ВВЕДЕНИЕ В ВОЛНОВУЮ МЕХАНИКУ ШРЁДИНГЕРА. [1]

Карл К. Дарроу, Нью-Йорк.

В период, когда одна какая-либо область физических явлений вызывает особенно жгучий интерес и подвергается особенно интенсивной разработке, сосредоточивая на себе внимание многих блестящих представителей теоретической физики, чьей-либо гениальной интуиции иногда удается дать известным законам такое новое обоснование, представить их в таком новом свете, что этот новый аспект знакомых явлений с чрезвычайной быстротой вытесняет все прежние. При этом новая теория часто не дает даже большей согласованности с экспериментом, чем прежние; она может не вести к каким-либо новым предсказаниям; ее математические выводы могут быть тождественны с выводами старой теории; прежние символы могут повторяться в тех же по существу уравнениях, под новыми названиями. В других случаях теория может обладать всеми перечисленными достоинствами, которые обычно являются решающими при замене одной теории другой, и тем не менее быть обязанной своей победой отнюдь не им. Новая теория торжествует потому, что она кажется более естественной, более вразумительной или более красивой, — все эти слова обозначают, что теория удовлетворяет какому-то требованию (или не противоречит какому-то предубеждению), глубоко укоренившемуся в уме ее совре-

[1] Настоящая статья впервые была опубликована в „Bell System Technical Journal“ и вслед за тем появилась в немецком переводе отдельной книжкой с предисловием Э. Шрёдингера (изд. S. Hirzel, Leipzig 1929). Настоящий перевод сделан по первоначальному английскому тексту и сверен с немецким изданием, куда автор внес ряд поправок и изменений.
Ред.

менников. Позже волна успеха теории может спасть не потому, чтобы открылись какие-либо существенные недостатки ее, а просто потому, что следующее поколение физиков не разделяет более симпатий и предубеждений предыдущего. Кинетическая теория газов была встречена с восторгом поколением, которое хотело верить в существование атомов; электромагнитная теория Максвелла — поколением, не хотевшим признавать действия на расстоянии. Теория квантов всегда должна была бороться против скептицизма тех, кто не хотел примириться с отказом от непрерывности в явлениях природы. Теория, о которой будет итти речь в настоящей статье, завоевала себе в течение немногих месяцев широкое признание в научном мире потому, что она обещала исполнить долго подавлявшиеся, но неизгладимые желания большинства современных физиков.

Так как волновая механика де Бройля-Шрёдингера является новым способом объяснения широкой области известных уже явлений, то попытка полного обзора в одной статье всего, что эта теория может объяснить, является и бесполезной и едва ли выполнимой. Быть может, через несколько лет мы найдем наиболее убедительные доказательства в пользу справедливости новой теории в каких-либо новых или еще мало известных физических явлениях, вроде недавно открытой интерференции электронов; в настоящее время достаточным доказательством можно считать возможность объяснить с помощью волновой механики те основные факты, которые послужили материалом для создания Боровской модели атома. Я напомню, что важнейшие и наиболее существенные факты в области, которая интересует нас в настоящей статье, суть следующие: атомы существуют в особых так называемых стационарных состояниях; они излучают или поглощают лучистую энергию при переходе из одного стационарного состояния в другое; при этом частота колебаний определяется разностью между энергиями атома до и после процесса. Далее, между энергиями различных стационарных состояний у некоторых атомов и молекул существуют закономерные соотношения, выражаемые теми или иными эмпирическими формулами. Вот вкратце факты, подлежащие объяснению.

Бор показал, что значения энергии, которою обладает в различных стационарных состояниях атом водорода, могут быть объяснены теоретическим путем с помощью следующих допущений: во-первых, атом состоит из ядра и одного электрона, с известным соотношением масс, и с равными, но противоположными по знаку зарядами. Во-вторых, обе частицы — ядро и электрон — предполагаются обращающимися вокруг общего центра тяжести, согласно законам классической механики, но без излучения энергии. В-третьих, из бесконечного числа возможных по законам классической механики орбит выделяется группа эллипсов, удовлетворяющих известным требованиям, и эти эллипсы объявляются единственными „разрешенными" для электрона орбитами; каждой такой орбите соответствует особое „стационарное состояние" атома. Обратно, каждое стационарное состояние может быть рассматриваемо как соответствующее особой дозволенной орбите.

Первое из этих предположений со времени его появления не исчезало больше из представления физиков. Волновая механика также сохранила его, хотя и в несколько скрытой форме. Несколько менее прочны второе и третье из основных положений Бора. Эти утверждения по существу остаются — и всегда останутся — справедливыми в тех рамках, в которых они только и были справедливы с самого начала. Это значит: если мы примем первые два положения Бора, то можно с уверенностью сказать, что для каждого эмпирически установленного стационарного состояния атома можно будет подыскать подходящую, т. е. обладающую надлежащей энергией, эллиптическую орбиту. Однако существенно не это, а то, в состоянии ли мы указать простые и ясные критерии, позволяющие выделить семью разрешенных эллипсов из бесконечного множества возможных вообще орбит, и указать признаки, которым удовлетворяют все дозволенные орбиты — и никакие другие. С первого взгляда это кажется возможным. Однако ближайшее исследование показало, что характерные признаки, установленные было для отличения дозволенных орбит от всех прочих отнюдь не во всех случаях пригодны для этой цели. Престиж дозволенных эллипсов таким образом несколько упал. Правда, введение вращающегося около соб-

ственной оси электрона (spinning electron) в значительной степени улучшило положение; однако и это улучшение модели не могло спасти ее от растущего недоверия — особенно со стороны тех, кто никогда не верил как следует в ее реальность.

Что касается других атомов и молекул, то и тут положение было аналогичным. Бор и его последователи рассматривали атомы как системы из большего или меньшего числа электронов, окружающих ядро. Двуатомные молекулы рассматривались как системы из двух ядер, связанных общими электронами, и способные, с одной стороны, обращаться вокруг общего центра тяжести, а с другой — колебаться, как два конца пружины, в направлении линии, связывающей центры обоих атомов друг с другом. Этот образ сохраняется и в волновой механике, но представления о разрешенных амплитудах колебания и скоростях обращения атомов и о дозволенных орбитах электронов в настоящее время так же сильно взяты под подозрение, как и представление о дозволенных эллиптических орбитах в атоме водорода.

Потеря уверенности в реальном существовании эллиптических орбит только обострила внимание к другому существенному недостатку первоначальной модели Бора. Модель эта не давала никакого объяснения тому факту, что при переходе атома из одного стационарного состояния с энергией E_i в другое, с энергией E_j, он поглощал (или излучал) волну света с частотой, в точности определяемой уравнением

$$\nu = \frac{1}{h}(E_i - E_j),$$

т. е. равной частному от деления разности энергий на постоянную Планка. Ни в начальном, ни в конечном состоянии атома ничто не колеблется и не вращается в нем с частотой равной частоте испускаемой при переходе волны (исключения из этого правила не имеют принципиального значения). Таким образом, частота испускаемой атомом волны не имеет ничего общего с периодом обращения или колебания составных частей атома, — это представление нельзя было не назвать загадочным, так как оно расходилось со всеми наблюдениями в области как звуковых, так и электрических волн.

Если бы удалось ввести в атомную модель представление о каком-либо вибраторе или ротаторе, с частотой периодического движения, измеряющейся частным от деления энергии соответствующего стационарного состояния на постоянную Планка, тогда это „что-то" колебалось бы до испускания волны с частотой E_j/h, а после испускания с частотой E_j/h, и частота испущенной волны равнялась бы частоте биений, получаемых при интерференции обоих колебаний. Это весьма соблазнительная возможность; и волновая механика открывает путь к практическому использованию ее. Если окажется возможным получить правильные значения для энергий стационарных состояний путем предъявления определенных требований к этому колеблющемуся „чему-то" взамен электронных орбит, то мы получим представление об атоме, которое объясняет все, что в силах объяснить модель с эллиптическими орбитами, плюс еще упомянутое выше толкование частоты испускаемых атомом колебаний, а может быть и еще что-либо в придачу. Вот прогресс, который обещает нам развитие волновой механики.

Прежде чем перейти к самому изложению, я хотел бы закончить настоящее введение двумя предупреждениями. Во-первых, необходимо указать на то обстоятельство, что волновая механика имеет несколько различных аспектов, и к ней можно подойти с нескольких различных сторон. Путь, который я выбрал в настоящей статье, не вполне тождествен ни с путем, избранным де Бройлем, ни с таковым, примененным Шрёдингером в их оригинальных работах. Во-вторых, нужно заранее сказать, что волновая механика еще не полна. Она была с успехом применена к ряду важных проблем; но существует еще много явлений, требующих для своего объяснения расширения теории, которое до сих пор служит еще предметом споров между рядом теоретиков Новая механика до сих пор не застыла еще в какой-либо окончательной форме; она остается эластичной, и понадобится еще работа многих теоретиков — а может быть и многих экспериментаторов — для того чтобы придать ей окончательную форму. — В настоящей статье я делаю попытку изложить лишь первое обоснование теории; очертить лишь основные рассуждения Шрёдингера и де Бройля.

КЛАССИЧЕСКАЯ И ВОЛНОВАЯ МЕХАНИКА.

Основные принципы классической Ньютоновской механики могут быть выражены в различной форме, каждая из коих особенно приспособлена для разрешения определенных проблем. Наиболее широко известна формулировка, данная самим Ньютоном. К сожалению, для проблем, интересующих нас в настоящей статье, наиболее удобной является не эта, а другая форма выражения основных принципов механики. Я выведу эту форму из Ньютоновской, воспользовавшись одним особенно простым примером и исходя из декартовых координат.

Представим себе частицу с массой m и зарядом e, движущуюся в электростатическом поле, потенциал которого представляет собой функцию координат: $U(x, y, z)$.

Импульс (количество движения) частицы представляет собой вектор с компонентами $m\dot{x}$, $m\dot{y}$ и $m\dot{z}$. Мы назовем их импульсами в направлении координат x, y и z и обозначим буквами p_x, p_y и p_z. Сила, действующая на частицу, равняется произведению заряда e на градиент потенциала, взятый с обратным знаком. Градиент потенциала есть вектор с компонентами dU/dx, dU/dy, dU/dz.

Ньютонова формулировка основного закона механики (сила есть производная по времени от импульса)[1] дает:[2]

$$-e\frac{dU}{dx} = \frac{dp_x}{dt} \qquad \dot{p}_x; \qquad -e\frac{dU}{dy} = \frac{dp_y}{dt} \qquad \dot{p}_y;$$

$$-e\frac{dU}{dz} = \frac{dp_z}{dt} \qquad \dot{p}_z \tag{1}$$

---

[1] Формулировка „сила = масса × ускорение", как известно, не принадлежит самому Ньютону. Она однако тождественна с Ньютоновой формулировкой, когда масса постоянна; ибо из $K = \frac{d(mv)}{dt}$ при $m = \text{const}$ следует $K = m\frac{dv}{dt}$.

[2] Знаком $=$, как обычно, обозначается соотношение утверждаемое равенством; знаком $\equiv$ обозначается само собою разумеющееся тождество, т. е. мы тем самым символизируем лишь иное обозначение той же величины.

