu + d\nu) t - \frac{x n \nu}{c} - \frac{x}{c} \frac{d(n\nu)}{d\nu} \cdot d\nu \right) = \\ & = 2 \sin 2\pi \left[\left(\nu + \frac{d\nu}{2} \right) t - \frac{x}{c} \left(n\nu + \frac{1}{2} \frac{d(n\nu)}{d\nu} \cdot d\nu \right) \right] \cos \pi d\nu \left(t - \frac{x}{c} \frac{d(n\nu)}{d\nu} \right). \end{aligned}$$

Частота второго множителя весьма мала по сравнению с частотой первого: поэтому второй множитель можно рассматривать как амплитуду, медленно меняющуюся со временем; скорость распространения такой измененной амплитуды есть, очевидно, $c \left/ \frac{d(n\nu)}{d\nu} \right.$.

этим вполне определенную зависимость показателя преломления от частоты, а это существенно.

Из (8) находим:

$$n' = \frac{d(m)}{dv} = \frac{d(En)}{dE} = \frac{c\sqrt{2m}}{2\sqrt{E-U}} = \frac{c\sqrt{\frac{m}{2}}}{\sqrt{T}} = \frac{c}{v}. \quad (9)$$

Отсюда же:

$$\frac{c}{\frac{d(m)}{dv}} = \frac{c}{n'} = v, \quad (10)$$

т.е. в среде с показателем преломления (8) групповая скорость волн совпадает со скоростью точки, движущейся по законам Ньютоновой механики. Таким образом, аналогия между геометрической оптикой и механикой продолжена до полного совпадения¹⁾; но пока не дано физическое истолкование (7) и (8), это — чисто-формальная аналогия. Де-Бройль выставляет утверждение, что с движением точки всегда связан какой-то колебательный процесс, управляемый соотношением (7); волны, характеризующие этот процесс, названы им „фазовыми“ волнами; однако никакой физической картины, поясняющей его утверждения, он дать не может.

5. Квантование атома водорода. Тем более замечательно одно из следствий вышеустановленной аналогии, именно квантование атома водорода. Внося в (8) $U = \frac{e^2}{r}$, где e — элементарный заряд, а r — расстояние между ядром водорода и его электроном, мы получаем среду с радиально-симметричным показателем преломления и определенной дисперсией. Вычисление показывает, что лучи света в такой среде — эллипсы, имеющие одним из фокусов ядро²⁾. Приводить это вычисление нет нужды хотя бы потому, что мы знаем заранее этот результат из решения соответствующей механической задачи. Квантовые условия дают возможность выделить из этих эллипсов некоторые определенные, допускаемые квантовой теорией. И вот, как показал Де-Бройль, число фазовых волн (длина их есть, очевидно, $\lambda = \frac{c}{nv}$), расположенных по обводам этих квантовых эллипсов, — непременно целое число. Этот замечательный результат, а также и другие, полученные де-Бройлем, невольно наталкивают на заключение, что аналогия де-Бройля действительно имеет какой-то глубокий физический смысл, а не является чисто

¹⁾ Только для механики одной точки, однако!

²⁾ Это было известно уже Бугеру, давшему изящный геометрический метод решения этой задачи.

формальной. Поэтому естественно желать дальнейшего развития этой аналогии, и оно-то и привело Шрёдингера к его теории.

6. Как мы уже отметили, та оптика, с которою де-Бройль устанавливает аналогию — есть примитивная геометрическая оптика в духе Гюйгенса, не могущая дать объяснения таким, например, явлениям, как диффракция. Это — оптика столь коротких длин волн, что диффракционные и интерференционные явления становятся незаметными. Но удача де-Бройлевской механики естественно наводит на мысль, что полезно и дальнейшее ее обобщение, которое должно относиться к де-Бройлевской механике, как Френелевская волновая оптика относится к оптике Гюйгенса. Такова именно основная мысль Шрёдингера.

Но вся Френелевская оптика содержится в уравнении:

$$\frac{\partial^2 \varphi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \varphi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \varphi}{\partial z^2} = \Delta \varphi = \frac{1}{v^2} \frac{\partial^2 \varphi}{\partial t^2}. \quad (11)$$

Связь этого уравнения с Гюйгенсовой волновой оптикой легко установить, если рассмотреть те его решения, которые соответствуют малой длине волны, т.-е. большой частоте; положим поэтому

$$\varphi = e^{2\pi i \nu \left(t - \frac{\psi}{v}\right)} = e^{2\pi i \nu f} \quad (12)$$

$$\psi = \psi(x, y, z),$$

т.-е. будем рассматривать распространяющиеся со скоростью v синусоидальные волны, длина которых

$$\lambda = \frac{v}{\nu}, \quad (13)$$

а фронт имеет форму:

$$f(t, x, y, z) = \text{const} \text{ или } \psi(x, y, z) = \text{const} + vt. \quad (14)$$

