

ВОЛНОВАЯ ТЕОРИЯ МЕХАНИКИ АТОМОВ И МОЛЕКУЛ ¹⁾.

Э. Шредингер, Цюрих.

§ 1. Аналогия Гамильтона между механикой и оптикой.—§ 2 Аналогия может быть обобщена и приводит к реальной „физической“ или „волновой“ механике вместо чисто геометрической механики.—§ 3. Значение длины волны, макромеханические и микромеханические проблемы.—§ 4. Волновое уравнение и приложение его к атому водорода.—§ 5 Внутренний смысл появления дискретных характеристических частот.—§ 6 Другие проблемы. интенсивность излучаемого света.—§ 7 Вывод волнового уравнения из вариационного принципа Гамильтона.—§ 8 Физическое значение волновой функции характеризует непрерывное распределение электричества в пространстве, при чем колебания этого распределения обуславливают излучение на основании законов обычной электродинамики.—§ 9 Неконсервативные системы. Теория дисперсии и рассеяния Теория „переходов“ между „стационарными состояниями“.—§ 10. Вопрос о теории относительности и о действии магнитного поля. Неполнота этой части теории

§ 1. Теория, изложенная на следующих страницах, основана на чрезвычайно интересных и глубоких исследованиях Л де-Бройля ²⁾ о так называемых „фазовых волнах“ („ondes de phase“) и прилагается к движению материальных частиц, в частности к движению электрона или протона. Общая точка зрения излагаемой теории, опубликованной в ряде немецких статей ³⁾, заключается в том, что материальные точки состоят из систем волн, или даже тождественны с ними. Крайнее представление быть может и ошибочно. Во всяком случае оно не дает никакого ответа на вопрос о том, почему в природе осуществляются именно

¹⁾ Physical Review, 28, 1049 1926 (December). Перевел Л. Я. Штрум — Волновая механика Шредингера была уже изложена на страницах нашего журнала в статье Н. И. Андреева (Ж. Ф. Н. 7, 25 1927). Несмотря на это редакция считает целесообразным познакомить читателей с предлагаемым авторским изложением теории, составленным Шредингером для Physical Review, — тем более, что изложение это отличается исключительным изяществом и выукостью. P. d.

²⁾ L de-Broglie, Ann de Physique 3, 22, 1925

³⁾ E Schrodinger Ann d Physik 79, 361, 489. 734, 80 437, 81, 109 1926, Naturwissenschaften, 14, 664. 1926 [Эти статьи в настоящее время выпущены отдельной книгой E Schrodinger Abhandlungen zur Wellenmechanik — J. A. Barth Leipzig 1927 P. d.]

данного рода волны, которые должны соответствовать материальным частицам с определенной массой и определенным зарядом. Но, с другой стороны, противоположная точка зрения, которая оставляет без внимания волны, изученные Л. де-Бройлем, и рассматривает только движение материальных частиц, привела к таким значительным затруднениям в теории механики атомов,—и это после столетнего развития и углубления механики,—что представляется не только не опасным, но даже желательным уделить хотя бы на время особое внимание предлагаемой точке зрения. Поступая так, мы должны, конечно, помнить, что полное согласование в изучении различных сторон физических явлений может быть достигнуто только при гармоническом слиянии этих двух крайних точек зрения.

Главные преимущества излагаемой теории следующие:

а) Законы движения и квантовые условия выводятся одновременно из простого Гамильтонова принципа.

б) Несогласие, существовавшее до сих пор в теории квантов между частотой движения и частотой излучения, устраняется, так как последние частоты совпадают с разностями первых. Определенная локализация электрического заряда в пространстве и во времени может быть связана с системой волн, а последняя объясняет, на основании обычной электродинамики, частоту, интенсивность и поляризацию испускаемого света и делает излишним всякого рода принципы соответствия и отбора.

в) Представляется возможным проследить с помощью новой теории все детали так называемых „переходов“, которые были совершенно таинственными до последнего времени.

д) Существует несколько пунктов расхождения между новой и старой теорией по вопросу об отдельных значениях энергии или уровней частот. В этих случаях новая теория находится в большем согласии с опытом.

Чтобы пояснить ход мыслей, я возьму в качестве примера механической системы материальную точку с массой m , движущуюся в консервативном силовом поле с потенциальной энергией $V(x, y, z)$. Все последующее рассуждение может быть обобщено для движения „фазовой точки“, изображающей движение любой консервативной системы в „фазовом пространстве“ (пространстве q , но не пространстве pq)¹⁾.

¹⁾ Положение системы, состоящей из некоторого числа материальных точек, определяется координатами q всех ее точек. В статистической механике вводится понятие о некотором многомерном „координатном пространстве q “, число измерений которого равно числу координат q . Тогда положение системы характеризуется одной точкой „пространства q “, координаты которой суть координаты всех точек данной системы.

Состояние движения материальной системы определяется не только координатами точек q , но и соответствующими обобщенными импульсами p . Обобщенным импульсом называется производная кинетической энергии по скорости изменения соответствующей

Мы сделаем это обобщение в несколько иной форме в § 7. Воспользовавшись обычными обозначениями, напомним выражение для кинетической энергии T

$$T = \frac{1}{2} m (\dot{x}^2 + \dot{y}^2 + \dot{z}^2) = \frac{p_x^2 + p_y^2 + p_z^2}{2m}. \quad (1)$$

Известная Гамильтонова функция действия W

$$W = \int_{t_0}^t (T - V) dt, \quad (2)$$

рассматриваемая как функция верхнего предела интегрирования и конечных значений и координат x, y, z , удовлетворяет уравнению Гамильтона ¹⁾ с частными производными:

$$\frac{\partial W}{\partial t} + \frac{1}{2m} \left[\left(\frac{\partial W}{\partial x} \right)^2 + \left(\frac{\partial W}{\partial y} \right)^2 + \left(\frac{\partial W}{\partial z} \right)^2 \right] + V(x, y, z) = 0 \quad (3)$$

Для решения этого уравнения, полагаем, как обычно:

$$W = -Et + S(x, y, z), \quad (4)$$

где E — постоянная интегрирования, т. е. полная энергия, а S — функция только координат x, y, z . Уравнение (3) можно написать в таком виде:

$$|\text{grad } W| = \sqrt{2m(E - V)}. \quad (5)$$

В этой форме оно приводит к очень простой геометрической интерпретации. Положим, что t постоянно. Всякая функция W , зависящая от пространственных координат, может быть описана геометрически, если задать систему поверхностей, на которых W постоянно, и определить для каждой из этих поверхностей постоянное значение W_0 , которое функция W принимает для точек этой поверхности. С другой стороны, мы можем легко построить решение уравнения (5), исходя из некоторой произвольной поверхности и произвольно выбранного значения W_0 , которое мы ей припишем. Выберем исходную поверхность и исходное значение и примем (также произвольно) одну сторону этой поверхности за положительную. Мы можем легко построить

щей координаты; при декартовых координатах обобщенный импульс есть произведение массы точки на соответствующую составляющую скорости. Чтобы изобразить состояние движения системы, статистическая механика вводит понятие о „фазовом пространстве pq “, число измерений которого вдвое больше, чем в „пространстве q “. Тогда движение системы в каждый момент характеризуется одной точкой „пространства pq “, координаты которой суть обобщенные координаты q и обобщенные импульсы p всех точек данной системы.

При и. перев

¹⁾ См., например, М. Планк. Введение в общую механику, ч. II, гл. III. — Госиздат. М.-Л. 1926.