Умножая обе стороны на $\dot{x}\left(\equiv\frac{dx}{dt}\right)$, $\dot{y}$, $\dot{z}$ и складывая все три уравнения, получим:

$$\dot{p}_x\dot{x}+\dot{p}_y\dot{y}+\dot{p}_z\dot{z}=-e\left(\frac{dU}{dx}\cdot\frac{dx}{dt}+\frac{dU}{dy}\cdot\frac{dy}{dt}+\frac{dU}{dz}\cdot\frac{dz}{dt}\right).$$

Или, так как $\dot{p}_x=m\frac{dx}{dt}$ и т. д.:

$$\frac{d}{dt}\frac{1}{2}m(\dot{x}^2+\dot{y}^2+\dot{z}^2)=-e\left(\frac{dU}{dx}\cdot\frac{dx}{dt}+\frac{dU}{dy}\cdot\frac{dy}{dt}+\frac{dU}{dz}\cdot\frac{dz}{dt}\right) \quad (2)$$

В левой части этого равенства стоит скорость изменения кинетической энергии, которую мы, как обычно, назовем через T. Дадим теперь интерпретацию правой части.

С этою целью мы введем величину V. Этим символом мы обозначаем произведение из потенциала U в том месте, где находится частица в данный момент, на ее заряд e. Это произведение есть потенциальная энергия частицы, и правая часть уравнения (2) дает скорость изменения этой величины во времени. Таким образом все уравнения можно переписать в виде

$$\frac{d(T+V)}{dt}=0$$

или

$$T+V=\text{const}\equiv E. \quad (3)$$

Мы называем E полной энергией, и уравнение (3) выражает закон сохранения энергии в применении к замкнутой системе частиц+поле.

Для дальнейшего развития я воспользуюсь еще более частным случаем, именно предположу, что речь идет о движении частицы с массой m и зарядкой e в поле „ядра“, притягивающего частицу с силой обратно пропорциональной квадрату расстояния. Ядро мы представляем себе как неподвижный центр притяжения, несущий заряд, равный по величине и противоположный по знаку заряду частицы. Пользуясь декартовыми координатами, с началом совпадающим с ядром, мы имеем:

$$V=-\frac{e^2}{\sqrt{x^2+y^2+z^2}}.$$

В полярных координатах r, ϑ, φ (формулы преобразования $x = r\sin\vartheta\cos\varphi$; $y = r\sin\vartheta\sin\varphi$; $z = r\cos\vartheta$) потенциальная энергия выражается уравнением:

$$V = -\frac{e^2}{r}.$$

Ясно, что выражение для потенциальной энергии в полярных координатах в этом случае гораздо проще, чем в прямоугольных. Обратное справедливо в отношении кинетической энергии. Надлежащий выбор координат является при разрешении многих физических проблем вопросом первостепенной важности. Мы будем еще некоторое время вести рассуждение параллельно в обеих системах координат — прямоугольной и полярной. Основные уравнения (3) приобретают в рассматриваемом нами случае форму в прямоугольных координатах:

$$\frac{1}{2}m(\dot{x}^2 + \dot{y}^2 + \dot{z}^2) - \frac{e^2}{\sqrt{x^2 + y^2 + z^2}} = E, \qquad (4a)$$

в полярных координатах:

$$\frac{1}{2}m(\dot{r}^2 + r^2\dot{\vartheta}^2 + r^2\sin^2\vartheta\cdot\dot{\varphi}^2) - \frac{e^2}{r} = E. \qquad (4b)$$

В этих уравнениях потенциальная энергия выражена в функции координат (x, y, z или r, ϑ, φ). Кинетическая энергия представляется функцией координат и скоростей ($\dot{x}$, $\dot{y}$, $\dot{z}$ или $\dot{r}$, $\dot{\vartheta}$, $\dot{\varphi}$). Желательным для успеха дальнейших выводов является изображение кинетической энергии в функции координат и импульсов, взамен скоростей. Мы уже познакомились с выражением импульсов в прямоугольной системе координат; это были количества $m\dot{x}$, $m\dot{y}$ и $m\dot{z}$. Легко заметить, что величины эти суть производные кинетической энергии $\left[T = \frac{1}{2}(m\dot{x}^2 + m\dot{y}^2 + m\dot{z}^2)\right]$ по скоростям:

$$p_x = \frac{dT}{d\dot{x}} \qquad p_y = \frac{dT}{d\dot{y}} \qquad p_z = \frac{dT}{d\dot{z}}. \qquad (5)$$

Аналогичным образом определяются импульсы и в других системах координат: кинетическая энергия выражается в виде

функции скоростей, и затем дифференцируется по последним. В полярных координатах мы получаем таким образом:

$$p_r \equiv \frac{dT}{d\dot{r}} = m\dot{r} \qquad p_\vartheta \equiv \frac{dT}{d\dot{\vartheta}} = mr^2\dot{\vartheta}. \tag{6}$$

$$p_\varphi \equiv \frac{dT}{d\dot{\varphi}} = mr^2 \sin^2\vartheta \cdot \dot{\varphi}. \tag{7}$$

Выражая в уравнениях (4a) и (4b) кинетическую энергию в виде функции координат и импульсов, мы приходим к уравнениям:

$$\frac{1}{2m}(p_x^2 + p_y^2 + p_z^2) - \frac{e^2}{\sqrt{x^2+y^2+z^2}} = E \tag{7a}$$

$$\frac{1}{2m}\left(p_r^2 + \frac{1}{r^2}p_\vartheta^2 + \frac{1}{r^2\sin^2\vartheta}p_\varphi^2\right) - \frac{e^2}{r} = E. \tag{7b}$$

Когда кинетическая и потенциальная энергия выражены как функции координат и импульсов, проблема рассматриваемого нами рода может считаться подготовленной к разрешению по интересующим нас методам классической механики.

Дабы сделать следующий шаг, мы перейдем к рассмотрению функции $L = T - V$, т. е. разности между кинетической и потенциальной энергией частицы во время ее движения в силовом поле:

$$L \equiv T - V = 2T - E. \tag{8}$$

В частности, нас интересует интеграл этой функции по времени:

$$W \equiv \int L dt = \int 2\,T dt - Et \tag{9}$$

(E не зависит от времени).

Мы вводим в формулу (9) выражение кинетической энергии в прямоугольных или полярных (или любых других) координатах и получаем:

$$\begin{aligned} W &= m\int(\dot{x}^2 + \dot{y}^2 + \dot{z}^2)\,dt - Et = \\ &= m\int(\dot{x}dx + \dot{y}dy + \dot{z}dz) - Et \end{aligned} \tag{10a}$$

$$\begin{aligned} W &= m\int(\dot{r}^2 + r^2\dot{\vartheta}^2 + r^2\sin^2\vartheta\cdot\dot{\varphi}^2)\,dt - Et = \\ &= m\int(\dot{r}dr + r^2\dot{\vartheta}d\vartheta + r^2\sin^2\vartheta\cdot\dot{\varphi}d\varphi) - Et. \end{aligned} \tag{10b}$$

Из уравнений (10a) и (10b) видно, что

$$p_x = \frac{dW}{dx} \qquad p_y = \frac{dW}{dy} \qquad p_z = \frac{dW}{dz} \tag{11a}$$

$$p_r = \frac{dW}{dr} \qquad p_\vartheta = \frac{dW}{d\vartheta} \qquad p_\varphi = \frac{dW}{d\varphi}. \tag{11b}$$

Вообще импульсы, соответствующие той или иной системе координат, суть производные функции W по координатам.

При подстановке этих выражений для импульсов в основное уравнение (7) мы получаем:

$$\frac{1}{2m}\left[\left(\frac{dW}{dx}\right)^2 + \left(\frac{dW}{dy}\right)^2 + \left(\frac{dW}{dz}\right)^2\right] + V(x, y, z) = E. \tag{12}$$

Выражение

$$\sqrt{\left(\frac{dW}{dx}\right)^2 + \left(\frac{dW}{dy}\right)^2 + \left(\frac{dW}{dz}\right)^2}$$

представляет собой не что иное как абсолютную величину градиента функции W, которую мы, как это принято в векториальном анализе обозначаем с помощью приставки grad перед символом функции. Мы можем таким образом написать взамен (12):

$$(\text{grad } W)^2 = 2m\,(E - V). \tag{13}$$

Это уравнение определяет собой поведение производных функций W по координатам; дополнением к нему служит вытекающее из (9) соотношение: [1]

$$\frac{\partial W}{\partial t} = -E, \tag{13a}$$

определяющее производную W по времени.

Мы дошли теперь до места, где пути волновой механики расходятся с путями классической механики.

Идя путем классической механики, мы должны были бы приступить теперь к интегрированию уравнений и некоторым другим преобразованиям, в результате коих мы получили бы уравнения, изображающие собой траектории или орбиты, по

[1] T есть функция только координат x, y, z.

которым должна двигаться рассматриваемая нами частица. В частном случае, который мы выбрали, т. е. в случае центральной силы, действующей обратно пропорционально квадрату расстояния, эти орбиты оказались бы эллипсами. В каждом отдельном случае величина [и форма эллипса определилась бы соответственно значению постоянной E, а также значениям, принятым для других постоянных, встречающихся в ходе интеграции. Что касается функции W, то она, сыграв свою роль в качестве величины, облегчающей вычисление орбит, исчезла бы из конечного результата. В качестве физической реальности остался бы электрон, обращающийся по эллипсу вокруг ядра, или планета, обращающаяся вокруг солнца.

Волновая механика поступает иначе. Она основывается на наблюдении, что уравнения (13) и (13а) вместе изображают семейство волн, распространяющихся в пространстве со скоростью

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

Чтобы обнаружить этот скрытый смысл уравнений (13) и (13а), представим себе, что в заданный момент t_0 функция W имеет определенное заданное значение W_0 во всех точках какой-либо поверхности S_0; например значение $W_0 = 1$ в момент $t_0 = 1$ во всех точках шаровой поверхности с радиусом $r_0 = 1$ вокруг начала координат. Мы покажем, что спустя короткое время, в момент $t_0 + dt$, опять существует поверхность, во всех точках которой W имеет значение W_0; только это больше не поверхность S_0, а другая поверхность S_1, расположенная таким образом, что кратчайшее расстояние от точки на первоначальной поверхности S_0 до новой поверхности S_1 равняется [1]

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

Доказать это утверждение можно без всякого труда. Представим себе, что мы находимся в момент t_0 в точке P_0 и

[1] Следует иметь в виду, что электрон, движение которого мы исследуем, хотя и движется нормально к поверхностям $W = \text{const}$, но с совершенно другой скоростью v; о замечательном соотношении между скоростями v и u мы еще будем говорить в конце статьи.