Внося (12) в (11), находим:

$$(2\pi i \nu)^2 \varphi \left[\left(\frac{\partial f}{\partial x} \right)^2 + \left(\frac{\partial f}{\partial y} \right)^2 + \left(\frac{\partial f}{\partial z} \right)^2 \right] + 2\pi i \nu \varphi \Delta f = \left(\frac{2\pi i \nu}{v} \right)^2 \left(\frac{\partial f}{\partial t} \right)^2 \varphi. \quad (15)$$

При большой частоте первый член слева значительно перевешивает второй, а потому мы получаем:

$$\left(\frac{\partial f}{\partial x} \right)^2 + \left(\frac{\partial f}{\partial y} \right)^2 + \left(\frac{\partial f}{\partial z} \right)^2 = \text{grad}^2 f = \frac{1}{v^2} \left(\frac{\partial f}{\partial t} \right)^2. \quad (16)$$

Внося сюда ψ , находим:

$$\text{grad}^2 \left(\frac{\psi}{v} \right) = \frac{n^2}{c^2}. \quad (17)$$

Это уравнение и есть основное уравнение геометрической оптики: если задана некоторая поверхность $\phi = \text{const}$, — поверхность фронта, — то (17) показывает, как следует вести линии, имеющие направление $\text{grad } \phi$, т.-е. перпендикулярные к этой поверхности геометрические лучи; то обстоятельство, что направление grad определяется двучленно:

$$\text{grad} \left(\frac{n\phi}{c} \right) = \pm \frac{n}{c}, \quad (18)$$

соответствует известной теореме геометрической оптики, что обращение направления лучей не меняет их траекторий.

Уравнение (16), содержащее (по внешности только) время, рационально толковать как уравнение примитивной волновой оптики; в него, как видно и из уравнения (14), входит скорость распространения v , определяющая, как перемещается в пространстве поверхность

$$\phi = \text{const} + vt.$$

Нетрудно далее показать, что по (17) следует и принцип Фермата ¹⁾.

Все наши рассуждения предполагали постоянство n , а следовательно, и v . Но можно показать, что и в более общем случае, когда среда неоднородна, и когда уравнение (11) приходится заменить более сложным, мы для коротких волн получаем уравнения (16) и (17); однако ради краткости мы не будем приводить этих вычислений.

7. Если мы заменим в (17) показатель преломления n его выражением (8), то найдем:

$$\text{grad}^2 [\phi (\sqrt{2m(E-U)})] = 2m(E-U), \quad (19)$$

а это уравнение своим видом чрезвычайно напоминает известное уравнение механики, так называемое уравнение Якоби-Гамильтона:

$$\left(\frac{\partial S}{\partial x} \right)^2 + \left(\frac{\partial S}{\partial y} \right)^2 + \left(\frac{\partial S}{\partial z} \right)^2 = 2m(E-U) \quad (20)$$

и полное тождество между обоими уравнениями устанавливается при помощи соотношения:

$$S = \phi \sqrt{2m(E-U)}. \quad (21)$$

Отсюда выясняется, как надо вести обобщение механики Ньютона-де-Бройля: надо от уравнения (20), характерного [при наличии (7) и (8)] для этой „геометрической“ механики, перейти к новому уравнению путем обратным тому, каким мы от уравнения (11) Фре-

¹⁾ См. мою вышецитированную статью.

нелевой оптики перешли к уравнениям (16), (18) и (19). Проще всего это сделать, положив в уравнении (11) скорость v равной $\frac{c}{n}$, при чем n взять из (8). Тогда получим первое уравнение Шрёдингера:

$$\Delta\varphi = \frac{2m(E-U)}{E^2} \frac{\partial^2 \varphi}{\partial t^2}, \quad (22)$$

которое и есть исходный пункт всей его теории.

Прежде чем мы перейдем к применениям этого замечательного уравнения, нам надо еще раз подчеркнуть, что наше обобщение есть самое простое, но отнюдь не единственно возможное. Правда, оно по форме соответствует Френелеву уравнению (11); но не надо забывать, что последнее содержит в себе в виде коэффициента постоянную скорость, тогда как у нас этот коэффициент вдвойне переменный: U есть функция координат, а E — пропорционально частоте. Кроме того, уравнение (11) не соответствует никакой известной нам теории света, если рассматривать v как функцию места и частоты: и Максвеллова и упругая теории света приводят нас для неоднородной среды к уравнениям совсем иного вида. Наконец, не забудем, что все наши рассуждения и аналогии относились к механике одной точки; если же мы будем рассматривать механику системы N точек, то дело будет обстоять сложнее: тогда Френелево уравнение, относящееся к пространству трех измерений, никоим образом не может явиться обобщением уравнения (20), которое будет в этом случае относиться к $3N$ переменным. Шрёдингер должен был поэтому для продолжения аналогии и обобщения в этом случае обратиться к оптике (геометрической и волновой) многомерных пространств.