нормаль в каждой точке избранной поверхности. Длина нормали равна¹⁾:

$$dn = \frac{dW_0}{\sqrt{2m(E-V)}}.$$

Совокупность полученных таким образом точек образует поверхность, которой мы должны приписать значение $W_0 + dW_0$. Продолжая этот процесс, мы получим систему поверхностей и соответствующих им значений постоянных, т. е. распределение функции W в пространстве, пока при t постоянном.

Положим теперь, что время изменяется. Из уравнения (4) следует, что система поверхностей не изменяется, но что значения постоянных переходят вдоль нормалей от одной поверхности к другой с некоторой скоростью u , которая выражается²⁾:

$$u = \frac{E}{\sqrt{2m(E-V)}}. \quad (6)$$

Скорость u есть функция постоянной энергии E и, кроме того, функция координат, так как содержит $V(x, y, z)$.

Вместо того, чтобы представлять себе поверхности закрепленными в пространстве, а значения постоянной — переходящими от одной поверхности к другой, мы можем представить себе, что определенное численное значение W связано с некоторой индивидуальной поверхностью, а сами поверхности непрерывно движутся таким образом, что каждая из них занимает в точности положение и форму следующей поверхности. Тогда величина u , заданная уравнением (6), определяет величину скорости передвижения какой-либо поверхности по нормали в одной из ее точек. Применяя эту точку зрения, мы приходим к наглядному представлению, которое вполне совпадает с картиной распро-

¹⁾ Из дифференциальной геометрии известно, что элемент нормали к поверхности, уравнение которой:

$$W(x, y, z) = W_0,$$

равен

$$dn = \frac{\frac{\partial W}{\partial x} dx + \frac{\partial W}{\partial y} dy + \frac{\partial W}{\partial z} dz}{\sqrt{\left(\frac{\partial W}{\partial x}\right)^2 + \left(\frac{\partial W}{\partial y}\right)^2 + \left(\frac{\partial W}{\partial z}\right)^2}} = \frac{dW_0}{\sqrt{\left(\frac{\partial W}{\partial x}\right)^2 + \left(\frac{\partial W}{\partial y}\right)^2 + \left(\frac{\partial W}{\partial z}\right)^2}}.$$

Определив значение знаменателя из уравнения (3) и подставив $\frac{\partial W}{\partial t} = -E$, на основании уравнения (4) получим приведенную в тексте формулу.

Прим. перев.

$$2) \quad u = \frac{dn}{dt} = \frac{\frac{dW_0}{dt}}{\sqrt{2m(E-V)}} = [\text{на основании (4)}] = \frac{E}{\sqrt{2m(E-V)}}$$

Прим. перев.

странения системы стационарных волн в оптически неоднородной (но изотропной) среде, при чем W пропорционально фазе, а u есть фазовая скорость (показатель преломления полагается пропорциональным $\frac{1}{u}$). Очевидно, что рассмотренное построение нормалей dn эквивалентно принципу Гюйгенса. Ортогональные траектории нашей системы поверхностей W образуют систему лучей нашей оптической картины. Они представляют собой возможные траектории материальных точек в механической проблеме. Действительно, известно, что

$$p_x = m_x = \frac{\partial W}{\partial x} \quad (7)$$

(аналогичные уравнения для y и z ¹⁾). Следует заметить, что фазовая скорость u есть скорость материальной точки. Последняя скорость равна, на основании (7) и (5),

$$v = \sqrt{\dot{x}^2 + \dot{y}^2 + \dot{z}^2} = \sqrt{\frac{2(E - V)}{m}}. \quad (8)$$

Сравнивая (6) и (8), мы видим, что величины u и v изменяются обратно пропорционально друг другу.

Можно легко показать соответствие между известным механическим принципом Гамильтона и столь же известным оптическим принципом Ферма.

§ 2. Все вышесказанное несколько не ново. Все это было известно в свое время Гамильтону гораздо лучше, чем большинству физиков в настоящее время. Действительно, теория распространения света в неоднородной среде, которую Гамильтон развил за десять лет до механической теории, сделалась, благодаря открывшейся ему поразительной аналогии, исходным пунктом для его знаменитой теории чистой механики. Несмотря на большую популярность, которую приобрела последняя, путь, который привел к ней, был почти забыт²⁾.

Следует особо отметить следующее обстоятельство: хотя в приведенном нами рассуждении фигурируют такие понятия, как „волновые поверхности“, „принцип Гюйгенса“, „принцип Ферма“, однако вся проведенная аналогия относится скорее к геометрической оптике, чем к реальной физической или волновой оптике. Действительно, главное и основное механическое представление есть представление о пути траектории материальной частицы и соответствует представлению о

¹⁾ Уравнение (7) показывает, что направление скорости совпадает с нормалью к поверхности $W(x, y, z) = W_0$.

Прим. перев.

²⁾ См. F. Klein. Jahresber. d. Deutsch. Math. Ver. 7, 1891; Zeits. f. Math. u. Phys. 46, 1901; (Ges. Abh. II, 601, 603); E. T. Whittaker, Analytical Dynamics, Chap. II; A. Sommerfeld, Atombau, S. 803. Аналогия была снова раскрыта в области релятивистской механики в работе Л. де-Бройля, упомянутой выше.

лучах в оптической аналогии. Но представление о лучах вполне определено только в чисто-абстрактной геометрической оптике. Оно теряет почти всякий смысл в реальной физической оптике, как только размеры луча или материальных препятствий на его пути становятся сравнимыми с длиной волны. Если даже это не имеет места, то определение лучей в геометрической оптике все же только приблизительное. Оно совершенно не может быть приложено к тонкой структуре реальных оптических явлений,— к явлениям дифракции. Если даже несколько обобщить геометрическую оптику, присоединив к ней принцип Гюйгенса (в простой форме, примененной выше), то все же нельзя будет понять даже простейшие явления дифракции, если не прибавить еще другие кажущиеся странными правила, определяющие обстоятельства, при которых огибающая поверхность Гюйгенса имеет физическое значение, либо же не имеет его. (Я имею в виду построение „зон Френеля“). Эти правила были бы совершенно непонятны для того, кто занимается только геометрической оптикой. Кроме того, можно заметить, что те понятия, которые являются основными в реальной физической оптике, т. е. сама волновая функция (W есть только фаза), уравнение распространения волны, длина волны и частота колебаний, вовсе не входят в установленную выше аналогию. Входит, правда, фазовая скорость u , но, как мы видели, она не очень глубоко связана с механической скоростью v .

На первый взгляд не представляется интересным детально разработать Гамильтонову аналогию в отношении реальной волновой оптики. Если сообщить понятию о длине волны определенное физическое значение, то понятие о лучах теряет определенный физический смысл, но крайней мере в некоторых случаях,— и поэтому аналогия кажется ослабленной или даже вовсе разрушенной в тех случаях, когда размеры механических траекторий или их радиусы кривизны становятся сравнимыми с длиной волны. Чтобы спасти аналогию, нужно, казалось бы, приписать длине волны чрезвычайно малую величину, настолько, чтобы она была мала по сравнению со всеми размерами, которые могут играть какую-либо роль в вопросах механики. Но тогда разработка волновых образов представилась бы излишней, так как геометрическая оптика и есть предельный случай волновой оптики для исчезающе-малых длин волн¹⁾.

С этими рассуждениями сопоставим тот поразительный факт, который мы повседневно познаем с несомненностью: этот факт состоит в том, что обычная механика в действительности не применима к механическим системам очень малых, а именно атомных размеров. Принимая во внимание это обстоятельство, которое накладывает свою печать на всю современную физическую мысль, не представляется ли

¹⁾ A. Sommerfeld und I. Runge, Ann. d. Physik, 35, 290, 1911.