движемся со скоростью u в направлении, перпендикулярном к поверхности S_0. В момент времени $t_0 + dt$ мы будем находиться в точке, где значение W определяется из формулы:

$$W = W_0 + dW = W_0 + \frac{\partial W}{\partial s} ds + \frac{\partial W}{\partial t} dt =$$

$$= W_0 + \text{grad } W ds + \left(\frac{\partial W}{\partial t}\right) dt =$$

$$= W_0 + u \text{ grad } W dt - E dt, \qquad (14)$$

так как в течение промежутка времени dt мы продвинулись на расстояние $ds = u dt$ вдоль нормали к поверхности S_0, т. е. в направлении, в котором W изменяется со скоростью grad W; в то же время по уравнению (13а) в каждой точке пространства W изменяется с течением времени со скоростью $-E$; таким образом в общем к моменту нашего прибытия в S_1 W возрастает до значения, изображенного в уравнении (14).[1] Если мы положим теперь, что скорость нашего движения

$$u = \frac{E}{\sqrt{2m\ (E - V)}} \qquad (15)$$

и подставим в уравнение (14) значение grad W из уравнения (13), то u grad $W - E$ в уравнении (14) окажется равным нулю; другими словами, во всех точках пространства, которые мы будем проходить, в момент нашего прихода будет господствовать одно и то же значение W_0; мы, так сказать, несем с собою это значение. То же самое можно выразить другими словами, сказав, что W распространяется в пространстве в виде волнового фронта, двигающегося вперед со скоростью, указанной в уравнении (15).

[1] Более подробный вывод: W есть функция пространства и времени; поэтому

$$dW = \frac{\partial W}{\partial s} ds + \frac{\partial W}{\partial t} dt. \qquad (a)$$

Но скорость изменения W в направлении нормали к „поверхности уровня“ S_0, по определению, есть не что иное как градиент W. Далее $ds = u\, dt$, а по (13а) $\frac{\partial W}{dt} = -E$. Пользуясь этим, мы можем представить (а) в следующем виде

$$dW = u \text{ grad } W \cdot dt - E dt.$$

Читатель невольно задаст теперь — если он не сделал этого уже раньше — следующий естественный вопрос: что же такое представляет собой в действительности эта функция W которая первоначально играла только вспомогательную роль а теперь приобрела неожиданно такое центральное значение? Читатель оглядывается назад, пытается уловить наглядное значение величины W, составить себе конкретное представление о ней. К сожалению, я не могу много помочь ему в удовлетворении этого весьма естественного желания. Я могу только указать, что W есть та самая величина, которая под названием „действия“ играет столь существенную роль при формулировке механического принципа наименьшего действия. Это обстоятельство вряд ли делает наше представление об этой функции более наглядным, но по крайней мере наше уважение к ней и вера в ее важное значение несколько увеличивается. Я могу далее подчеркнуть, что так как никто никогда не видел частиц, которые движутся внутри атома, то представление о волнах, струящихся в недоступном для нашего наблюдения медиуме вокруг ядра, ничем не менее „непосредственно“, чем представление о недоступных нашему непосредственному наблюдению электронах, обращающихся по эллипсам вокруг ядра. (Правда, на это можно возразить, что обращение планет вокруг солнца наглядно иллюстрирует представление об обращающихся вокруг ядра электронах, в то время как никто не видел еще на небе чего-либо подобного движущимся волновым фронтам функции W.) Я могу, наконец, отметить, что для многих практических применений — в частности для предсказания энергии стационарных состояний — не важно, что такое представляет собой „на самом деле“ функция W. Это столь же безразлично, как безразлично для решения квадратного уравнения, обозначена ли неизвестная величина буквой x или t и имел ли тот, кто составлял это уравнение, в виду расстояние или время. При практическом пользовании волновой механикой можно просто начать с уравнения (20), положив его в основу теории без дальнейшего объяснения или оправдания. Однако в действительности между новой и старой механикой должна быть глубокая внутренняя связь, которая

при таком механическом способе введения уравнения (20) останется совершенно незаметной. Я мог бы сослаться здесь на попытки самого Шрёдингера дать функции W реальное объяснение (попытки эти будут подробнее затронуты в последней части статьи). Однако я хотел бы, чтобы представление о функции W возникло у читателя самостоятельно, в ходе ознакомления с основами волновой механики.

Мы предложили читателю рассматривать уравнение (13) и (13а) как описание семейства волновых фронтов, движущихся вперед со скоростью $\frac{E}{\sqrt{2m\,(E-V)}}$. Легко заметить, что данное таким образом описание волны является неполным. В уравнениях (13) и (13а) не заключается никаких указаний на „длину волны“ или на „частоту“ того неизвестного процесса, который обусловливает собой возникновение волны. Если бы мы каким-либо путем и определили эту частоту, в уравнениях типа (13) для нее не найдется места.

Эти уравнения отвечают примерно простому утверждению, что гребни волн, возникающих на поверхности воды вследствие падения камня, кругообразно распространяются с определенной скоростью; или что звуковые сигналы от весьма удаленного источника звука можно рассматривать как плоские волны, движущиеся со скоростью 340 *м/сек*. Но для того чтобы детальнее описать водяные или звуковые волны, нужно еще указать их частоту и интенсивность; следовательно, нужно отыскать более объемлющее волновое уравнение. То же самое относится и к волнам функции W.

При исследовании обычных колебательных явлений, как-то: колебаний натянутых струн, мембран и т. п., обычно пользуются волновым уравнением в следующей общей форме:

$$u^2\left(\frac{d^2\psi}{dx^2}+\frac{d^2\psi}{dy^2}+\frac{d^2\psi}{dz^2}\right)\quad u^2\Delta\psi=\frac{d^2\psi}{dt^2}. \tag{16}$$

В этом уравнении ψ означает величину, которая распространяется волнообразно, например в случае механических колебаний — элонгацию, в случае электрических колебаний — напряжение поля, и т. д. Уравнение (16) утверждает, что ускорение, с которым эта величина изменяется в определен-

ном месте пространства (правая часть нашего уравнения), пропорционально „кривизне“ в данной точке (выражение в скобках в левой части); [1] например ускорение, с которым точка оттянутой струны стремится к своему положению равновесия пропорционально кривизне струны в этой точке, и т. д. Вычисление показывает далее, что множитель пропорциональности u^2 есть не что иное как скорость, с которой распространяется волна — напр. вдоль струны. В уравнении (16) мы пользуемся обычным сокращенным обозначением, согласно которому сумма вторых производных функций ψ по трем координатам обозначается символом $\Delta\psi$. Эту сумму называют „оператором Лапласа“ (не смешивать с градиентом, который представляет собою сумму квадратов первых производных).

При рассмотрении обычных механических колебательных процессов обычно к уравнению (16) присоединяют еще второе уравнение:

$$\frac{d^2\psi}{dt^2} = -4\pi^2\nu^2\psi, \qquad (17)$$

где ν означает частоту колебания. (Это уравнение говорит, что ускорение пропорционально отклонению от положения равновесия; тем самым колебание трактуется как гармоническое, что для колебаний с малой амплитудой, вообще говоря, позволительно.)

Комбинируя (16) и (17), получаем:

$$\Delta\psi + \frac{4\pi^2\nu^2}{u^2}\psi = \Delta\psi + \frac{4\pi^2}{\lambda^2}\psi = \Delta\psi + k^2\psi = 0 \quad . \quad . \quad (18)$$

Здесь λ есть длина волны $\left(=\frac{u}{\nu}\right)$, и $k^2 = \frac{4\pi^2}{\lambda^2}$ введено для сокращения (k^2, а не k — для того чтобы, как это обычно делается, показать, что коэффициент при ψ существенно положителен).

В следующей части статьи мы подробнее займемся применением уравнений (16), (17) и (18) к специальным меха-

[1] Как известно, первая производная измеряет вообще наклон; вторая производная—кривизну кривой или поверхности.

ническим проблемам. Сейчас же вернемся к волновому распространению функции W, которое мы частично — но только частично — описали уравнением (13). Мы допустим, что колебание, лежащее в основе этого волнового процесса, также подчинено законам (16) и (17) и что для него таким образом справедливо также уравнение (18). Скорость распространения волны u известна из уравнения (15); чтобы освободить волновое уравнение от неизвестных, нужно еще сделать допущение относительно частоты ν. Мы положим

$$\nu = \frac{E}{h}. \tag{19}$$

Это допущение не является ни неизбежным, ни самоочевидным. Наоборот, оно является оригинальной и в высшей степени смелой гипотезой, которой мы обязаны де Бройлю. Согласно этой гипотезе, всякому движению с энергией E — также и простому поступательному движению электрона — отвечает частота ν, определяемая соотношением $E = h\nu$.

Подставляя в (18) u из (15) и ν из (19), получим основное уравнение волновой механики:

$$\Delta\psi + \frac{8\pi^2 m}{h^2}(E - V)\psi = 0. \tag{20}$$

Это и есть волновое уравнение де Бройля и Шрёдингера. В этой форме мы будем им пользоваться во всем дальнейшем изложении. Эта форма достаточна для вывода основных черт строения атома, например для общего объяснения структуры спектра водорода (без тонкой структуры), далее для объяснения опытов дифракции электронных лучей (Дэвиссон и Джермер, Г. П. Томсон). Коротко говоря, эта формула достаточна для введения в мир волновой механики. Однако нет сомнения в том, что она не может быть полной и окончательной формулой этой теории, так как она по меньшей мере в двух отношениях нуждается в дополнении.

Первый явный недостаток формулы (20) заключается в том, что она основана на классической Ньютоновской, а не на релятивистической механике. Таким образом мы должны

ожидать, что формула эта окажется справедливой только для движений со скоростью незначительной по сравнению со скоростью света; она должна представлять собой только предельную форму общего релятивистического уравнения для случая небольших скоростей. Подобная обобщенная релятивистическая формула была действительно выведена де Бройлем. Первоначальное развитие теории спектров заставляло предположить, что именно такое релятивистическое обобщение волнового уравнения позволит включить в теорию объяснение тонкой структуры спектра водорода. Однако новейшее развитие спектральных теорий показало, что простая замена уравнения (20) его релятивистическим обобщением не может быть достаточной для этой цели; необходимым представляется введение в теорию, в той или иной форме, представления о вращающемся вокруг собственной оси электроне. В этом направлении за последнее время уже сделаны значительные успехи; однако мы не можем здесь заниматься рассмотрением этого обобщенного волнового уравнения.

Второй недостаток формулы (20) заключается в ее связи с уравнением (13). Характерной чертой этого последнего уравнения является то, что в нем величина градиента функции W приравнена к определенной функции координат. Эта черта уравнения позволила вывести из него представление о „волнах", флюктуирующих в пространстве. Между тем это соотношение могло быть получено только потому, что система, которой мы воспользовались в качестве примера — а именно одна частица в центральном силовом поле — обладала кинетической энергией, равной сумме квадратов импульсов (умноженных на постоянную). Но мы легко можем себе представить системы, не обладающие этим свойством. В качестве простого примера можно указать две частицы различной массы, движущиеся в силовом поле или твердое вращающееся тело неправильной формы. Если бы мы написали для первой из упомянутых систем кинетическую энергию и импульсы, то мы бы получили

$$T = \frac{m_1}{2}(\dot{x}_1^2 + \dot{y}_1^2 + \dot{z}_1^2) + \frac{m_2}{2}(\dot{x}_2^2 + \dot{y}_2^2 + \dot{z}_2^2)$$

и $p_{x_1} = m_1 \dot{x}_1$, $p_{x_2} = m_2 \dot{x}_2$ и т. д.; и только для $m_1 = m_2$ получается $T = \text{const} \times \Sigma p_i^2$. Поэтому, если бы мы взяли в качестве примера механическую систему более общего характера, то мы получили бы вместо (13) другое уравнение, которое нельзя было бы интерпретировать как выражение волны в трехмерном эвклидовом пространстве. Представление о волне, связанной с движением системы, не могло бы возникнуть, и путь к уравнению (20) был бы закрыт. Преодоление этого затруднения оказывается возможным с помощью метода, который можно назвать „неэвклидовой геометрии". Эта математическая теория дает формулы общего характера, которые могут быть применены к любой системе, с каким угодно выражением для кинетической энергии. В случае одной единственной частицы в силовом поле эти уравнения оказываются тождественными с нашими уравнениями (13) и (20). В словоупотреблении неэвклидовой геометрии продолжают фигурировать понятия волны, скорости распространения ее, градиента и лапласовского оператора. Я не знаю однако, имеет ли смысл оперировать с этими обобщенными понятиями для тех, кто недостаточно знаком со всей этой областью. Поэтому я ограничусь указанием, что неэвклидова геометрия дает общее волновое уравнение, которое содержит (20) в качестве частного случая.[1] Это общее уравнение уже успело оправдать себя при применении к некоторым моделям атомов и молекул, как например к твердому ротатору, который играет столь важную роль в теории полосатых спектров.