Все эти соображения показывают, что приписывать аналогии между механикой и оптикой физический смысл, например, отождествлять механическую точку с группой, или, как лучше называет Шрёдингер, „пакетом“ волн — невозможно.

В своей второй статье Шрёдингер ¹⁾ пытался это сделать, но в настоящее время эту попытку надо считать неудавшейся, и сам Шрёдингер отказался от такой точки зрения. Надо, впрочем, отметить, что де-Бройль попрежнему склонен ее придерживаться ²⁾.

Таким образом, перед нами аналогия, по всей вероятности чисто формальная, каких мы знаем довольно в теоретической физике; стоит, например, только вспомнить аналогию между электростатикой и стационарным течением несжимаемой жидкости. Но метод формальных

¹⁾ Quantisierung als Eigenwertproblem. Zweite Mitteilung. Ann. d. Phys. 79, 489. 1926. См. также Naturwissenschaften, 14, 664, 1926.

²⁾ L. de Broglie. Les principes de la nouvelle mecanique ondulatoire. Jour. de Physique, 7, 321, 1926.

аналогий тем не менее весьма полезен в областях, где есть нужда в обобщении, и им всегда пользовались и будут пользоваться.

8. Ротатор с неподвижною в пространстве осью. Решение уравнения (22) оказывается, вообще говоря, довольно сложным и требует от физика знакомства с математическим аппаратом, до сих пор еще мало для него привычным, хотя исторически и не новым. Но в случае ротатора с неподвижною в пространстве осью решение может быть доведено до конца весьма элементарными средствами, при чем весьма ярко выступает метод квантования, характерный для теории Шрёдингера. Поэтому мы особенно остановимся на этом примере.

Но ранее, чем приступить к решению нашей задачи, сделаем одно общее замечание. Решение (22) находится следующим образом: во-первых, ищут частные решения для синусоидальных волн, затем, имея в виду, что уравнение (22) есть линейное уравнение, для которого справедлив принцип суперпозиции, находят полное решение суммированием найденных частных.

Для синусоидальных волн можем положить:

$$\psi = \phi(x, y, z) \cdot e^{2\pi i t},$$

а так как для нас энергия пропорциональна частоте, то можем написать вместо этого:

$$\psi = \phi \cdot e^{\frac{2\pi i Et}{h}}. \quad (23)$$

Подстановка в (22) дает нам:

$$\Delta \phi + \frac{8\pi^2 m}{h^2} (E - U) \phi = 0. \quad (24)$$

Это — второе уравнение Шрёдингера; полезно отметить простой рецепт, которым оно получается из уравнения Гамильтона-Якоби (20), которое мы перепишем так:

$$p_x^2 + p_y^2 + p_z^2 - 2m(E - U) = 0 \quad (25)$$

здесь p_x — компоненты вектора количества движения, как известно, получаемые дифференцированием Якоби-Гамильтоновой функции S по координатам. Очевидно, чтобы перейти от (25) к (24), надо применить к функции ϕ операцию такого вида:

$$\left\{ \left(\frac{2\pi i}{h} \right)^2 \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) - 2m(E - U) \right\}, \quad (26)$$

получающуюся по (25) заменой p_x на оператор $\frac{2\pi i}{h} \frac{\partial}{\partial x}$; при этом при производстве операции при помощи оператора (26) надо совер-

шать формальное умножение его на ϕ . Этот рецепт полезен в очень большом числе случаев в теории Шрёдингера.

Переходим теперь к решению нашей задачи, при чем будем исходить сразу из второго уравнения Шрёдингера, где положим:

$$U=0; E=\frac{mr^2\dot{\psi}^2}{2}=\frac{M\dot{\phi}^2}{2}=\text{const.} \quad (27)$$

Здесь $\dot{\psi}$ — угловая скорость, M — момент инерции, r — неизменный радиус вращения. Переходя к полярным координатам r , φ , ψ и, принимая во внимания постоянство r , ψ , находим вместо (24):

$$\frac{1}{r^2} \frac{d^2\psi}{d\varphi^2} + \frac{8\pi^2 m}{h^2} E\psi = 0$$

или

$$\ddot{\psi} + \frac{8\pi^2 M}{h^2} E\psi = 0. \quad (28)$$

Вследствие постоянства коэффициента у ψ , уравнение это разрешается без труда; мы находим:

$$\psi = \sin \omega \varphi \quad (29)$$

$$\omega = \sqrt{\frac{8\pi^2 M E}{h^2}}.$$

По истечении одного оборота, т.-е. при возрастании φ до $\varphi + 2\pi$, наша движущаяся точка приходит в прежнее положение; рассматриваемое нами явление Ньютоновой механики периодически. Но в механике Шрёдингера мы имеем дело с функцией ψ , которая должна описывать нам физическую сторону явления. Каков подлинный физический смысл этой функции, мы пока не знаем; но если только он существует, то функция ψ должна удовлетворять основным требованиям, которые физик предъявляет к каждой интересующей его функции: она должна быть однозначна, непрерывна и конечна во всем реальном пространстве. В нашем частном случае это означает, что ψ должна иметь одно и то же значение для φ и для $\varphi + 2\pi$; в самом деле, в реальном пространстве φ и $\varphi + 2\pi$ определяют одну и ту же точку.

Очевидно, это условие в приложении к (29) означает, что ω есть целое число n ; а для удовлетворения этого надо соответственно подобрать значение единственного находящегося в нашем распоряжении параметра E ; мы находим:

$$E = \frac{h^2 n^2}{8\pi^2 M}. \quad (30)$$

Таким образом, энергия нашего движения оказывается проквантованной, при чем результат этого квантования в данном частном случае совпадает с результатом прежней квантовой механики¹⁾.

На этом примере ясно виден смысл квантования в теории Шрёдингера: квантование состоит в таком выборе параметра энергии, при котором ψ в (24) удовлетворяет условиям непрерывности, однозначности и конечности в области допустимых значений координат. В таком способе квантования нельзя не видеть большого шага вперед по сравнению с прежней квантовой теорией: там оно сваливалось как будто с неба, здесь является условием, давно знакомым физикам. Если мы, например, решаем уравнение колебаний струны, закрепленной в двух точках, то получаем совершенно аналогичное квантование допустимых периодов колебания, которые мы называем собственными периодами. Кстати сказать, задача нахождения собственных периодов струны и формально совпадает с только что рассмотренною задачею; в самом деле, уравнение струны есть

$$\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} - \frac{1}{v^2} \frac{\partial^2 u}{\partial t^2} = 0,$$

решаем мы его предположением:

$$u = U(x) e^{2\pi i t},$$

при чем подстановка этого предположения, соответствующего стоячим волнам, приводит нас к уравнению:

$$\frac{\partial^2 U}{\partial x^2} + \frac{4\pi^2 \nu^2}{v^2} U = 0,$$

совершенно аналогичному уравнению (28); решение этого уравнения есть

$$U = \sin \omega x$$

при

$$\omega = \sqrt{\frac{4\pi^2 \nu^2}{v^2}} = \frac{2\pi \nu}{v};$$

наконец, если мы поставим условием, чтобы распространение волн на струне имело период $x = l$, т.-е. чтобы амплитуды перемещений и скоростей повторялись через расстояние l (так называемое условие периодичности), то увидим, что для этого должно быть соблюдено условие:

$$\omega l = \frac{2\pi \nu l}{v} = 2\pi n,$$

аналогичное (30). Если из такой струны мы вырежем кусок l и согнем его, не изменяя условий колебания в круг, то начало и конец его

¹⁾ См., например, Born, Vorlesungen über Atommechanik, p. 71.

вследствие условия периодичности, окажутся совершающим одно и то же движение — нарушения непрерывности здесь не будет.

Аналогия, таким образом, полная. Но и в других случаях, о которых мы говорим ниже, теория Шрёдингера приводит нас к решению подобных же задач, с тою только разницей и усложнением, что коэффициент у ψ в уравнении (24) сам есть функция координат; в случаях одной переменной задача Шрёдингера становилась бы, например, аналогичной задаче о колебаниях струны с неравномерно распределенною массой. Но все это — старые задачи математической физики, и способы их решения достаточно разработаны; всегда, как и в случае струны, решения, удовлетворяющие условиям на концах, существуют (в вышеуказанном физическом смысле) лишь при дискретных (редко при непрерывных) значениях параметра, входящего в коэффициент при неизвестной функции; эти значения получили название характеристических чисел и обозначаются обыкновенно буквою λ_n ; число их бесконечно. Соответствующие характеристическим числам интегралы основного уравнения (24) носят название фундаментальных функций. Нахождение характеристических чисел и фундаментальных функций, вообще говоря, — задача нелегкая; но, конечно, мы и не можем излагать здесь приемы ее решения¹⁾.

Еще одно замечание относительно смысла отыскиваемых решений. Так как мы исходим из частного решения вида (23), то, очевидно, как и в вышеприведенном примере струны — мы разыскиваем частные решения, соответствующие стоячим волнам; это обстоятельство отличает механику Шрёдингера от механики де-Бройля, который рассматривает бегущие волны.