интересным исследовать вопрос: быть может, неприменимость обычной механики к микромеханическим проблемам оказывается такого же рода, как и неприменимость геометрической оптики к явлениям диффракции и интерференции, и не окажется ли возможным преодолеть ее подобным же способом? Другими словами: Гамильтонову аналогию нужно обобщить и на волновую оптику, причем длине волны должен быть приписан определенный размер в каждом частном случае. Эта величина имеет реальное значение для механической проблемы, а именно: обычная механика с ее представлением о движущейся точке и ее линейной траектории (или, в более общем смысле, об „изображающей точке“, движущейся в координатном пространстве) верна приблизительно лишь в том случае, если прилагается к траектории, которая велика (или радиусы кривизны которой велики) по сравнению с длиной волны. Если же этого нет, то нужно изучить явление распространения волны. В простом случае материальной точки, движущейся во внешнем силовом поле, волновое явление можно представить себе совершающимся в обычном трехмерном пространстве. В случае более общей механической системы, это явление нужно сперва поместить в координатное пространство (пространство q , а не пространстве pq)¹⁾, а затем некоторым образом проектировать в обычное пространство. В известной мере уравнения обычной механики окажутся не более пригодными для изучения этих микромеханических волновых явлений, чем правила геометрической оптики — для изучения явлений диффракции. При этом исследовании вполне естественно воспользоваться общеизвестными методами волновой теории, соответственным образом обобщенными. Представления, бегло очерченные нами, могут получить свое оправдание в том успехе, какой имели их приложения.

§ 3. Обратимся к системе поверхностей W , о которых шла речь в § 1. С ними мы свяжем представление о стационарных синусоидальных волнах, фаза которых определена величиной W в уравнении (4). Волновая функция ϕ имеет вид:

$$\phi = A(x, y, z) \sin \frac{W}{K} = A(x, y, z) \sin \left[-\frac{Et}{K} + \frac{S(x, y, z)}{K} \right], \quad (9)$$

где функция A — „амплитуда“. Необходимо ввести постоянную K , которая должна иметь физическую размерность действия (энергия $\times$ время), так как аргумент, стоящий под знаком синуса, должен быть отвлеченным числом. Так как частота волны (9) равна, очевидно,

$$\nu = \frac{E}{2\pi K}, \quad (10)$$

то является большим соблазном положить, что K есть универсальная постоянная, не зависящая от E и не зависящая от природы

¹⁾ См. примечание к стр. 177.

механической системы: если сделать такое допущение и положить, что K равно $\frac{h}{2\pi}$, то частота ν выразится уравнением:

$$\nu = \frac{E}{h}, \quad (11)$$

где h — постоянная Планка. Так мы приходим простым путем к известной всеобщей зависимости между энергией и частотой.

В обычной механике определенное значение имеет не абсолютная величина энергии, а разности между величинами энергии. При встрече с этим затруднением нулевой уровень энергии может быть определен вполне удовлетворительным способом, если воспользоваться релятивистской механикой и представлением об эквивалентности массы и энергии¹⁾. Но здесь у нас нет необходимости останавливаться на этом вопросе. Хотя частота ν наших волн в уравнениях (10) или (11) и зависит от нулевого уровня энергии, длина волны не зависит от него. А согласно тому, что было сказано выше, наибольший интерес для нас представляет именно длина волны. Сравнение этой величины с размерами пути или орбиты материальной частицы, вычисленными согласно обычной механике, покажет нам, имеет ли это вычисление физический смысл, и являются ли методы обычной механики приблизительно применимыми к решению специальной проблемы. Длина волны равна, согласно уравнениям (11) и (6),

$$\lambda = \frac{u}{\nu} = \frac{h}{\sqrt{2m(E-V)}}. \quad (12)$$

Здесь $E - V$ есть кинетическая энергия $\frac{1}{2}mv^2$, которая действительно не зависит от нулевого уровня полной энергии. Подставив ее величину, получим:

$$\lambda = \frac{h}{m\nu}. \quad (13)$$

Чтобы ответить на вопрос, можно ли прилагать обычную механику к электрону, движущемуся по Кеплеровой орбите атомных размеров, положим, что a есть длина размеров атома, и сравним λ с величиной a

$$\frac{\lambda}{a} = \frac{h}{mva}. \quad (14)$$

Знаменатель правой части имеет, несомненно, тот же порядок величины, как и момент количества движения электрона, а последний, как известно, одинакового порядка величины с постоянной Планка

¹⁾ L. de Broglie. Ann. de Physique, 3, 22, 1925.

в случае Кеплеровой орбиты атомных размеров. Таким образом, порядок отношения $\frac{\lambda}{a}$ становится равным единице, и обычная механика оказывается приложимой к такой орбите не в большей мере, чем геометрическая оптика приложима к диффракции света от диска, диаметр которого равен длине волны. Если бы физик попытался разоб-
 рать последнее явление с помощью представления о лучах, с которым он свыкся в макроскопической геометрической оптике, то он встретился бы с чрезвычайно серьезными трудностями и кажущимися противоречиями. „Лучи“ (линии, определяющие направление потока энергии) не были бы уже прямыми и взаимодействовали бы между собою самым странным образом, в полном противоречии с основными законами геометрической оптики. Подобным же образом представление о траекториях материальных точек представляется неприменимым к орбитам атомных размеров. Вполне удовлетворительным представляется то обстоятельство, что приравнивая K (по существу) постоянной Планка (уравн. 11), мы получаем для пределов применимости обычной механики величину в точности того же порядка, какой нужно было бы допустить, чтобы с помощью нового представления преодолеть затруднения квантовой теории. Мы можем добавить, что на основании уравнения (13) для Кеплеровой электронной орбиты порядка величины, соответствующего большому квантовому числу, отношение длины волны к размерам орбиты имеет порядок величины, равный единице, разделенной на квантовое число¹⁾.

Таким образом обычная механика дает все лучшее приближение к пределу при увеличении квантового числа (или размеров орбиты), как и следует ожидать для всякой рациональной теории.

Согласно основному уравнению $v = \frac{E}{h}$ (ур. 11) фазовая скорость u , определенная уравнением (6), оказывается зависящей от частоты ν . Поэтому уравнение (6) есть уравнение дисперсии. Это дает очень интересное освещение взаимоотношения между двумя скоростями: скоростью v движущейся частицы (уравнение 8) и фазовой скоростью u (уравнение 6) легко доказать, что v в точности равно так называемой групповой скорости, выводимой из формулы дисперсии (6)²⁾. Восполь-

¹⁾ Согласно теории Бора, в случае электрона, вращающегося по круговой орбите, момент количества движения

$$mva = n \frac{h}{2\pi},$$

где a — радиус орбиты. Подставив в (14), получим

$$\frac{\lambda}{a} = \frac{2\pi}{h} \cdot$$

Прич. исрив.