Однако вопрос о том, что же такое в конце концов эти „волны", становится при переходе от эвклидова пространства к отвлеченному конфигурационному пространству еще более темным и непонятным.

---

[1] Если кинетическая энергия системы дана в виде квадратичной формы скоростей $T = \Sigma_i \Sigma_j Q_{ij} \dot{q}_i \dot{q}_j$ и Δ — означает оператор Лапласа в неэвклидовом пространстве конфигурации с метрикой $ds^2 = \Sigma\Sigma Q_{ij} dq_i dq_j$, то общее волновое уравнение де Бройля и Шрёдингера имеет вид: $h^2 \Delta\psi + 8\pi^2 (E - V)\psi = 0$.

Нам остается сделать еще один шаг, чтобы понять, каким образом волновая механика может привести к вычислению энергий стационарных состояний атома.

Широко известно, что в теле, способном служить средой для распространения волн и в то же время подверженном тем или иным ограничениям в своем движении, возникают так называемые стоячие волны. Воздух в замкнутом сосуде струна, зажатая на концах, мембрана, закрепленная по периферии, могут служить примерами таких тел. Аналогично ведет себя электричество в настроенной на определенную частоту цепи, и т. д. В каждой из подобных систем при надлежащих условиях возникают стоячие волны, состоящие из характерного чередования узлов и пучностей. Для возникновения их необходимо, чтобы частота возбуждающего стоячие волны колебания соответствовала „собственной" или „резонансной" частоте данной системы. Каждой такой резонансной частоте отвечает особая картина распределения узлов и пучностей. Как только резонирующая система подверглась воздействию внешней волны надлежащей частоты, в ней немедленно возникает соответствующая стоячая волна; и если бы не внешнее и внутреннее трение, то, раз возникнув, стоячая волна должна была бы сохранить свое существование навеки. Если на резонатор действует внешняя волна с частотой не соответствующей собственному периоду резонатора, то возникает движение гораздо более сложного характера. Методы вычисления собственных частот различных систем и соответствующих им стоячих волн составляют существенную область теоретической акустики.

Возникает вопрос: не могут ли стационарные состояния естественных атомных систем быть рассматриваемы как стоячие волны, а соответствующие значения энергии атома—как произведения из частот собственных колебаний атома на постоянную Планка h Не исключено ли, что проблемы атомной теории могут быть разрешены с помощью методов аналогичных тем, которые применяются при исследовании макроскопических вибраторов, как-то: акустических инструментов или колебательных электрических систем? Эта идея была разработана Э. Шрёдингером в ряде статей начиная с 1926 г.

Примеры стационарных колебательных состояний.

Для иллюстрации законов образования стоячих волн я приведу три примера: натянутую струну, мембрану и шар жидкости в твердой оболочке. Первый пример является наиболее простым и широко известным; все изложения теории колебаний всегда начинаются с исследования рояльной и скрипичной струны. С физической точки зрения проблема струны характеризуется как проблема одного измерения (расстояние вдоль струны), с математической точки зрения — как проблема с двумя переменными (упомянутое расстояние и время). Второй пример — натянутая мембрана — хорошо знаком тем, кому приходилось иметь дело с телефоном. Однако мембраны, применяемые на практике, по большей части не вполне соответствуют рассматриваемому нами идеальному случаю, так как они слишком толсты. Идеально-тонкая мембрана представляет собой пример колебательной системы с двумя измерениями и тремя переменными величинами. Пример мембраны покажет нам, как существенно во многих случаях надлежащий выбор координат, и мы увидим, что́ происходит, если одна из избранных координат оказывается циклической, т. е. углом, который практически возвращается к своему первоначальному значению при каждом увеличении его на целое кратное 2π. В проблеме мембраны мы встретимся с функциями, не пользующимися такой широкой известностью как простые синусы и косинусы, которыми можно обойтись при разрешении проблемы натянутой струны. Третий выбранный нами пример — жидкий шар в твердом сосуде — менее часто встречается на практике. Он должен помочь нам перенести результаты, найденные при изучении струны и мембраны, на проблемы трех измерений и четырех переменных. Эта проблема послужит последней ступенью для перехода к волновым явлениям, изобретенным де Бройлем и Шрёдингером для иллюстрации поведения атомов. Дабы перейти к этим последним, достаточно будет вообразить себе струны и жидкости не с постоянной плотностью и эластичностью, а со свойствами особым образом меняющимися от точки к точке.

Натянутая струна. Представим себе бесконечно длинную натянутую струну, направление которой совпадает с осью x выбранной системы координат. Обозначим натяжение струны буквой T, ее линейную плотность (т. е. массу, приходящуюся на 1 *см* длины) буквой ρ. Чтобы вывести дифференциальное уравнение движения струны, представим себе ее состоящей из ряда прямолинейных отрезков (рис. 1). Когда струна отклонена от своего положения равновесия, отдельные прямолинейные отрезки уже не лежат больше на одной линии, но, как показывает рис. 1, образуют определенные углы между собой. На границе двух отрезков последние действуют друг на друга с силой, определяемой напряжением T. До тех пор пока струна прямолинейна, силы, которым подвергается каждый отрезок со стороны своих соседей с той и с другой стороны, равны по величине и противоположны по направлению; их результирующая равна нулю, каждый отрезок находится в равновесии. Но если струна оттянута, как на рис. 1 (причем предполагается, что струна остается в плоскости xy), то упомянутые силы хотя и будут попрежнему равны по величине, но по направлению уже не будут противоположны. Они имеют неравные компоненты по оси y; последние и дают отличную от нуля силу, которая влечет отрезок к его нормальному положению. Точнее говоря, происходит следующее: если обозначить угол отрезка AB с осью x через θ (рис. 1), угол отрезка CD с тою же осью — через $\theta + d\theta$, тогда силы, действующие на твердый отрезок BC, будут иметь компоненты:

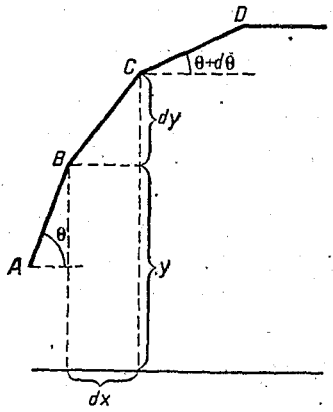

Рис. 1.

$$X_1 = -T\cos\theta; \qquad Y_1 = -T\sin\theta$$
$$X_2 = -T\cos(\theta + d\theta); \qquad Y_2 = -T\sin(\theta + d\theta).$$

Их равнодействующие будут:

$$X = X_1 + X_2 = T\,[\cos(\theta + d\theta) - \cos\theta]$$
$$Y = Y_1 + Y_2 = T\,[\sin(\theta + d\theta) - \sin\theta]. \qquad (21)$$

Если, кроме того, сам угол θ мал, т. е. если отклонение от положения равновесия незначительно, то, во-первых, компонента X результирующей силы исчезающе мала по сравнению с компонентой Y, — в этом легко убедиться из рассмотрения хода кривых sin и cos вблизи от нуля, — во-вторых, компонента Y может быть представлена:

$$Y = T[\operatorname{tg}(\theta + d\theta) - \operatorname{tg}\theta], \tag{21a}$$

так как для малых θ $\sin\theta = \operatorname{tg}\theta$. Далее $\operatorname{tg}\theta$ можно отождествить с наклоном BC относительно оси x, т. е. с $\frac{dy}{dx}$. Получаем:

$$Y = T\frac{\operatorname{tg}(\theta + d\theta) - \operatorname{tg}\theta}{dx}dx = T\frac{d(\operatorname{tg}\theta)}{dx}dx = T\frac{d^2y}{dx^2}dx.$$

Приравнивая силу к произведению массы на ускорение, мы получаем:

$$\rho \cdot \frac{d^2y}{dt^2} = T\frac{d^2y}{dx^2}. \tag{22}$$

Ниже мы покажем, что это уравнение, если положить $\frac{T}{\rho} = v^2$, представляет собою уравнение (16) предыдущего параграфа, выведенное для данного частного случая системы одного измерения. Мы видим, что это уравнение строго применимо к предельному случаю малых деформаций. Но элементарная теория колебаний занимается именно этими малыми колебаниями.

Обозначая дифференцирование по времени точками, а дифференцирование по пространственным координатам черточками, мы можем написать (22) в форме:

$$\ddot{y} = \frac{T}{\rho}y''. \tag{23}$$

Уравнение (23), выражающее собой факт линейной зависимости второй производной смещения по t от второй производной той же величины по x, представляет собой простейшее из волновых уравнений.

Мы называем это уравнение „волновым“, потому что оно может (но не должно) представлять волну. Под волной

мы понимаем деформацию струны — кривую или „нечто" иное, что перемещается вдоль бесконечной струны с постоянной скоростью.

Чтобы иллюстрировать это возможное содержание уравнения (23), представим себе, что в момент $t=0$ струна смещена таким образом, что она образует собой синусоидальную кривую с уравнением:

$$y = A \sin mx \qquad (t=0). \tag{24}$$

Предположим далее, что все точки струны движутся в этот момент со скоростью

$$\dot{y} = n A \cos mx \qquad (t=0) \tag{25}$$

параллельно оси y.

В какой-либо позднейший момент t конфигурация и движение струны изображаются уравнениями:

$$y = A \sin (nt + mx); \qquad y = n A \cos (nt + mx), \tag{26}$$

так как уравнения эти удовлетворяют общему дифференциальному уравнению (23) и начальным условиям, выраженным в уравнениях (24) и (25). Для того чтобы начальные условия были удовлетворены, необходимо только, чтобы между постоянными n и m, с одной стороны, и константами струны T и ρ с другой стороны, существовала зависимость, выражаемая формулой:

$$\frac{m}{n} = \sqrt{\frac{T}{\rho}}. \tag{27}$$

Если условие (27) удовлетворено, то состояние струны на все времена остается выраженным уравнением (26).

Рассматривая ближе это уравнение, мы замечаем, что согласно ему те значения смещения y и скорости $\dot{y}$, которые в данный момент существовали в какой-либо точке струны x_0, могут быть по истечении времени t найдены в точке x_1, отстоящей от x_0 на $x_1 - x_0 = -\left(\frac{n}{m}\right) t$. Другими словами, эти значения движутся вдоль струны с постоянной скоростью. Вся конфигурация струны, ее синусоидальная форма и распределение скоростей вдоль нее остаются неизменными и только скользят вдоль струны в направлении

уменьшающихся x. Форма струны передается в этом направлении наподобие волны, и отношение $\frac{n}{m}$ измеряет скорость движения этой волны:

$$u = \frac{n}{m} = \sqrt{\frac{T}{\rho}}. \tag{28}$$

Этот вывод оправдывает наименование уравнения (23) „волновым“ и коэффициента $\frac{T}{\rho}$ в этом уравнении — квадратом скорости волны.