9. Другие примеры квантования по Шрёдингеру. Вышерассмотренный пример — простейший по отношению к вычислительной стороне дела. Мы не будем приводить подробных решений для других случаев механики точки, ибо никаких принципиальных физических отличий от вышеописанного решения в них не имеется, и разница только в чисто-математической стороне дела. Перечислим только некоторые наиболее интересные случаи, решение которых могло быть доведено до конца.

Осциллятор. В этом случае энергия точки имеет вид:

$$E = \frac{1}{2} m \dot{x}^2 + \frac{1}{2} a x^2 = \frac{1}{2} m \dot{x}^2 + 2\pi^2 m \nu_0 x^2.$$

Отсюда определяется коэффициент при ψ в уравнении (24):

$$\frac{8\pi^2 m}{h^2} (E - 2\pi^2 m \nu_0 x^2).$$

¹⁾ См. статью В. А. Фока в „Основаниях новой квантовой механики“. Гос. Изд. 1927. Там указана и литература.

Решение уравнения Шрёдингера приводит к характеристическим числам вида:

$$\lambda_n = \frac{2E_n}{h\nu_0} = 2n + 1 \quad (n=0, 1, 2, \dots)$$

т.-е.

$$E_n = \left(n + \frac{1}{2}\right) h\nu_0.$$

Здесь ν_0 — собственная частота осциллятора в механическом смысле слова.

Результат прежней квантовой теории хорошо известен:

$$E_n = nh\nu_0.$$

Как видим, разности уровней энергии в обеих теориях одинаковы; но в теории Шрёдингера сами уровни смещены на $\frac{1}{2} h\nu_0$: не лишне вспомнить, что эта величина встречается в квантовой теории удельных теплот.

Атом водорода ¹⁾. Уравнение Шрёдингера имеет вид:

$$\Delta\psi + \frac{8\pi^2m}{h^2} \left(E + \frac{e^2}{r}\right)\psi = 0.$$

Решение ведется в полярных координатах r, ϑ, φ , при чем удобно искать его в форме произведения двух функций, одна из которых зависит только от r , другая от ϑ, φ . Получаются два отдельных уравнения: то из них, которое содержит только угловые переменные, оказывается известным уравнением, решения которого суть так называемые поверхностные шаровые функции; другое, содержащее только r и некоторый параметр $\alpha = p(p+1)$ (p — целое число), имеет характеристические числа двух родов: при $E > 0$ они представляют непрерывное множество, т.-е. при всяком значении $E > 0$ существует решение, однозначное, конечное и непрерывное во всем пространстве и исчезающее в бесконечности; но при $E < 0$ характеристические числа, а следовательно, уровни энергии дискретны, именно:

$$E_n = - \frac{2\pi^2me^4}{h^2(n+2)^2} \quad (n=0, 1, 2, \dots),$$

при чем n должно быть не менее вышеупомянутого p . Эти результаты совпадают с прежней квантовой теорией, при чем уровни $E_n < 0$ соответствуют эллиптическим путям электрона, $E > 0$ — гиперболическим. Интересно отметить, что прежняя квантовая механика допу-

¹⁾ Schrödinger. Quantisierung als Eigenwertproblem. Erste Mitteilung. Ann. d. Phys. 79, 361, 1926.

скала уровень энергии, соответствующий прямолинейному колебанию электрона через ядро, и приходилось этот случай исключать просто запретом, смысл которого оставался непонятным; в механике Шрёдингера этот случай исключается автоматически, отсутствием соответствующего ему характеристического числа.

Шрёдингер, а также Фок¹⁾ решили так же и задачу, соответствующую явлению Штарка — разделение линий спектра в электрическом поле, — при чем была найдена для уровней энергии формула, совпадающая в первом приближении с формулой прежней квантовой теории, полученной Эпштейном; во втором приближении формулы расходятся, в особенности для малых квантовых чисел²⁾.

Двухатомные молекулы. До сих пор мы говорили только об уравнении Шрёдингера для одной точки; но его без труда можно обобщить и на любое число степеней свободы. Путей к этому несколько; например, можно исходить из аналогии с оптикой многомерных сред (не имеющей, конечно, прямого физического смысла), как это и делает Шрёдингер в своей второй статье, или же пользоваться указанным выше формальным рецептом; есть и другие пути. Такое более общее уравнение Шрёдингера было применено к нескольким случаям, в которых удалось довести расчет до конца. Так, Фюсс³⁾ рассмотрел двухатомную молекулу и пришел к результатам, хорошо согласующимся с опытом, при чем и здесь новая теория показала ряд преимуществ перед старой. Наконец, упомянем, что Александров⁴⁾ подсчитал потенциал ионизации водородной молекулы, при чем нашел его равным $16,4 V$, в полном согласии с экспериментальными результатами, тогда как прежняя теория давала $23,7 V$, — число, эксперименту совершенно не соответствовавшее; вообще старая теория приводит к неверным результатам во всех тех случаях, когда дело идет о системе более, чем двух тел. Поэтому лучшей проверкой новой теории был бы расчет спектра гелия; однако эта задача еще не решена, хотя уже есть подходы к ее решению.