²⁾ Эта важная теорема доказана де-Бройлем (l. c.). Уравнение имеет вид

$$v = \frac{dv}{d\left(\frac{\nu}{u}\right)}.$$

зовавшись этим интересным результатом, можно получить понятие о том, каким образом обыкновенная механика может дать приближительное описание нашего волнового движения. Налагая друг на друга волны с частотами в малом интервале между ν и $\nu + d\nu$, можно построить „пакет волн“, размеры которого сравнительно малы во всех направлениях, хотя могут быть довольно велики по сравнению с длиной волны. Можно доказать, что „центр тяжести“, так сказать, такого пакета, движется, согласно законам распространения волн, по такой же точно траектории, по которой двигалась бы материальная точка, согласно законам обычной механики. Эта эквивалентность остается действительной даже в том случае, если размеры орбиты и невелики по сравнению с длиной волн. Но в последнем случае она не имеет значения, так как пакет волн расплывается по всем направлениям далеко за пределами траектории. Напротив, если размеры орбиты сравнительно велики, то движение пакета волн в целом может дать достаточное понятие о том, что происходит в действительности, если нас не интересует его внутреннее строение. Как указано выше, это „движение в целом“ управляется законами обычной механики.

§ 4. Мы не станем больше останавливаться на этом вопросе, а займемся гораздо более интересными приложениями теории к микромеханическим проблемам. Как указано выше, волновые явления должны быть в этом случае изучены в подробностях. Это можно сделать только при помощи „уравнения распространения волны“. Каково же это уравнение? В случае единственной материальной частицы, движущейся в поле внешней силы, проще всего попытаться воспользоваться обычным волновым уравнением:

$$\Delta\phi - \frac{\ddot{\phi}}{u^2} = 0 \quad (15)^1$$

и подставить вместо u величину, которая задана уравнением (6) и зависит от пространственных координат (через потенциальную энергию V) и от частоты $\frac{E}{h}$. Последняя зависимость ограничивает применение уравнения (15) такими функциями ϕ , которые зависят от времени только через множитель $e^{-\frac{1}{2} i E t / \hbar}$. (Подобное ограничение всегда налагается на уравнение волны, если мы имеем дело с дисперсией) Поэтому мы пишем:

$$\phi = - \frac{4\pi^2 E^2 \psi}{h^2}.$$

¹⁾ В других обозначениях:

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial z^2} - \frac{1}{u^2} \frac{\partial^2 \psi}{\partial t^2} = 0$$

Подставив это значение в уравнение (6) и в уравнение (15), получим:

$$\Delta \psi + \frac{8\pi^2 m (E - V) \psi}{h^2} = 0, \quad (16)$$

где ψ можно считать зависящим только от x, y, z . (Мы не изменяем обозначения функции, как, собственно, следовало бы.)

Как теперь быть с уравнением (16)? На первый взгляд оно кажется мало пригодным для разрешения атомных проблем, например, для определения дискретных уровней энергии в атоме водорода. Так как это дифференциальное уравнение с частными производными, то оно имеет множество решений — множество даже более высокого трансцендентного порядка величины, чем система обычных дифференциальных уравнений обычной механики. Но недостаточность последних в атомных проблемах состоит вовсе не в том, что они дают слишком мало возможных орбит, а наоборот — слишком много. Задача „квантовых условий“ и состоит в том, чтобы отобрать дискретное число этих орбит в качестве „реальных“ или „стационарных“, следуя принятым до последнего времени взглядам. Наше волновое уравнение (16), которое не ограничивает, а неопределенно увеличивает число возможностей, как будто еще ухудшает положение.

К счастью, эти опасения оказываются ошибочными, благодаря чрезвычайно интересной особенности уравнения (16) для атомных проблем. Если, например, принять:

$$V = -\frac{e^2}{r}, \quad (17)$$

где e — заряд электрона, $r = \sqrt{x^2 + y^2 + z^2}$, то мы получим для упрощенного атома водорода или задачи об одном теле:

$$\Delta \psi + \frac{8\pi^2 m \left(E + \frac{e^2}{r} \right) \psi}{h^2} = 0. \quad (18)$$

Оказывается, что для большей части значений энергии, или постоянной частот E , это уравнение вовсе не имеет решений, которые были бы непрерывны, конечны и однозначны во всем пространстве. Для этих значений E каждое решение ψ , которое удовлетворяет двум условиям (а именно, непрерывности и однозначности), неограниченно возрастает как при приближении к бесконечности, так и при приближении к началу координат. Единственные значения E , для которых это не имеет места, т. е. для которых существуют решения непрерывные, конечные и однозначные во всем пространстве, суть следующие:

$$\begin{aligned} 1) & E > 0 \\ 2) & E = -\frac{2\pi^2 m e^4}{h^2 n^2} \\ & (n = 1, 2, 3, 4 \dots). \end{aligned} \quad (19)$$

Первая совокупность значений соответствует гиперболическим орбитам в обычной механике. Согласно общепринятому взгляду, в обычной квантовой теории гиперболические орбиты не подвергаются квантованию. В нашем толковании это следует непосредственно из того обстоятельства, что все положительные значения E дают конечные решения. Вторая совокупность значений в точности соответствует по Бору стационарным уровням энергии эллиптических орбит.

Хотя я не могу здесь останавливаться на точном и довольно кропотливом доказательстве упомянутых утверждений, однако интересно описать в общих чертах решения, относящиеся ко второму ряду уровней E . Решение может быть выражено в трехмерных¹⁾ полярных координатах, полагая ϕ равным произведению функции полярных углов на функцию одного лишь радиуса r . Первая есть шаровая функция, порядок которой, увеличенный на единицу, соответствует азимутальному квантовому числу. Функции от r , входящие в решение, несколько сходны (в общих чертах) с Бесселевыми функциями, но с тем различием, что они имеют лишь конечное число положительных корней, причем это число в точности соответствует радиальному квантовому числу. Эти корни лежат внутри области вокруг начала координат, размеры которой такого же порядка, как и соответствующая орбита Бора²⁾. При дальнейшем увеличении r функция проходит через максимум или минимум, а затем убывает экспоненциально при неограниченном возрастании r . Таким образом, все волновое явление математически, правда, распространенное на все пространство, по существу ограничено маленьким шаром диаметром в несколько ангстремов, который может быть назван „атомом“ согласно волновой механике. Некоторые из упомянутых решений (состоящие из произведения шаровой функции на функцию от r) напоминают основные колебания упругого шара с конечным числом „узловых поверхностей“ в виде шаров, конусов и плоскостей. Но не следует, конечно, думать, что волновое движение, образующее атом, ограничено в общем случае одним из этих решений, частный отбор и отделение которых зависит в значительной степени от выбора координат. Каждому из дискретных значений E соответствует конечное число частных решений. Составив линейное выражение из последних и произвольных постоянных множителей, мы получим наиболее общее решение уравнения (18) для частного значения E . Число произвольных постоянных, входящих

¹⁾ В данном случае нельзя, конечно, ограничить задачу двумя измерениями, как в обычной механике, так как явление волны по существу трехмерно.

²⁾ Размеры этой области, в которой значения функции заметно отличаются от нуля, равны приблизительно $\frac{a_n}{n}$, где a_n — полуось эллиптической орбиты, соответствующей главному квантовому числу n (E. Schrödinger, Ann d. Phys. 79, 371, 1926).

в это выражение, в точности равно так называемому „статистическому весу“ этого уровня энергии, или, другими словами, числу отдельных уровней, на которые последний расщепляется, согласно теории Бора (а, значит, и согласно излагаемой теории) при появлении возмущающих сил, которые устраняют так называемое „вырождение“ проблемы¹⁾. При этом можно вспомнить, что в обычной механике упомянутый метод не дает вполне точного числа состояний. Определенные экспериментальные данные приводят к заключению, что приходится, при помощи добавочного рассуждения, — более или менее убедительного с теоретической точки зрения, — исключить некоторые из этих состояний, а именно те, для которых экваториальное квантовое число равно нулю²⁾. Мы можем с удовлетворением констатировать то обстоятельство, что, согласно излагаемой теории, вышеупомянутое число произвольных постоянных, или, другими словами, число отдельных уровней или частот, на которые расщепляется каждый выродившийся уровень E при появлении возмущающего потенциала, получается совершенно правильным с самого начала. Теория не нуждается ни в каких дополнениях, так как она исключает колебательное состояние, соответствующее Боровской орбите с экваториальным квантовым числом, равным нулю.