Читатель наверное обратил внимание на то обстоятельство, что полученный нами результат мог быть достигнут только с помощью весьма узких специальных условий. Мы предположили струну бесконечно длинной, мы положили начальное смещение произведенным по синусоидальной кривой. Так же строго мы предписали и распределение поперечных скоростей вдоль струны в начальный момент. Если бы мы изменили эти последние условия, мы пришли бы к совсем иным результатам. Если бы мы, например, предположили, что в момент $t=0$ струна имеет синусоидальную форму и все точки ее находятся в покое, то дальнейшее движение струны не изображалось бы более уравнением (26). Мы вынуждены были бы прибегнуть в этом случае к общему решению дифференциального уравнения (23):

$$y = C \sin(nt + mx) + D \sin(nt - mx) \tag{29}$$

и выбрать постоянные C и D таким образом, чтобы они удовлетворяли избранным нами начальным условиям:

$$y = A \sin mx, \quad y = 0 \quad (\text{при } t = 0). \tag{30}$$

С этой целью мы полагаем:

$$C = D = \frac{1}{2}A$$

и получаем:

$$y = A \sin nt \cos mx. \tag{31}$$

Уравнение (30) изображает не волну, непрерывно движущуюся вдоль струны, а стоячее колебание наподобие тех,

которые возникают в надлежащим образом возбужденной скрипичной струне или в трубках Кундта. С первого взгляда вряд ли можно угадать, что эти стоячие волны являются результатом взаимного наложения двух волн, движущихся вдоль струны навстречу друг другу со скоростью $u = \frac{n}{m} = \sqrt{\frac{T}{\rho}}$. Однако исследование показывает, что стоячая волна всегда эквивалентна двум движущимся навстречу друг другу волнам. В уравнении (31) коэффициенты n и m связаны между собой через посредство характерной для данной струны скорости распространения волн, и уравнение это может быть переписано в виде:

$$y = A \sin u m t \cos m x, \qquad u = \sqrt{\frac{T}{\rho}}. \tag{32}$$

В то время как натяжение и плотность струны при данном m определяют однозначно n (или наоборот), ничто сказанное до сих пор не накладывает каких-либо ограничений на возможные значения коэффициентов n или m. Бесконечно длинная струна может давать колебания с любой длиной волны Такая струна способна также одновременно принимать участие в любом количестве колебаний различных длин волн с любыми соотношениями между их амплитудами и фазами. На этом основано наше право предписывать какие угодно произвольные начальные условия касательно формы и скорости движения струны — разумеется, поскольку условия эти не противоречат основным требованиям непрерывности и конечности во всех точках струны. Для того чтобы удовлетворить требованию, согласно которому форма струны в начальный момент должна определяться любой произвольной функцией $f(x)$, а распределение поперечных скоростей ее движения — другой, тоже произвольной функцией $g(x)$, достаточно развернуть функции f и g в ряды Фурье (или, в случае надобности, в интеграл Фурье); каждый член в этом разложении будет соответствовать отдельному волновому уравнению типа (29) с особым значением m и со значениями C и D, определяемыми начальным состоянием струны. Конфигурация струны

в любой более поздний момент времени будет предопределена суммой всех этих волновых уравнений. Внешнее зрелище не будет соответствовать в этом случае ни неизменной волне, движущейся с постоянной скоростью вдоль струны, ни постоянному распределению узлов и пучностей. Все бросающиеся обычно в глаза характерные особенности волнового движения могут быть при этом замаскированы; и тем не менее математический анализ показывает, что вся сложная и изменчивая картина струны может быть истолкована как сумма синусоидальных волн, беспрерывно бегущих в обоих направлениях с одной и той же постоянной скоростью.

Положение изменяется однако, как только мы вводим какие-либо пограничные условия; при введении таковых струна оказывается в состоянии принимать участие только в колебаниях определенной частоты.

В качестве наиболее обычных и элементарных пограничных условий, предположим, что струна зажата в точках $x=0$ и $x=L$, и будем заниматься только движением струны на участке, заключенном между этими двумя точками.

Для подготовки дальнейших выводов необходимо вернуться к основному уравнению и решить его сначала. Это уравнение гласит:

$$\ddot{y}=u^2y'', \tag{33}$$

где u обозначает скорость распространения синусоидальной волны вдоль бесконечной струны. Мы пробуем найти решение, которое имело бы форму произведения функции, зависящей только от аргумента x, на функцию, зависящую только от t:

$$y=g(t)\cdot f(x). \tag{34}$$

Из дифференциального уравнения (33) вытекает, что функции f и g должны удовлетворять следующему условию:

$$\frac{f''}{f}=\frac{\ddot{g}}{u^2g}. \tag{35}$$

Так как левая часть уравнения (35) не зависит от t, а правая не зависит от x, то они могут быть равными между собой только при условии, что каждая [в отдельности является

постоянной. Постоянную мы обозначим символом—m^2 (такое обозначение выбрано потому, что — как мы увидим ниже — определенное подобным образом m тождественно с m, встретившимся нам на стр. 460). Мы можем теперь вместо (35) написать:

$$\frac{f''}{f} = -m^2 \tag{35a}$$

и

$$\frac{\ddot{g}}{u^2 g} = -m^2. \tag{35b}$$

Таким образом мы разбили наше первоначальное уравнение (33) на два уравнения, из которых каждое содержит только одну неизвестную. Разрешение их поэтому затруднений не представляет и общие решения имеют вид:

$$\begin{aligned} f(x) &= A\cos mx + B\sin mx, \\ g(t) &= C\cos mut + D\sin mut. \end{aligned} \tag{36}$$

Величина m до сих пор еще ничем не ограничена.

Теперь мы переходим к пограничным условиям. Они формулируются следующим образом:

$$f(0) = f(L) = 0\,. \tag{37}$$

Мы подошли теперь на простейшем примере вплотную к наиболее характерной проблеме акустики, которая одновременно является решающей и для атомной теории в той ее форме, которую она приобретает в волновой механике, — именно к проблеме „характеристических чисел“.

Для того чтобы сделать функцию f соответствующей пограничным условиям (37), мы очевидно должны положить $A = 0$ и $\sin m L = 0$ [в этом случае $f(x) = 0$ при $x = 0$ и $x = L$]. С этою целью мы должны выбрать для m значения:

$$m = \frac{k\pi}{L} \qquad k = 1,\ 2,\ 3,\ 4... \tag{38}$$

Итак, введение пограничных условий повело к ограничению возможных значений коэффициента m определенным рядом чисел. Этим самым ограничивается и число возможных значений длины волны λ.

Дозволенные при данных пограничных условиях значения m называются „характеристическими числами“ (по-немецки Eigenwerte). Каждому „характеристическому числу“ соответствует отдельное значение длины волны и частоты колебаний $\nu = \frac{mu}{2\pi}$, так называемая „собственная частота“ струны (Eigenfrequenz).

Далее, каждому характеристическому числу отвечает особое решение дифференциального уравнения — особая „фундаментальная функция“ (Eigenfunktion). В нашем примере закрепленной на концах струны фундаментальные функции, соответствующие характеристическим числам $m = \frac{K\pi}{L}$, суть:

$$y_k = \sin\frac{k\pi}{L}x\left(C_k\cos\frac{k\pi u}{L}t + D_k\sin\frac{k\pi u}{L}t\right). \qquad (39)$$

Каждая фундаментальная функция изображает в этом случае синусоидальное стоячее колебание, с узлами по концам струны и в $(k-1)$ равностоящих друг от друга точках в середине ее. Такого рода колебание может быть без труда реализировано на практике с помощью струны от скрипки, если k не слишком велико. Постоянные C и D определяют собой амплитуду колебания и фазу его в любой данный момент.

Разумеется, движение струны на практике отнюдь не должно обязательно соответствовать одной единственной фундаментальной функции. Наоборот, струна может одновременно участвовать в каком угодно числе различных собственных колебаний, каждое с особым значением постоянных C_k и D_k. Любое число фундаментальных функций (с различными дозволенными значениями m, т. е. различными целыми кратными k) может сосуществовать одновременно. Действительное смещение струны будет в любой данный момент определяться суммой значений всех этих фундаментальных функций. Для того чтобы движение струны оказалось ограниченным одной единственной фундаментальной функцией, необходимо с бесконечной точностью урегулировать начальные смещения и скорости струны. С другой стороны, при любом произвольном

выборе начальных условий дальнейшее движение струны будет представлять собой суперпозицию различных собственных колебаний, с характерными для данных начальных условий значениями постоянных C_k и D_k, которые при знании этих условий могут быть вычислены. Это вычисление аналогично вычислению в механике материальной точки траектории, по которой будет двигаться частица, чье положение и скорость в момент $t = 0$ известны. (Применение квантовых условий к орбитам частицы соответствует определению собственных частот; здесь лежит мост между атомными моделями с электронными орбитами и атомными моделями волновой механики.) Как в акустике, так и в волновой механике процесс определения амплитуд и фаз большей частью гораздо сложнее, чем процесс вычисления собственных частот; к счастью, он часто и менее существен, хотя во многих случаях необходим.

Пример натянутой мембраны. Дифференциальное уравнение натянутой мембраны имеет форму:

$$\Delta z = \frac{d^2z}{dx^2} + \frac{d^2z}{dy^2} = \frac{1}{u^2} \cdot \frac{d^2z}{dt^2}. \tag{40}$$

При этом предполагается, что мембрана расположена в плоскости xy и что z обозначает смещение отдельных точек мембраны из их положений равновесия в этой плоскости в направлении перпендикулярном к ней. Буква u обозначает скорость распространения синусоидальной волны в бесконечно-протяженной мембране, с натяжением T, одинаковым во всех точках мембраны, и с постоянной поверхностной плотностью ρ. Эта скорость определяется из уравнения:

$$u^2 = \frac{T}{\rho}, \tag{41}$$

получаемого путем естественного обобщения уравнения (28). Действительное движение ограниченной мембраны может быть очень сложным, но его всегда можно разложить на некоторое число синусоидальных волн, движущихся в противоположных направлениях.