10. Основным вопросом всякой теории атома является подсчет излучаемых им частот и их интенсивностей, и квантование есть только первый шаг к решению этой задачи. В теории Бора второй

¹⁾ A. Schrödinger, Quantisierung als Eigenwertproblem. Dritte Mitteilung, Ann. d. Phys. 80, 437, 1926. V. Fock, Zur Schrödingerschen Wellenmechanik. Z. f. Phys. 38, 242, 1926.

²⁾ G. Wentzel, Eine Verallgemeinerung der Quantenbedingungen für die Zwecke der Wellenmechanik. Z. f. Phys. 38, 518, 1926.

³⁾ Fuess, Die Schwingungen zweiatomiger Moleküle in der Undulationsmechanik. Ann. d. Phys. 80, 367, 1926, и Zur Intensität der Bandenlinien u. des Affinitätsspektrums zweiatomiger Moleküle. Ann. d. Phys. 80, 281, 1926.

⁴⁾ W. Alexandrow, Das Wasserstoffmolekülion und die Undulationsmechanik. Ann. d. Phys. 81, 603, 1926.

шаг состоял в утверждении, что получаемые частоты определяются соотношением:

$$h\nu = E' - E''; \quad (31)$$

вопросы же интенсивности решались при помощи принципа соответствия; и этот последний, и соотношение (31) являлись чисто формальными утверждениями, лишенными физического смысла. Все поиски последнего оказались неудачными, хотя для отыскания его прибегали (Бор, Крамерс, Слэтер) к таким отчаянным мерам, как отказ от строгой точности закона сохранения энергии и сохранению за ним лишь статистической верности. Поэтому вопросы о частотах и интенсивностях должны явиться оселком и для теории Шрёдингера, и важно знать, как она их разрешает; теперь мы попытаемся возможно кратче дать представление о том, что достигнуто ею до сих пор в разрешении этой задачи.

Математически уравнение Шрёдингера может считаться окончательно разрешенным, если найдены и характеристические числа

$$\lambda_1, \lambda_2, \lambda_3 \dots$$

и соответствующие им (т.-е. представляющие решения уравнения Шрёдингера с подставленными в него соответственным λ_n) фундаментальные функции:

$$\psi_1, \psi_2, \psi_3 \dots$$

Так как уравнение Шрёдингера линейно, то для него справедлив принцип суперпозиции, и вообще его решение есть

$$\psi = c_1 \psi_1 + c_2 \psi_2 + \dots = \sum c_n \psi_n, \quad (32)$$

где c_n суть произвольные постоянные. Смысл характеристических чисел, их связь с уровнями энергии (имеющими такое яркое физическое выражение, как потенциалы возбуждения электронным ударом) уже выяснены. Поэтому дальнейшим шагом в развитии теории Шрёдингера должно явиться установление физического смысла функции ψ , и естественно ожидать, что именно по этой функции мы должны суметь подсчитать частоты и интенсивности. Но здесь можно было бы ожидать, что задача может быть разделена на две части. Как показывает (до сих пор всегда оправдывавшаяся) формула (31), надо ожидать, что вопрос о получаемой частоте решается только при помощи характеристических чисел λ_n , или же при помощи их ν , целиком ими определенных функций ψ_n , но коэффициенты c_n не играют здесь никакой роли, ибо последние ничем с λ_n не связаны и могут быть выбираемы произвольно. Что же касается вопроса об интенсивностях, то значение c_n для его решения может быть и необходимо. Однако самый этот вопрос можно ставить двояко. Во-первых, можно

искать интенсивность элементарного акта излучения; например, можно спросить себя, как распределяется энергия электромагнитных волн вокруг данного атома водорода, как распределяется интенсивность по линиям явления Зеемана и т. д.; сюда же войдет вопрос и о поляризации излучения. Но, с другой стороны, в практически наблюдаемых случаях мы имеем дело не с излучением одного атома, а с явлением статистическим: множество атомов, находящихся в различных состояниях, излучают; и в результате мы не замечаем ни поляризации, ни различия излучения в разных направлениях, да кроме того, мы видим не одну, а всевозможные частоты.

Таким образом, мы можем искать c_n , соответствующие данному элементарному акту, или же, решившись иметь дело только с наблюдаемыми величинами, искать некоторые средние статистические функции от ϕ , характеризующие некоторыми средними значениями c_n ; говорим — функции от ϕ , а не сами ϕ , потому что, как выясняется, самим ϕ не удастся подыскать простого физического смысла.