Чтобы дополнить это описание, мы можем добавить, что самому низкому уровню E , или, с точки зрения волнового движения, „основному тону“, соответствующему нормальному состоянию атома, присущ только один вид колебания, и притом очень простой; функция ϕ проявляет полную сферическую симметрию и совершенно не имеет узловых поверхностей. Как радиальное квантовое число, так и порядок шаровой функции обращаются в нуль.

§ 5. Рассмотрим вкратце вопрос о том, почему уравнение (18) имеет конечные решения только при определенных значениях постоянной E . Все соображения, изложенные на предыдущих страницах, были бы вполне обычны для всякого физика, если бы задача была так называемой „задачей о предельных условиях“, т. е. если бы функция ϕ требовалась только внутри какой-нибудь данной поверхности, — скажем, шара данного радиуса, — и должна была удовлетворять определенным условиям на границе этого шара, например, обращаться в нуль. Но хотя это и не имеет места, однако задача на самом деле эквивалентна

¹⁾ Например, при движении электрона по эллиптической орбите уровень энергии зависит только от одного „главного“ квантового числа, хотя форма орбиты определяется двумя квантовыми числами. Такая система называется „выродившейся“. При появлении внешней возмущающей силы (напр., электрического поля) каждый уровень энергии расщепляется на несколько уровней, зависящих уже от обоих квантовых чисел, и „вырождение“ системы прекращается.

Прим. перев.

²⁾ Это те состояния, при которых путь электрона пересекал бы ядро.

Прим. перев.

задаче о предельных условиях, при чем граница есть шар бесконечного радиуса. Таким образом, величины (19) представляют собою в сущности то, что называется „характеристическими числами“, а соответствующие им решения суть „фундаментальные функции“ задачи, относящейся к уравнению (18). С математической точки зрения¹⁾, предельные условия в собственном смысле слова ненужны и неприменимы для бесконечной границы по той причине, что мы приближаемся к особенной точке уравнения (18), если удаляемся по какому-нибудь направлению в пространстве в бесконечность. В этом легко убедиться, если разделить уравнение на два уравнения, как описано выше, воспользовавшись полярными координатами. Получающееся при этом обыкновенное дифференциальное уравнение с независимой переменной r имеет две особенные точки, при $r=0$ и при $r=\infty$. Оно имеет (при отрицательных значениях E) только одно решение, которое остается конечным при $r=0$ и только одно решение, конечное при $r=\infty$. Хотя эти решения и не совпадают, но они имеют место при определенных значениях E , выраженных формулой (19).

Вместо того, чтобы останавливаться на чисто математической стороне предмета, я попытаюсь дать понятие об особенных свойствах уравнения (18) так, чтобы суть дела была ясна и для тех, кто привык иметь дело только с общими принципами волновой теории. Если E отрицательно, то скобки в уравнении (18) будут отрицательными вне шара некоторого радиуса. Если вспомнить, каким путем уравнение (18) выведено из уравнения (15), то мы увидим, что при отрицательном значении скобок в (18) квадрат скорости волны отрицателен, а скорость волны мнимая. Что же это означает? Как известно, оператор Лапласа непосредственно связан со средним избытком соседних значений функции по сравнению со значением функции в рассматриваемой точке. Поэтому обычное волновое уравнение (15) с положительной величиной $\hbar^2$ указывает на ускоренное возрастание (или замедленное убывание) функции в тех точках, где значение ее меньше, чем средняя величина соседних значений; и, обратно, замедленное возрастание (или ускоренное убывание) функции в тех точках, где значение ее больше, чем в соседних точках²⁾. Таким образом, обычное волновое уравнение указывает на определенную тенденцию к сглаживанию всех различий между значениями функции в различных точках, хотя и не в самый момент их появления и не насколько угодно, как в случае уравнения теплопроводности. Однако она в известной мере предохраняет функцию от неограниченного возрастания или убывания.

¹⁾ См., напр., R. Courant und D. Hilbert, Methoden der mathematischen Physik, I, гл. V, § 9, п. 1.

²⁾ Другими словами, знак второй производной от ϕ по времени одинаков со знаком оператора Лапласа.

по себе в высокой степени удовлетворительно. Но, кроме того, оказывается возможным вычислить амплитуды гармонических составляющих электрического момента для какого-либо направления в пространстве, например, в случае явления Штарка, параллельно электрическому полю или перпендикулярно полю. Если теория верна, то квадраты этих амплитуд должны быть пропорциональны интенсивностям отдельных компонент линий, поляризованных в каком-либо направлении. Были произведены довольно трудные вычисления, результат которых показан на рис. 1¹⁾.

При сравнении теории с опытом необходимо иметь в виду, что вычисления были произведены только для предельного случая очень слабого внешнего поля, и что при той силе поля, которая применялась

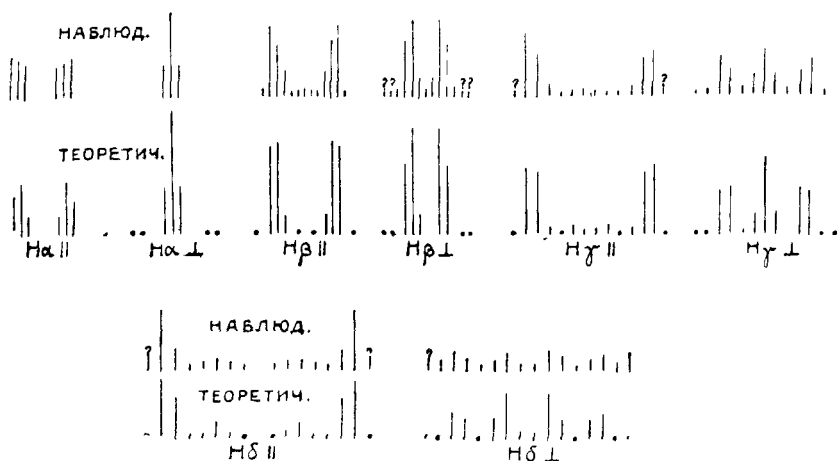


Рис. 1.

на опыте (около 100 000 вольт/см), как опыт, так и теория указывают на заметное влияние интенсивности. В частности, очень слабые или исчезающе-малые компоненты заметно усиливаются при возрастании поля. Сумма интенсивностей всех перпендикулярных компонент одной и той же Бальмеровской линии оказывается в точности равной сумме интенсивностей параллельных компонент той же линии. Это вполне совпадает с установленным Штарком положением, что поле не вызывает поляризации испускаемого света в целом.

Я должен указать, что пришел к упомянутому почти классическому вычислению интенсивностей, отметив *a posteriori* (т. е. после того, как были развиты основные черты волновой механики) его полное математическое согласие с теорией матриц, предложенной Гей-

¹⁾ Опытные данные взяты из работы Штарка (J. Stark, Ann. d. Phys. 48, 193, 1915). На чертеже отмечены точкой теоретические интенсивности, которые слишком малы для того, чтобы быть выраженными при помощи черты заметной длины

зенбергом, Борном и Йорданом¹⁾). Результаты, указанные на рис. 1, можно назвать также результатами последней теории, хотя они еще не были вычислены при помощи непосредственного применения ее. Связь между двумя теориями довольно сложная и никак не может быть замечена с первого взгляда.