Символ Δ обозначает дифференциальный оператор Лапласа; в прямоугольных координатах он имеет вид

$\frac{d^2}{dx^2}$ (для одного измерения), $\frac{d^2}{dx^2}+\frac{d^2}{dy^2}$ (для двух) или $\frac{d^2}{dx^2}+\frac{d^2}{dy^2}+\frac{d^2}{dz^2}$ (для трех измерений). При пользовании другими системами координат, Лапласовский оператор, разумеется, приобретает другую форму. В системах с двумя и большим числом измерений проблема формулировки пограничных условий неотделима от проблемы выбора координат. Если мембрана имеет квадратную форму и зажата по краям, то мы должны выбрать прямоугольные координаты; если мембрана—круглая и также закреплена по краю, то это условие можно просто формулировать только в полярных координатах. Первая из этих двух проблем (квадратная мембрана) отличается чрезвычайной простотой; читатель может сам легко разрешить ее по способу, аналогичному примененному нами при исследовании струны, и результаты, которые он при этом получит, будут также являться простым обобщением результатов, полученных в предыдущем параграфе. Больший интерес представляет для нас проблема кругообразной мембраны, к которой мы теперь и обратимся. При исследовании таковой мы должны воспользоваться полярными координатами, причем центр мембраны должен, разумеется, служить началом координат. Лапласовский оператор имеет в полярных координатах на плоскости следующий вид:

$$\Delta=\frac{d^2}{dr^2}+\frac{1}{r}\frac{d}{dr}+\frac{1}{r^2}\frac{d^2}{d\theta^2}. \tag{42}$$

Мы вводим это выражение Лапласовского оператора в основное уравнение (40) и получаем:

$$\frac{d^2z}{dr^2}+\frac{1}{r}\cdot\frac{dz}{dr}+\frac{1}{r^2}\cdot\frac{d^2z}{d\theta^2}=\frac{1}{u^2}\cdot\frac{d^2z}{dt^2}. \tag{42a}$$

Решение этого дифференциального уравнения мы ищем в форме произведения функции $f(r)$, зависящей только от радиуса, на функцию $F(\theta)$, зависящую только от θ, и на функцию $g(t)$, зависящую только от t. Как и в предыдущем параграфе, мы легко замечаем, что каждая из этих трех функций определяется самостоятельным дифференциальным

уравнением, на которые мы можем разбить общее уравнение (40). Путь, который ведет к этому заключению, совершенно аналогичен тому, которым мы пользовались при исследовании натянутой струны. Прежде всего, вставляя $z = f(r) \cdot F(\vartheta) \cdot g(t)$ в уравнение (42), мы имеем:

$$\frac{1}{f} \cdot \frac{d^2f}{dr^2} + \frac{1}{rf} \frac{df}{dr} + \frac{1}{r^2F} \frac{d^2F}{d\vartheta^2} = \frac{1}{u^2g} \cdot \frac{d^2g}{dt^2}. \tag{43}$$

Так как левая часть этого уравнения не зависит от t, а правая — от r и ϑ, то они могут быть равными друг другу только при условии, если каждый из них равняется постоянной. Эту постоянную мы обозначаем, как и в предыдущем параграфе, через $-m^2$ и получаем таким образом вместо уравнения (42a) два независимых дифференциальных уравнения:

$$\frac{1}{f} \cdot \frac{d^2f}{dr^2} + \frac{1}{rf} \cdot \frac{df}{dr} + \frac{1}{r^2F} \cdot \frac{d^2F}{d\vartheta^2} = -m^2 \tag{43a}$$

$$\frac{1}{u^2g} \cdot \frac{d^2g}{dt^2} = -m^2. \tag{43}$$

Первое уравнение содержит только пространственные координаты r и ϑ, второе — только время t. Это последнее уравнение имеет совершенно ту же форму, что и уравнение натянутой струны (35b), и мы можем теперь просто переписать решение (36b) этого уравнения:

$$g(t) = A \cos mut + B \sin mut. \tag{44}$$

Результат, полученный нами при рассмотрении натянутой между двумя точками струны, заставляет нас заранее ожидать, что для m возможны только определенные значения — характеристические числа проблемы, которые зависят от пограничных условий. Это так и есть. Но прежде чем определять их, мы должны заняться дифференциальным уравнением (43a) для пространственных координат r и ϑ.

Решение уравнения (43a) производится по тому же методу разделения. Если мы обе части уравнения (43a) умножим на r^2, то мы получим сумму трех членов, которые зависят только от r и члена, зависящего только от ϑ; эта сумма должна быть равна нулю. Последнее возможно лишь в том

случае, когда сумма трех членов, зависящих от r, равна некоторой постоянной, и член, зависящий от θ, равен той же постоянной. Мы обозначим эту новую постоянную через λ^2. Оба уравнения, на которые распадается (43a), будут тогда:

$$\frac{r^2}{f}\cdot\frac{d^2f}{dr^2}+\frac{r}{f}\cdot\frac{df}{dr}+m^2r^2=\lambda^2. \tag{45a}$$

$$-\frac{1}{F}\cdot\frac{d^2F}{d\theta^2}=\lambda^2. \tag{45b}$$

Мы разрешаем сначала (45b). Это уравнение совершенно аналогично уже решенным уравнениям (35a) и (43b), и его общее решение будет:

$$F(\theta)=C\cos\lambda\theta+D\sin\lambda\theta. \tag{46}$$

Коэффициент λ кажется с первого взгляда ничем не ограниченным. Но в действительности коэффициент этот несет известные ограничения в самом себе: ибо координата θ носит циклический характер, как географическая долгота. При изменении θ на целое кратное 2π мы возвращаемся на прежнее место, и функция $F(\theta)$ должна вернуться к своему первоначальному значению. Для удовлетворения этого условия необходимо, чтобы λ имело одно из значений ряда:

$$\lambda=0,\ 1,\ 2,\ 3\ldots \tag{46a}$$

Это суть характеристические числа λ, и функции $F(\theta)$, соответствующие каждому отдельному возможному значению коэффициента λ, являются фундаментальными функциями уравнения (45). В исследуемом случае мы получили характеристические значения коэффициента и фундаментальные функции не на основании каких-либо пограничных условий, а только на основании того факта, что координата носит циклический характер. Такого рода случаи встречаются и в волновой механике.

Мы переходим к третьей и последней части проблемы — к определению функции $f(r)$. Эта функция определяется уравнением:

$$\frac{d^2f}{dr^2}+\frac{1}{r}\frac{df}{dr}+\left(m^2-\frac{\lambda^2}{r^2}\right)f=0; \tag{47}$$

для каждого разрешенного значения λ мы имеем особое уравнение (47). В предыдущем отделе мы имели аналогичное уравнение (35); решением этого уравнения явилась синусная функция от mx. Уравнение (47) также ведет к функции аргумента mr; но это функция более сложная, чем синус, а именно—так называемая Бесселева функция. Значениям 0, 1, 2, 3... коэффициента λ соответствуют так называемые Бесселевы функции нулевого, 1, 2, 3-го и т. д. порядка. Мы обозначим их символами $J_0(mr)$, $J_1(mr)$, $J_2(mr)$ и т. д.

Бесселевы функции аналогичны синусам в том отношении, что они также осциллируют между положительными и отрицательными значениями при возрастании аргумента r от 0 до бесконечности. Для бесчисленного множества дискретных значений аргумента Бесселева функция проходит через 0. В отличие от нулевых точек функции $\sin mr$, нулевые точки функций $J(mr)$ не лежат на равном расстоянии друг от друга. Соответствующие значения аргумента r могут быть найдены в таблицах функций; мы обозначим их через b^1, b^2, b^3, в порядке возрастающей величины. Верхние числа обозначают, разумеется, не степени, а порядковые номера; это обозначение принято для того, чтобы сохранить внизу свободное место для индекса, отличающего друг от друга Бесселевы функции различного порядка.

Итак, решение уравнения (40) имеет вид:

$$z = J_\lambda(mz)\,(C\cos\lambda\theta + D\sin\lambda\theta)\,(A\cos mut + B\sin mut). \quad (48)$$

Это уравнение изображает стоячее колебание бесконечно-протяженной мембраны, при котором λ линий, пересекающихся в начале координат, остаются неподвижными (узловые линии). Далее, неподвижным остается бесчисленное количество концентрических узловых кругов, с центром в начале координат. Части мембраны, расположенные между узловыми линиями и узловыми кругами, являются пучностями; они колеблются с частотой $\frac{mu}{2\pi}$; λ узловых линий расположены под одинаковыми углами друг к другу; радиусы последовательных узловых кругов r_1, r_2, r_3, ... получаются путем деления на m нулевых мест b^1, b^2, b^3, ... Бесселевой функции порядка λ.

В чем выражается изменение характера колебания, вызываемое закреплением мембраны по краям? Очевидно, что колебание, изображаемое уравнением (48), может быть реализовано в мембране с радиусом R, закрепленной неподвижно на периферии, только в том случае, если R совпадает с радиусом одного из узловых кругов. Итак, R должно равняться $\frac{b_\lambda^i}{m}$. Правильнее будет выразиться наоборот: стоячее колебание (48) возможно в закрепленной по окружности мембране только в том случае, если коэффициент m удовлетворяет одному из уравнений:

$$m = \frac{b_\lambda^1}{R} \text{ или } \frac{b_\lambda^2}{R}, \text{ или } \frac{b_\lambda^3}{R} \text{ и т. д.} \qquad (49)$$

Эти уравнения определяют характеристические числа параметра m в дифференциальном уравнении натянутой мембраны. Имеется двойное бесконечное количество этих характеристических чисел: каждому из бесконечного числа характеристических чисел λ соответствует бесконечное количество характеристических чисел m. Каждому характеристическому числу m отвечает особая собственная частота мембраны и особая фундаментальная функция — именно функция (48) с соответствующим значением m, взятым из (49).

Постоянные A, B, C и D в фундаментальных функциях определяют собой амплитуды колебаний, фазу их в каждый данный момент, а также направление узловых линий по отношению к избранному направлению $\theta = 0$. Произвольное количество собственных колебаний может существовать в одно время. Действительное движение мембраны будет определяться взаимным наложением этих фундаментальных функций.

Едва ли нужно подчеркивать, что все эти результаты, совершенно так же как и результаты, полученные для натянутой струны, строго справедливы лишь в предельном случае бесконечно-малых колебаний, а для практических целей — с достаточной точностью справедливы в случае малых колебаний.

Пример жидкого шара. Среди элементарных колебательных систем жидкий шар, заключенный в твердую оболочку, представляет наибольшее сходство с моделью атома

водорода в волновой механике. Распределение стоячих волн в обоих случаях является почти совершенно тождественным.

Волновое уравнение (16), написанное в полярных координатах для пространства трех измерений, приобретает несколько пугающий своею сложностью вид:

$$\ddot{\psi} = u^2 \Delta \psi \equiv u^2 \frac{\operatorname{cosec} \theta}{r^2} \left[\frac{d}{dr}\left(r^2 \sin\theta \frac{d\psi}{dr} \right) + \right.$$
$$\left. + \frac{d}{d\varphi}\left(\operatorname{cosec}\theta \frac{d\psi}{d\varphi} \right) + \frac{d}{d\theta}\left(\sin\theta \frac{d\psi}{d\theta} \right) \right]. \qquad (50)$$

Величина ψ не может быть более рассматриваема в этом случае как смещение из положения равновесия, так как все три измерения уже использованы. Читатель может, если хочет, рассматривать для наглядности величину ψ, напр., как интенсивность сжатия или расширения среды в данной точке шара, по примеру звуковых волн. Быть может, лучшей подготовкой к волновой механике будет вообще не связывать с величиной ψ каких-либо наглядных представлений.