11. Согласно всем этим соображениям, остановимся прежде всего на приспособлении теории Шрёдингера к Боровскому условию частот (31), при чем будем оперировать только λ_n и ϕ_n , забыв о c_n .

Как показывает (23), мы должны исходить не от ϕ_n , а от

$$\varphi_n = \phi_n e^{\frac{2\pi i E_n t}{h}}, \quad (33)$$

ибо они представляют решения основного уравнения Шрёдингера (22). Легко видеть, что сами φ_n не определяют электромагнитных волн, ибо частот излучения $\nu_n = \frac{E_n}{h}$ в спектре нет; но и нетрудно заметить, что произведения фундаментальных функций на им сопряженные имеют желаемый вид; например, имеем (черта над функцией есть знак сопряжения)

$$\overline{\varphi_n} \varphi_s = \phi_n e^{\frac{2\pi i E_n t}{h}} \phi_s e^{\frac{-2\pi i E_s t}{h}} = \phi_n \phi_s e^{\frac{2\pi i t}{h} (E_n - E_s)}.$$

К общему решению, имеющему вид:

$$\varphi = \sum c_n \phi_n e^{\frac{2\pi i E_n t}{h}}, \quad (34)$$

приложимо то же замечание:

$$\overline{\varphi} \varphi = \sum \sum c_n \overline{c_s} \phi_n \phi_s e^{\frac{2\pi i t}{h} (E_n - E_s)};$$

предполагаем ради общности, что c_n может быть комплексными. Отсюда естественно сделать два заключения: 1) для наличия излучения атома необходимо, чтобы в нем существовали одновременно два разных про-

цесса, характеризуемые двумя разными фундаментальными функциями: 2) величины $\phi_n \phi_s$ должны иметь связь с амплитудой излучения атома. Если вспомнить, что в электромагнитной теории излучение осуществляется в простейшем случае колеблющимся электрическим диполем, то мы пожелаем, чтобы $\phi_n \phi_s$ было каким-то отражением амплитуды такого диполя. Но последний есть точечный образ, тогда как $\phi_n \phi_s$ — пространственные функции; они поэтому должны соответствовать некоему пространственному распределению электричества, а никак не точечному. Все эти довольно неопределенные рассуждения приводят Шрёдингера¹⁾ к гипотезе, что можно считать плотностью распределения электричества в атоме величину

$$\varphi \cdot \bar{\varphi}.$$

Поэтому количество электричества в элементе объема $d\tau$ есть

$$\varphi \bar{\varphi} \cdot d\tau,$$

а компоненты момента диполя суть эта величина, умноженная на координаты элемента $d\tau$; например, компонент диполя на ось x -ов есть

$$x \varphi \bar{\varphi} \cdot d\tau.$$

Результирующий диполь есть сумма всех дипольных элементов, т.-е.

$$M_x = \int x \varphi \bar{\varphi} \cdot d\tau. \quad (35)$$

Если функция φ состоит только из одного члена

$$\varphi_k = \phi_k e^{\frac{2\pi i E_k t}{h}},$$

то $\varphi_k \bar{\varphi}_k = \phi_k^2$ и зависимости от времени не будет; ясно, что таким образом объяснено, отчего не наблюдается частот излучения $\nu_k = \frac{E_k}{h}$.

Если же в φ присутствуют два члена, φ_k и φ_s , то имеем:

$$\begin{aligned} \varphi \bar{\varphi} &= (\overline{c_k \varphi_k} + \overline{c_s \varphi_s})(c_k \varphi_k + c_s \varphi_s) = \\ &= c_k \bar{c}_k \varphi_k \bar{\varphi}_k + c_s \bar{c}_s \varphi_s \bar{\varphi}_s + c_k \bar{c}_s \varphi_k \bar{\varphi}_s + \bar{c}_k c_s \varphi_k \varphi_s; \end{aligned}$$

первые два члена не зависят от времени и поэтому не интересуют нас; вторые два приводятся к виду:

$$\phi_k \phi_s \gamma_k \gamma_s \left\{ e^{i(2\pi \nu_{ks} t + \delta_{ks})} + e^{-i(2\pi \nu_{ks} t + \delta_{ks})} \right\},$$

¹⁾ Vierte Mitteilung. Ann. d. Phys. 81, 109, 1926.