§ 7. В начале статьи мы указали на то, что в излагаемой теории как законы движения, так и квантовые условия могут быть выведены из одного принципа Гамильтона. Чтобы доказать это, необходимо убедиться в том, что волновое уравнение (16) может быть выведено из вариационного принципа, так как это уравнение, действительно, единственное основное уравнение теории (для случая одной материальной точки, движущейся в консервативном силовом поле, — единственного подробно рассмотренного на предыдущих страницах).

Связь между уравнением (16) и принципом Гамильтона очень проста, — такая же точно, как и в обыкновенных задачах о колебаниях. Кроме того, эта связь позволяет очень просто и последовательно обобщить теорию для любых консервативных систем.

Положим, что требуется найти экстремные значения следующего интеграла, взятого по всему пространству:

$$J_1 = \iiint \left\{ \frac{\hbar^2}{8\pi^2 m} \left[\left(\frac{\partial \phi}{\partial x} \right)^2 + \left(\frac{\partial \phi}{\partial y} \right)^2 + \left(\frac{\partial \phi}{\partial z} \right)^2 \right] + V\phi^2 \right\} dx dy dz, \quad (20)$$

при чем „допустимы“ все функции ϕ , которые однозначны, конечны, имеют непрерывные производные и сообщают следующему „нормализующему“ интегралу постоянную величину, например 1:

$$J_2 = \iiint \phi^2 dx dy dz = 1. \quad (21)$$

Если выполнить вариацию при дополнительном условии по известным методам, то мы получим уравнение (16) в качестве известного необходимого условия для экстремного значения интеграла (20), при чем постоянная — E служит множителем Лагранжа, на который нужно умножить вариацию второго интеграла и прибавить к первому, чтобы принять в расчет дополнительное условие²⁾. Таким образом,

¹⁾ W. Heisenberg. *ZS. f. Phys.* 33, 879, 1925; M. Born und P. Jordan. *ZS. f. Phys.* 34, 858, 1925. M. Born, P. Jordan und W. Heisenberg. *ZS. f. Phys.* 35, 557, 1926; M. Born und N. Wiener, *ZS. f. Phys.* 36, 174, 1926; W. Heisenberg und P. Jordan. *ZS. f. Phys.* 37, 263, 1926; W. Pauli, j-r., *ZS. f. Phys.* 36, 336, 1926; P. A. M. Dirac, *Proc. Roy. Soc.* 109, 642, 1925; 110, 561, 1927; 111, 281, 405, 1926.

²⁾ На основании правил вариационного исчисления, нахождение функции ϕ , обращающей интеграл J_1 , в экстрем (максимум или минимум) при условии (21) сводится к интегрированию дифференциального уравнения, с частными производными:

$$\frac{\partial F}{\partial \phi} - \frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{\partial F}{\partial \dot{\phi}} \right) - \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\partial F}{\partial \dot{\phi}_x} \right) - \frac{\partial}{\partial y} \left(\frac{\partial F}{\partial \dot{\phi}_y} \right) - \frac{\partial}{\partial z} \left(\frac{\partial F}{\partial \dot{\phi}_z} \right) = 0,$$

нормализованные фундаментальные функции уравнения (16) суть так называемые экстремали ¹⁾ интеграла (20) при нормализующем условии (21), причем характеристические числа, т. е. допустимые значения постоянной E , суть не что иное, как экстремные значения интеграла (20). (Это свойство множителя Лагранжа хорошо известно. В нем легко убедиться, если принять во внимание, что экстремное значение $J_1 - EJ_3$ должно равняться нулю, так как всякое другое значение может быть увеличено или уменьшено простым умножением на постоянный множитель.)

Подинтегральная функция (20) оказывается связанной очень простой зависимостью с обыкновенной Гамильтоновой функцией нашей механической проблемы — в смысле обыкновенной механики. Упомянутая функция равна (см. § 1)

$$\frac{p_x^2 + p_y^2 + p_z^2}{2m} + V(x, y, z). \quad (22)$$

Мы полагаем, что эта функция есть однородная квадратичная функция моментов p_x и т. д. и единицы и заменим

$$p_x, p_y, p_z, 1$$

соответственно через

$$\frac{h}{2\pi} \frac{\partial \phi}{\partial x}, \quad \frac{h}{2\pi} \frac{\partial \phi}{\partial y}, \quad \frac{h}{2\pi} \frac{\partial \phi}{\partial z}, \quad \phi.$$

Тогда мы получим подинтегральную функцию (20). Отсюда естественно обобщить нашу вариационную проблему и вместе с тем уравнение (16) на любую консервативную механическую систему. Гамильтонова функция такой системы имеет вид:

$$\frac{1}{2} \sum_{i=1}^N \sum_{k=1}^N a_{ik} p_i p_k + V, \quad (23)$$

где $a_{ik} = a_{ki}$, а величины a_{ik} и V суть некоторые функции N обобщенных координат $q_1 \dots q_N$. Полагаем, что (23) есть однородная квадра-

где

$$F = \frac{h^2}{8\pi^2 m} \left[\left(\frac{\partial \phi}{\partial x} \right)^2 + \left(\frac{\partial \phi}{\partial y} \right)^2 + \left(\frac{\partial \phi}{\partial z} \right)^2 \right] + V\phi^2 - E\phi^2;$$

$$\phi_t = \frac{\partial \phi}{\partial t}; \quad \phi_x = \frac{\partial \phi}{\partial x}; \quad \phi_y = \frac{\partial \phi}{\partial y}; \quad \phi_z = \frac{\partial \phi}{\partial z}.$$

Значение множителя Лагранжа — E определяется из предельных условий. Подставив значение F в написанное нами дифференциальное уравнение, получим уравнение (16).

¹⁾ Функции, обращающие интеграл (20) в экстрем.

Прим. перев.

Прим. перев.

тичная функция от $p_1 \dots p_N$, 1, и заменим эти количества соответственно через

$$\frac{h}{2\pi} \frac{\partial \psi}{\partial q_1} \dots, \quad \frac{h}{2\pi} \frac{\partial \psi}{\partial q_n}, \quad \psi.$$

Обозначив через Δ_p определитель

$$\Delta_p = \left| \sum \pm a_{ik} \right|, \quad ^1)$$

составим интеграл

$$J_1 = \int \dots \int \left[\frac{h^2}{8\pi^2} \sum_l \sum_k a_{lk} \left(\frac{\partial \psi}{\partial q_l} \right) \left(\frac{\partial \psi}{\partial q_k} \right) + V\psi^2 \right] \cdot \frac{1}{\sqrt{\Delta_p}} dq_1 \dots dq_N \quad (24)$$

взятый по всему координатному пространству, и отыщем его экстремальные значения при дополнительном условии:

$$J_2 = \int \dots \int \psi^2 \cdot \frac{1}{\sqrt{\Delta_p}} dq_1 \dots dq_N = 1. \quad (25)$$

Это приводит к обобщению уравнения (16), а именно:

$$\sqrt{\Delta_p} \sum_l \frac{\partial}{\partial q_l} \left(\frac{\sum_k a_{lk} \frac{\partial \psi}{\partial q_k}}{\sqrt{\Delta_p}} \right) + \frac{8\pi^2}{h^2} (E - V) \psi = 0, \quad (26)$$

где — E , как и раньше, множитель Лагранжа для (25).