Мы пытаемся найти решение уравнения (50) по обычному способу, т. е. мы спрашиваем себя, нельзя ли решить его с помощью функции, представляющей собой произведение четырех самостоятельных функций: одной, зависящей только от времени t, другой — только от радиуса r, третьей — только от долготы φ и четвертой — только от угла θ:

$$\psi = g(t) \cdot f(r) \cdot \Phi(\varphi) \cdot \Theta(\theta).$$

Как и в предыдущих примерах, мы находим, что функция времени $g(t)$ должна иметь вид:

$$g(t) = A \cos mut + B \sin mut. \qquad (51)$$

Пограничные условия, как и раньше, ограничивают коэффициент m и частоту $\frac{mu}{2\pi}$ некоторыми разрешенными значениями. Остающиеся функции пространственных координат должны удовлетворять уравнениям:

$$\frac{1}{f}\left[\frac{d}{dr}\left(r^2 \frac{df}{dr} \right) + m^2 r^2 f \right] = -\frac{1}{Y} \operatorname{cosec}\theta \left[\frac{d}{d\varphi}\left(\operatorname{cosec}\theta \frac{dY}{d\varphi} \right) + \right.$$
$$\left. + \frac{d}{d\theta}\left(\sin\theta \frac{dY}{d\theta} \right) \right] = \lambda. \qquad (52)$$

где Y обозначает произведение Θ на Φ, а λ — постоянную, которая с первого взгляда кажется произвольной, но в действительности ограничена определенными значениями, по совершенно той же причине что и в случае плоской мембраны. Ибо если географическая долгота изменяется на целое кратное 2π, а географическая широта на целое кратное π, то мы возвращаемся в прежнее место, и функция Y должна приобрести прежнее значение. Это возможно только при соблюдении условия:

$$\lambda = n(n+1) \qquad n = 0, 1, 2, 3... \qquad (53)$$

Эти значения λ суть характеристические числа дифференциального уравнения (52) для угловых переменных φ и ϑ.[1]

Отвечающие характеристическим числам (53) фундаментальные функции — решения второго из дифференциальных уравнений (52) — опять-таки функции нового типа, а именно так называемые „шаровые функции". Каждому значению n в (53) соответствует „шаровая функция n-го порядка". Такая функция состоит из $2n+1$ членов, причем каждый член содержит произвольно выбираемый коэффициент. Значения коэффициентов очевидно соответствуют различным начальным условиям, т. е. различным видам колебаний, которым отвечают одинаковые фундаментальные функции.

Какой вид имеет подобная шаровая функция? Каждый член ее является произведением функции синуса (или косинуса) φ на особую, так называемую Лежандрову функцию переменной ϑ.

---

[1] Это и последующие утверждения касательно функций Y_n могут быть доказаны путем изображения Y во втором из уравнений (52) в виде произведения функции переменной ϑ на функции переменной φ по способу, примененному уже пять или шесть раз в ходе изложения и ведущему к разбиению его на два самостоятельных уравнения. Значения параметра s в уравнении (54) суть характеристические числа второго из последних уравнений. Я считал нежелательным загромождать изложение постоянным повторением одних и тех же процессов решения уравнений. В данном случае к этому присоединяется еще то обстоятельство, что разделение Y на две функции в атомной модели, к построению которой мы стремимся, не является существенным. Читателю предоставляется, однако, самому заполнить этот пробел.

Если обозначить Лежандровы функции через $P_{n,s}$, то фундаментальная функция примет следующий вид:

$$Y_n(\theta,\varphi) = a_{n,o} P_{n,o} \cos\theta + \sum_{s=1}^{n} a_{n,s} \cos(s\varphi) \cdot P_{n,s}(\cos\theta) + \sum_{s=1}^{n} b_{n,s} \sin(s\varphi) \cdot P_{n,s}(\cos\theta). \quad (54)$$

Каждый член этого уравнения изображает особый возможный род колебания. Сумма всех членов изображает движение результирующее от суперпозиции этих колебаний.

Если мы выделим одно какое-либо определенное колебание, дав n некоторое определенное значение n_1, s некоторое определенное значение s_1 и в то же время предписав всем коэффициентам a и b в уравнении (54) исчезнуть, за исключением коэффициентов a_{n_1, s_1} и b_{n_1, s_1}, то мы найдем, что в этом случае функция $Y = \Phi(\varphi) \cdot \Theta(\theta)$, а следовательно и функция $\psi = g(t) \cdot f(r) \cdot Y(\varphi,\theta)$ будет принимать значение 0 для s_1 различных значений аргумента φ и для $n_1 - s_1$ различных значений аргумента θ. Мы воображаем себе шар, описанный вокруг начала координат; легко сообразить, что поверхность этого шара будет нести на себе s_1 меридиональных узловых линий и $n_1 - s_1$ узловых широтных кругов; вдоль этих линий функция будет раз навсегда являться равной нулю. Если мы от одной, окружающей начало координат, сферической поверхности перейдем к совокупности всех таких поверхностей, другими словами — ко всей толще шара, то мы увидим, что колебание жидкости в шаре определяется выбором двух целых чисел (я чуть было не сказал — квантовых чисел!), при этом вся масса жидкости состоит из отделений, разграниченных s_1 узловыми плоскостями, пересекающимися вдоль оси $\theta = 0°$, и $n_1 - s_1$ двойным узловым конусом, с вершиной в начале координат и с осью $\theta = 0$ в качестве высоты.

Мы оставили до сих пор без рассмотрения зависимость движения от радиуса r. Тесная аналогия со случаем натянутой мембраны делает разрешение этой проблемы весьма легким. Дифференциальное уравнение (52) для $f(r)$ напоми-

нает Бесселево уравнение (47) и имеет несколько похожее решение:

$$f(r) = \frac{1}{\sqrt{r}} J_{n+\frac{1}{2}}(mr). \tag{55}$$

Функция (55) имеет значения $f = 0$ для бесконечного ряда дискретных значений переменной r, которые мы обозначим, в порядке возрастающей величины, буквами $B_1, B_2, B_3 \ldots$ В этих же местах исчезает, разумеется, и функция ψ. В неограниченном пространственно шаре жидкости, r может иметь любое значение; этому будет соответствовать бесконечный ряд концентрических узловых сфер с радиусами $\frac{B^1}{m}, \frac{B^2}{m}, \frac{B^3}{m}, \ldots$ Если жидкость ограничена твердой шаровой поверхностью с радиусом R, то поверхность эта должна совпадать с одной из перечисленных узловых сфер. Это требование может быть удовлетворено только при помощи определенных дискретных собственных значений коэффициента m; эти значения определяются выражением $m = \frac{B^i}{R}$. Соответствующие частоты колебаний суть „собственные частоты" данного шара: они выражаются формулой $\nu = \frac{B^i u}{2\pi R}$. Фундаментальные функции колебания выражаются уравнением (55), в котором параметр m заменен последовательными дозволенными значениями его $\frac{B^i}{R}$.

Таким образом фундаментальные функции колебания жидкого шара суть произведения функции радиуса r, выраженной уравнением (55), с одним из разрешенных значений постоянной m, на функцию (54) углов φ и θ, с разрешенными значениями постоянных n и s, обусловленными циклическим характером этих переменных, и на функцию (51) времени t, с разрешенной частотой, определяемой условиями на границах шара. Каждая фундаментальная функция с определенными значениями m, n и s соответствует колебанию, при котором шар разделен на отделения s меридианных плоскостей, $(n-s)$ двойных конусов и определенным количеством концентрических сфер, вдоль каждой из которых жидкость постоянно находится в покое. Внутри каждого отделения жидкость беспрерывно колеблется с предписанной частотой.

Атомные модели волновой механики.

Случай „струны", вдоль которой скорость волны меняется или даже становится мнимой. До сих пор я пользовался примером натянутой струны, мембраны и жидкого шара для иллюстрации свойств дифференциального уравнения:

$$u^2\Delta\psi = \frac{d^2\psi}{dt^2}, \tag{56}$$

при условии, что u^2 есть положительная постоянная. В этих случаях u^2 имело значение частного от деления одной существенно-положительной величины — натяжения (или давления) — на другую, также существенно положительную, — плотность. Постоянная эта оказывалась далее имеющей физическое значение квадрата скорости распространения синусоидальных волн в данной среде. В некоторых проблемах волновой механики нам приходится встречаться с совершенно аналогичным уравнением. В ряде наиболее важных применений механики Шрёдингера, однако, приходится иметь дело с уравнениями типа (56), отличающимися от разобранных нами выше в том отношении, что коэффициент u^2 зависит от координат и иногда принимает даже отрицательные значения! Такого рода уравнения с точки зрения легкости разрешения могут не отличаться существенно от разобранных нами; но образ волн в упругой среде, выбранный нами для наглядного объяснения, в этом случае оказывается непригодным. В проблеме одного измерения, пока u^2 остается положительным, мы можем вообразить себе в качестве примера струну, плотность которой меняется от точки к точке. Когда u^2 проходит через нуль и становится отрицательным, скорость распространения волн в нашем примере становится мнимой. Формально ничто не мешает говорить о струне с мнимой скоростью распространения волн; но при этом слова лишены уже почти всякого физического значения. С другой стороны, мы не знаем иных слов, которые могли бы оживить в этом случае монотонную процессию уравнений.

Дифференциальные уравнения типа (56) с постоянными отрицательными значениями коэффициента n^2 относятся к числу легких. Ограничиваясь одним измерением, мы находим для решения этого уравнения в случае „струны" с постоянной мнимой скоростью распространения волн формулу:

$$\psi = (A \cos mUt + B \sin mUt)(Ce^{mx} + De^{-mx}), \qquad (57)$$

где U обозначает (реальный) квадратный корень из $-n^2$. С этой функцией обращаться гораздо менее удобно, чем с обычной синусной функцией, получаемой в аналогичном случае с положительной постоянной n^2. Так, например, в этом случае невозможно найти такие характеристические числа для коэффициента m, при которых функция раз навсегда равнялась бы нулю для определенных двух мест струны, т. е. выполнены были бы обычные пограничные условия. Вернее, вычисление дает только одно единственное значение $m = 0$, которое удовлетворяет этому условию, уничтожая раз навсегда функцию на всем протяжении струны. Далее, в этом случае невозможно заставить ψ оставаться конечным для любого значения переменной иначе как путем приравнения к нулю или коэффициента m, или обеих постоянных A и B, что опять-таки ведет к полному уничтожению функции. (Обращение в бесконечность в определенных точках струны с математической точки зрения не является препятствием к образованию колебаний, представляющихся синусоидальными функциями времени.)

Рассмотрим теперь более общее уравнение:

$$\frac{d^2y}{dx^2} = (a - bx^2)\frac{d^2y}{dt^2}, \qquad (58)$$

которое может быть истолковано как волновое уравнение для струны, в которой скорость распространения волны меняется от точки к точке согласно условию $n^2 = (a - bx^2)$. В средней части струны, для значений x, расположенных между $-\sqrt{\frac{a}{b}}$ и $+\sqrt{\frac{a}{b}}$, скорость n будет в этом случае иметь действительное значение; по обе стороны от этих двух точек она будет мнимой вплоть до $x = \pm\infty$. По обычным методам мы получаем из (58) уравнения:

$$y = f(x)\, g(t); \qquad g = A\cos \nu t + B \sin \nu t$$

$$\frac{d^2 f}{dx^2} + \nu^2 (a - bx^2) f = \frac{d^2 f}{dx^2} + (C - x^2) f = 0 \qquad (59)$$

[Постоянную $\nu^2 b$ в (59) мы полагаем равной 1, что не вредит общности вывода.]