где

$$c_k = \gamma_k e^{i\delta_k}; \quad \delta_{ks} = \delta_k - \delta_s;$$

$$\nu_{ks} = \frac{E_k - E_s}{h};$$

имея в виду, что x и ρ действительны, находим

$$M_x = 2 \gamma_k \gamma_s \cos i(2\pi \nu_{ks} t + \delta_{ks}) \int x \phi_k \phi_s d\tau. \quad (36)$$

Таким образом, зависящая от времени часть дипольного момента имеет нужную частоту Бора

$$\nu_{ks} = \frac{E_k - E_s}{h}. \quad (31)$$

Рассуждение это незатруднительно распространить на любое число членов (34), и таким образом мы получаем представление о физическом смысле условия Бора (31).

12. Если в (34) присутствуют все члены ($c_n \neq 0$), то число интегралов, входящих в (36):

$$x_{ks} = \int x \phi_k \phi_s d\tau \quad (36)$$

есть, очевидно, ∞^2 ; написав их в виде таблицы:

$$\begin{array}{ccccccc} x_{11} & . & . & x_{12} & . & . & x_{13} \\ x_{21} & . & . & x_{22} & . & . & x_{23} \\ x_{31} & . & . & . & . & . & . \\ . & . & . & . & . & . & . \end{array}$$

мы получим так называемую матрицу; аналогичные таблицы мы получим и для любой другой функции F (которая пусть содержит в виде множителя $e^{2\pi i \nu_{ks} t}$) по правилу:

$$F_{ks} = \int F \phi_k \phi_s d\tau. \quad (37)$$

Но как раз в работах Гейзенберга, Борна и Иордана, развитых затем Дираком Паули и многими другими, всякая квантовая величина представляется в форме матрицы. Для примера рассмотрим излучение атома; частоты, им испускаемые, суть ν_{ks} ; если мы назовем через x_{ks} амплитуды этих излучений, то

$$q_{ks} = x_{ks} e^{2\pi i \nu_{ks} t} \quad (38)$$

представит нам элемент матрицы, по которому мы сможем определить как частоты (ν_{ks}), так и соответственные интенсивности (x_{ks}^2). Создатели матричной механики показывают, что можно составить матричные уравнения для нахождения этих величин, при чем эти уравнения имеют большую формальную аналогию с уравнениями Гамильтона: каждая задача прежней квантовой теории, написанная в виде уравнений Гамильтона, может быть претворена в задачу матричной механики путем простой формальной замены обыкновенных величин матричными. Мы не можем входить здесь в изложение их рассуждений; скажем только, что элементы их матриц совпадают с (37). Это обстоятельство дает возможность считать матричную механику частью механики Шредингера, но благоприятно отзываясь и на этой последней. Именно, расчеты интенсивностей по матричной механике дали благоприятные результаты; поэтому можно пользоваться и в механике Шредингера формулой (36) для расчета интенсивностей и поляризаций. Шредингер¹⁾ выполнил это для явления Штарка и нашел согласие с опытом довольно хорошее, во всяком случае, лучшее, чем давала прежняя квантовая теория при помощи принципа соответствия.

13. Из всего вышеизложенного видно, что теория Шредингера, давая нередко лучшее числовое согласие с экспериментом, чем теория Бора, превосходит последнюю еще и с другой стороны: она дает такое толкование квантованию и условию частот, которое, повидимому, не содержит в себе внутренних противоречий и, во всяком случае, физически приемлемее, чем формальные рецепты Бора. Конечно, можно посетовать на то, что она уже не имеет дела с точечными электронами, а, так сказать, размазывает электрон по всему пространству, да вдобавок не дает ясной модели атома. Но первая особенность — обращение к уравнению непрерывной среды — не так уже ново, как мы и указывали в начале нашей статьи, и к нему надо просто привыкнуть, как привыкли же мы к нелепым физическим условиям Бора; второй же недостаток — отсутствие модели — еще может оказаться восполненным дальнейшим развитием теории, хотя нельзя не отметить, что у некоторых авторов (Борн, Я. И. Френкель) существует убеждение, что такая модель принципиально невозможна, ибо самая сущность механики Шредингера — статистическая. В нашем изложении мы старались не становиться на такую точку зрения, ибо нам кажется, что она не необходима для механики Шредингера.

14. Имея в виду изложение только основ механики Шредингера, мы не затронули многих вопросов, связанных с ее дальнейшим развитием. Мы не говорили об ее обобщении на многие степени сво-

¹⁾ Dritte Mitteilung, Ann. d. Phys., 80, 437, 1926.

боды и в область механики специальной теории относительности, что уже выполнено. Кроме того, установлена и весьма многообещающая связь с теорией относительности и уравнениями Максвелла, так что появляется надежда весьма общего и непротиворечивого изложения явлений излучения; наконец, статистика Бозе — Эйнштейна¹⁾ также оказывается тесно связанной с теорией Шрёдингера; кто знает, не близки ли мы к весьма крупному синтезу принципов физики в одно стройное целое?

¹⁾ См. о ней Иг. Тамм, Усп. Физ. Наук, 2, 1926.