Двойная сумма, фигурирующая в (26), есть своего рода обобщение оператора Лапласа в неевклидовом координатном пространстве, N измерений. Необходимость появления множителя

$$\frac{1}{\sqrt{\Delta_p}}$$

в интегралах в роде (24) или (25) хорошо известна из статистической механики Гиббса;

$$\frac{1}{\sqrt{\Delta_p}} dq_1 \dots dq_N$$

¹⁾ В раскрытом виде этот определитель равен:

$$\begin{array}{cccccc} a_{11} & a_{12} & \dots & \dots & \dots & a_{1N} \\ a_{21} & a_{22} & \dots & \dots & \dots & a_{2N} \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ a_{N1} & a_{N2} & \dots & \dots & \dots & a_{NN} \end{array}$$

Он представляет собою дискриминант квадратичной формы в (23) (без Γ), выражающей кинетическую энергию.

Прим. перев.

есть просто неевклидов элемент объема, например, $r^2 \sin \theta d\theta d\varphi dr$ в случае одной материальной точки с массой, равной единице, положение которой определяется тремя полярными координатами r, θ, φ ¹⁾.

(Если пропустить определитель, то интегралы не будут инвариантны по отношению к точечным преобразованиям; они будут зависеть от выбора обобщенных координат.) Уравнение (26) применялось для решения всех проблем, упомянутых в § 6.

§ 8. Мы отложим обсуждение вопроса о реальном физическом значении волновой функции ψ (см. § 6) для того, чтобы можно было рассмотреть его наиболее общим образом для любой произвольной системы. Уравнение (16), или, в более общем случае, уравнение (26) выражает зависимость волновой функции ψ только от координат, а зависимость от времени выражается для каждого частного решения, соответствующего частному характеристическому числу $E = E_l$, вещественной частью величины

$$e^{\left(\frac{2\pi E_l t}{h} + \theta_l\right) i}; \quad i = \sqrt{-1},$$

где θ_l — фазовые постоянные. Если u_l (где $l = 1, 2, 3, \dots$) суть фундаментальные функции, то наиболее общее решение волновой проблемы равно (вещественной части)

$$\psi = \sum_{l=1}^{\infty} c_l u_l e^{\left(\frac{2\pi E_l t}{h} + \theta_l\right) i} \quad (27)$$

(Для простоты мы предполагаем, что характеристические числа все однократны и дискретны.) Величины c_l суть вещественные постоянные. Составим теперь квадрат абсолютного значения комплексной функции ψ . Он равен

$$\psi \bar{\psi} = 2 \sum_{l, l'} c_l c_{l'} u_l u_{l'} \cos \left[\frac{2\pi (E_l - E_{l'})}{h} t + \theta_l - \theta_{l'} \right], \quad (28)$$

¹⁾ Другими словами, определитель Δp равен единице, разделенной на функциональный определитель (якобиан) преобразования координат декартовых в обобщенные. В этом можно убедиться, если подставить в (22) выражения моментов p_x и т. д. через обобщенные координаты, т. е.

$$p_x = m \dot{x} = m \sum_i \frac{\partial x}{\partial q_i} \dot{q}_i \quad \text{и т. д.}$$

и вычислить коэффициенты a_i , принимая во внимание определение обобщенного момента:

$$p_i = \frac{\partial T}{\partial \dot{q}_i},$$

где T — кинетическая энергия, есть первый член в (23).

Прим. перев.

где чертой отмечена сопряженная комплексная величина. Величина $\psi \bar{\psi}$, подобно самой ψ , есть в общем случае функция обобщенных координат $q_1 \dots, q_N$ и времени, а не функция обычного пространства и времени, как в обычных волновых проблемах. Отсюда возникает затруднение при исследовании физического значения волновой функции. В случае атома водорода (рассматриваемого как задача об одном теле) этого затруднения нет. В этом случае можно довольно точно вычислить значения интенсивностей, например, компонент в явлении Штарка (см. § 6, рис. 1), при помощи следующей гипотезы: заряд электрона не сосредоточен в одной точке, а распределен по всему пространству с плотностью, пропорциональной величине $\psi \bar{\psi}$.

Необходимо иметь в виду, что и при этой гипотезе заряд электрона фактически ограничен областью в несколько онгстрем, так как волновая функция ψ практически обращается в нуль при большом расстоянии от ядра (см. § 4). Флюктуация заряда определяется уравнением (28) в применении к частному случаю водородного атома. Чтобы найти излучение, которое, на основании обычной электродинамики, вызывается этими зарядами, нужно только вычислить прямоугольные составляющие полного электрического момента¹⁾, умножив (28) соответственно на x , y , z и интегрируя по объему, например²⁾:

$$\iiint z \psi \bar{\psi} dx dy dz = 2 \sum_{l, l'} c_l c_{l'} \cos \left[\frac{2\pi (E_l - E_{l'}) t}{h} + \theta_l - \theta_{l'} \right] \cdot \iiint z u_l \cdot u_{l'} dx dy dz \quad (29)$$

Таким образом, полный электрический момент рассматривается как результат наложения диполей, которые связаны с парами фундаментальных функций, колеблющихся гармонически с частотами

$$\frac{E_l - E_{l'}}{h},$$

хорошо известными из знаменитых условий частот Н. Бора.

Интенсивность испускаемого излучения данной частоты должна, повидимому, быть пропорциональна квадрату величины

$$c_l c_{l'} \iiint z u_l u_{l'} dx dy dz.$$

¹⁾ Это действие правильно лишь по той причине и до тех пор, пока заряд практически сосредоточен внутри объема, который мал по сравнению с оптической длиной волны, соответствующей частотам

$$\frac{E_l - E_{l'}}{h}.$$

²⁾ В сумме $\sum_{l, l'}$ каждую пару значений l, l' нужно взять только по одному разу, а члены, в которых $l = l'$, разделить на 2.

При вычислении интенсивностей компонент явления Штарка (рис. 1), делается допущение, что величины C_i равны для каждого ряда характеристических чисел, полученных из одного Бальмеровского уровня (ур. 19—2) при действии электрического поля. Тогда относительные интенсивности компонент тонкой структуры должны быть пропорциональны квадрату тройного интеграла. Это допущение хорошо согласуется с опытом.

Тройной интеграл можно считать равным тому, что в теории Гейзенберга носит название „элемент матрицы $z(l, l')$ “. В этом заключается внутреннее соответствие между обеими теориями. Но важное преимущество излагаемой теории — как бы несовершенна она ни была во многих отношениях — состоит, по моему, в том, что, исходя из определенной локализации заряда в пространстве и времени, мы действительно оказываемся в состоянии вычислить на основании обычной электродинамики как частоту, так и интенсивность и поляризацию испускаемого света. Все так называемые принципы отбора получаются автоматически из того обстоятельства, что тройной интеграл обращается в нуль в частных случаях.

Как же теперь обобщить эти представления для случая более чем одного, например, N электронов? Здесь формальная теория Гейзенберга оказалась очень ценной. Она показала, не столько при помощи физического рассуждения, сколько благодаря своей компактной формальной структуре, что уравнение (29), представляющее прямоугольную составляющую полного электрического момента, должно быть сохранено, с теми лишь особенностями, что 1) интегралы не тройные, а N -кратные, взятые по всему координатному пространству, 2) z заменяется суммой $\sum l_i z_i$, т. е. составляющей z полного электрического момента, который вызывается моделью точечных зарядов в конфигурации $(x_1, y_1, z_1; x_2, y_2, z_2; \dots x_n, y_n, z_n)$, относящейся к элементу интегрирования $dx_1 \dots dz_N$.

На основании этого приходится сделать следующую гипотезу о физическом значении ψ — гипотезу, которая сводится, конечно, к нашей предыдущей гипотезе в случае одного только электрона: реальное непрерывное распределение заряда есть своего рода среднее из непрерывного множества всевозможных конфигураций соответствующей модели точечных зарядов, причем среднее берется таким образом, что величина $\psi \bar{\psi}$ есть своего рода весовая функция в пространстве конфигурации.

В настоящее время еще нельзя выдвинуть какие-либо вполне определенные экспериментальные результаты в пользу обобщенной гипотезы. Но некоторые очень общие теоретические выводы о величине $\psi \bar{\psi}$ приводят меня к убеждению, что теория правильна. Например, величина интеграла от $\psi \bar{\psi}$, взятого по всему пространству, оказывается абсолютно постоянной (как и следует ожидать, если $-\psi \bar{\psi} -$

правильная весовая функция) не только для консервативной, но и для неконсервативной системы. Исследование последней будет рассмотрено в общих чертах в следующем параграфе.

§ 9. Уравнение (16) или, в более общем виде, уравнение (26), которое является основным для всего нашего рассуждения, было выведено в предположении, что ϕ зависит от времени только через посредство множителя:

$$e^{\pm \frac{2\pi i E t}{h}} \quad (30)$$

Но отсюда следует, что

$$\dot{\phi} = \pm \frac{2\pi i E}{h} \phi. \quad (31)$$

Из этого уравнения и уравнения (26) можно исключить величину E и тогда получится уравнение, которое действительно во всяком случае, какова бы ни была зависимость волновой функции ϕ от времени:

$$\sqrt{\Delta_p} \sum_l \frac{\partial}{\partial q_l} \left(\frac{\sum_k a_{lk} \frac{\partial \phi}{\partial q_k}}{\sqrt{\Delta_p}} \right) - \frac{8\pi^2}{h^2} V\phi \mp \frac{4\pi i}{h} \frac{\partial \phi}{\partial t} = 0. \quad (32)$$

Двойной знак в последнем члене не представляет важного затруднения. Так как физический смысл приписывается только произведению $\phi \bar{\phi}$, то мы можем принять для ϕ любое из двух уравнений (32); тогда $\bar{\phi}$ будет удовлетворять другому уравнению, а произведение их останется неизменным.

Уравнение (32) может быть обобщено для произвольной неконсервативной системы, если только допустить, что потенциальная функция V зависит от времени явным образом. Наибольший интерес представляет тот случай, когда к потенциальной энергии консервативной системы прибавляется небольшой член. Последний представляет неконсервативную потенциальную энергию, которая сообщается системе падающей на нее световой волной. Мы не можем здесь заниматься деталями, но укажем только на основные черты решения. Действие падающего света состоит в том, что каждое свободное колебание невозмущенной системы, частоты $\frac{E_i}{h}$ сопровождается двумя вынужденными колебаниями, с меньшими, вообще, амплитудами и с частотами $\frac{E_i}{h} \pm \gamma$, где γ — частота падающего луча света. Следуя

тем же принципам, что и в предыдущем параграфе, мы получим, что каждое свободное колебание, взаимодействуя с сопровождающими его

вынужденными колебаниями, порождает вынужденное излучение света с разностной частотой

$$\frac{E_i}{h} - \left(\frac{E_i}{h} \pm \nu \right) = \mp \nu,$$

т. е. равной частоте падающего луча. Это вынужденное излучение нужно, конечно, отождествить со вторичными элементарными волнами, которые необходимы для описания поглощения, дисперсии и рассеяния. Действительно, вычисление показывает, что амплитуды их возрастают очень заметно, когда частота падающего света ν , приближается к одной из частот излучения $\frac{E_i - E_{i'}}{h}$. Окончательная формула

почти совпадает с известной формулой дисперсии Гельмгольца в форме, сообщенной ей Крамерсом¹⁾.

Случай резонанса пока еще не удается исследовать вполне удовлетворительно, так как член, выражающий затухание, отсутствует в нашем основном уравнении, даже в случае свободной консервативной системы. (Излучение, которое испускается, согласно допущения § 8, при взаимодействии каждой пары свободных колебаний, должно, конечно, каким-то образом изменять их амплитуды. Но этого не получается из сделанных до сих пор допущений.) Однако интересно отметить, что даже при отсутствии члена с затуханием, мы не встречаемся со случаем бесконечно большой амплитуды при резонансе, что, как известно, получается при классическом рассмотрении вопроса. Здесь получается только то, что падающая световая волна с произвольно малой амплитудой усиливает вынужденное колебание системы до конечной амплитуды. Кроме того, если вначале существует только одно свободное колебание, например, соответствующее энергии E_i , и если

$$h\nu = E_{i'} - E_i,$$

то вынужденное колебание, усиленное до конечной амплитуды, тождественно по строению и частоте со свободным колебанием, соответствующим $E_{i'}$. В то же время амплитуда колебания E_i заметно уменьшается. Сумма квадратов всех амплитуд остается постоянной при всех обстоятельствах. Такой ход явления проливает некоторый свет (хотя и неполный) на так называемый переход из одного стационарного состояния в другое, который до сих пор совершенно не поддавался вычислению.

§ 10. В вышеизложенном сообщении волновая теория механики была развита без отношения к двум очень важным предметам: 1) изменениям в классической механике, вносимым теорией относительности,

¹⁾ H. A. Kramers, Nature, May 10 (1924), Aug. 30 (1924); H. A. Kramers und W. Heisenberg, ZS. f. Phys. 31, 681, 1925.

2) действию магнитного поля на атом. Но это можно считать уже частностями, так как Л. де-Бройль, фундаментальные исследования которого послужили основой для излагаемой теории, исходил именно из релятивистской теории движения электрона и с самого начала принимал в расчет как магнитное, так и электрическое поле.

Конечно, можно взять ту же исходную точку и для данной теории и развить ее достаточно далеко, применяя релятивистскую механику вместо классической и включая действие магнитного поля. Таким путем были получены интересные результаты относительно изменения длины волны, интенсивности и поляризации компонент тонкой структуры и компонент явления Зеемана для атома водорода¹⁾. Я не счел необходимым развить здесь эту форму теории по двум основаниям. Во-первых, пока еще не удалось обобщить релятивистскую теорию для системы с несколькими электронами. А именно в этой области можно рассчитывать на разрешение новой теорией проблем, которые были недоступны для старой теории. Во-вторых, релятивистская теория водородного атома является, повидимому, неполной. Результаты оказываются в серьезном противоречии с опытом, так как в известной формуле Зоммерфельда для смещения компонент естественной тонкой структуры так называемое азимутальное квантовое число (а также и радиальное квантовое число) получается „полуцелым“, т. е. равняется половине нечетного числа, а не целому числу. Таким образом, тонкая структура оказывается неправильной.

Это затруднение находится, повидимому, в тесной связи с теорией Уленбека и Гаудсмита²⁾ о вращающемся электро-не. Но каким образом можно принять в расчет вращение электрона в настоящей теории, пока еще неизвестно³⁾.

1) V. Fock. ZS. f. Phys. 38, 242, 1926. *Прим. перев.*

2) G. E. Uhlenbeck and S. Goudsmit. Physica, 1925; Nature, Feb. 20. 1926.

3) Попытка связать волновую механику Шрёдингера в релятивистской форме с теорией вращающегося электрона произведена Ф. Лондоном (F. London, Naturwissenschaften, 15, 15, 1927). *Прим. перев.*