Мы должны заняться теперь решением уравнения для $f(x)$. Мы пытаемся найти решение для $f(x)$ в виде степенного ряда, умноженного на $e^{-\frac{x^2}{2}}$ (прием, часто применяемый в теории дифференциальных уравнений):

$$f(x) = e^{-\frac{x^2}{2}} \sum_{n=0}^{\infty} a_n x^n. \qquad (60)$$

Мы подставляем это выражение в дифференциальное уравнение (59), сокращаем на $e^{-\frac{x^2}{2}}$ и собираем вместе все члены с одинаковым показателем степени. Каждая такая группа членов имеет вид:

$$a_{n+2}(n+1)(n+2)x^n - a_n(2n+1-C)x^n. \qquad (61)$$

Уравнение (59) будет удовлетворено, если все эти множители равны нулю. Полагая каждую группу отдельно равной 0, мы получаем:

$$\frac{a_{n+2}}{a_n} = \frac{(2n+1-C)}{(n+1)(n+2)}. \qquad (62)$$

Положим теперь $a_0 = 0$, заставляя таким образом исчезнуть все четные коэффициенты; одновременно придадим коэффициенту a_2 какое-либо произвольное значение и вычислим на основании этого допущения, при помощи (62), значения всех дальнейших нечетных коэффициентов a_3, a_5, a_7 и т. д. Мы можем также поступить наоборот — положить a_1 равным 0, уничтожив таким образом все нечетные коэффициенты, придать какое-либо произвольное значение a_0 и вычислить все четные коэффициенты a_2, a_4 и т. д. По обоим способам мы получим решения уравнения (59) при любом значении параметра C. Однако легко установить, что для некоторых значений параметра C решения будут обладать особенными свойствами.

Действительно, из (62) можно заключить, что мы получим совершенно различные результаты, в зависимости от того, будет ли параметр C равняться одному из нечетных целых чисел 1, 2, 5..., или же он будет иметь любое другое значение. Ибо если C равняется нечетному целому числу, то цепь коэффициентов обрывается на члене с соответствующим значением n; этот и все последующие коэффициенты оказываются равными нулю. Таким образом, степенной ряд, который мы выбрали для решения нашего дифференциального уравнения, окажется состоящим из конечного числа членов. Если C не будет равняться нечетному целому числу, то этот степенной ряд будет бесконечным.

Мы имеем перед собой новый род „характеристических чисел". Если параметр C в дифференциальном уравнении движения своеобразной „струны", которую мы рассматриваем, имеет одно из значений:

$$C = 2n + 1, \quad n = 0, 1, 2, 3, \tag{63}$$

то решения носят особый характер.

Рассмотрим, в чем заключается особенность этих решений. Если параметр C имеет какое-либо иное значение, отличное от (63), то ряд $\Sigma a_n x^n$ является бесконечным. Когда x увеличивается до бесконечности, сумма ряда растет с такой быстротой, что пересиливает одновременное постоянное уменьшение множителя $e^{-\frac{x^2}{2}}$; таким образом функция $f(x)$ на обоих концах интервала $-\infty < x < +\infty$ становится бесконечно-большой. Если, наоборот, C равно одному из „характеристических чисел" (63), то ряд $a_n x^n$ обрывается: при возрастании x до бесконечности падение множителя $e^{-\frac{x^2}{2}}$ пересиливает в этом случае рост суммы степенного ряда, и функция $f(x)$ остается конечной даже при $x = \infty$. Итак, „характеристические числа" коэффициента C, и только они одни, позволяют дать для дифференциального уравнения (59) решения, которые остаются конечными для любого значения независимой переменной от плюс до минус бесконечности. Это условие конечности заменяет в данном случае обычные пограничные условия натянутой струны.

Фундаментальные функции уравнения (59), соответствующие этим характеристическим числам, суть:

$$f_m(x) = e^{-\frac{x^2}{2}} H_m(x) \tag{61}$$

Символ $H_m(x)$ обозначает конечный ряд $\Sigma a_n x^n$, построенный по описанным выше способам, и оканчивающийся m-м членом. Эти ряды известны под названием полиномов Эрмита.

Интерпретация линейного гармонического осциллятора в волновой механике. Предыдущий параграф содержит все, что необходимо для Шрёдингеровской теории линейного гармонического осциллятора. Простейший линейный гармонический осциллятор, — т. е. материальная точка, которая связана упругой силой с положением равновесия и может колебаться около этого положения равновесия, — как известно, сыграл чрезвычайно важную роль в истории теории квантов. Это была первая система, для которой Планк предположил, что она обладает свойством поглощать и отдавать энергию не иначе как в виде квантов определенного конечного размера. Как известно, при помощи этого предположения Планку удалось разрешить проблему излучения черного тела, и оно послужило основанием всей теории квантов.

Представим себе частицу с массой m, могущую двигаться только вдоль оси x и притягиваемую к началу координат с силой пропорциональной расстоянию от него ($-k^2x$). Известно, что если подобным образом связанную частицу удалить от положения равновесия и затем вновь предоставить самой себе, то она будет совершать упругие колебания около центра равновесия с частотой $\nu_0 = \frac{k}{2\pi\sqrt{m}}$. Ее потенциальная энергия определяется следующей функцией координаты x:

$$V = \frac{1}{2} k^2 x^2 = 2\pi^2 m \nu_0^2 x^2. \tag{65}$$

Волновое уравнение (20) приобретает вид:

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{8\pi^2 m}{h^2} (E - 2\pi^2 m \nu_0^2 x^2)\, \psi = 0. \tag{66}$$

Простая замена переменной $q = x \cdot 2\pi \sqrt{\frac{m\nu_0}{h}}$ придает этому уравнению вид:

$$\frac{d^2\psi}{dq^2} + (C - q^2)\psi = 0, \qquad \text{где} \quad C = \frac{2E}{h\nu_0}, \tag{67}$$

т. е. вид соответствующий формально уравнению (59).

Согласно теории Шрёдингера, стационарные состояния линейного осциллятора определяются такими значениями параметра E, т. е. энергии осциллятора, при которых уравнение (67) имеет решения, остающиеся конечными при любом значении независимой переменной x, включая $x = \infty$.

Эти значения энергии соответствуют значениям параметра C, которые были названы нами в предыдущем параграфе характеристическими числами и определены уравнением (63).

Энергия линейного осциллятора в его стационарных состояниях определяется таким образом по уравнению:

$$E_n = \frac{h\nu_0}{2}(2n + 1) \qquad n = 0, 1, 2 \ldots$$

Следовательно,

$$E_n = \frac{1}{2}h\nu_0, \quad \frac{3}{2}h\nu_0, \quad \frac{5}{2}h\nu_0 \ldots \tag{68}$$

Итак, квантовая механика приводит к значениям энергии гармонического осциллятора с частотой ν_0, которые являются произведениями основного фактора $h\nu_0$ на последовательные „полуцелые“ числа $^1/_2$, $^3/_2$, $^5/_2$ и т. д.

Таким образом, гармонический осциллятор есть пример системы с половинными квантовыми числами. В большинстве прежних теорий было принято (или молчаливо допущено), что энергия Планковского осциллятора в стационарных состояниях определяется целыми кратными произведения $h\nu_0$. Однако уже при толковании некоторых полосатых спектров было замечено, что лучшее соответствие теории с экспериментом получается при допущении половинных квантовых чисел для колебаний атомов в двухатомной молекуле (каковые в первом приближении могут быть рассматриваемы как гармонические осцилляторы).

Фундаментальные функции, соответствующие отдельным стационарным состояниям гармонического вибратора, суть:

$$\psi_n(x) = \text{const} \cdot e^{-2\pi^2 m\nu_0 \cdot \frac{x^2}{h}} H_n\left(2\pi x \sqrt{\frac{m\nu_0}{h}}\right). \qquad (69)$$

Первые пять из этих функций изображены графически на рис. 2.[1] Эти кривые читатель может, если хочет, рассматривать как системы „пучностей“ и „узлов“, которые образуются на пяти колеблющихся струнах, скорость распространения колебаний в коих изменяется по пяти различным

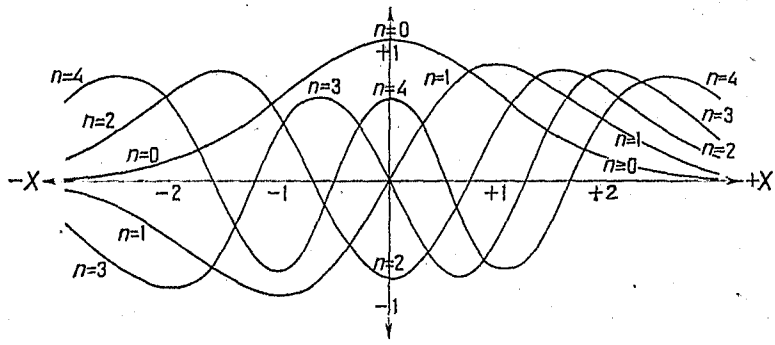

Рис. 2.

законам, получаемым путем подстановки первых пяти значений энергии E [из ряда (69)] в уравнение:

$$u = \frac{E}{\sqrt{2m(E - 2\pi^2 m\nu_0^2 x^2)}}. \qquad (70)$$

Таким образом, различные стационарные состояния линейного осциллятора представляются по Шрёдингеру не основным

[1] В (69) и во всех последующих уравнениях ψ представлена только как функция координат $f(x,y\ldots)$ и зависимость от t оставлена без внимания. Но функция времени всегда есть простая синусоидальная функция; ее наибольшее значение, таким образом, равно 1. Истинная „элонгация“ выражается произведением $f(x,y\ldots).g(t)$; следовательно, f есть наибольшее значение „элонгации“ или амплитуда. Все последующие уравнения ограничиваются, таким образом, описанием пространственного распределения амплитуд колебания. Это суть „амплитудные уравнения“, которые лишь после умножения на $g(t)$ становятся „волновыми уравнениями“.

колебанием и обертонами одной струны, а основными (и единственными) колебаниями ряда различных струн. [Быть может, некоторым будет более удобно представить себе, как предлагает д-р Фрай (Fry), вместо нескольких струн одну, но с различной скоростью распространения для волн различной частоты.]

Интерпретация атома водорода в волновой механике. Атому водорода приписывается в волновой механике, как и в модели Бора, потенциальная энергия $V = -\frac{e^2}{r}$. Я напоминаю, что эта формула для потенциальной энергии получается на основе представления об ядре и электроне, как точечных частицах, с зарядами $+e$ и $-e$, находящихся на расстоянии r друг от друга. Между тем электрон и ядро, как точечные частицы, не входят в открытом виде в новую теорию, и тем не менее потенциальная энергия, выведенная из Боровской модели, кладется в основу Шрёдингеровской модели атома водорода.

Потенциальная энергия такой формы указывает на необходимость воспользоваться полярными координатами при формулировке проблемы. Волновое уравнение (16) при посредстве (15) пишется в таком случае в форме:

$$\frac{E^2}{2m\left(E + \frac{e^2}{r}\right)}\,\Delta\psi = \frac{d^2\psi}{dt^2}. \qquad (71)$$

Заменяя частоту колебаний ν выражением $\frac{E}{h}$, мы получаем:

$$\Delta\psi + \frac{8\pi^2 m}{h^2}\left(E + \frac{e^2}{r}\right)\psi = 0. \qquad (72)$$

Сходство этого уравнения с таковым, выведенным выше для колебаний жидкого шара, бросается в глаза; аналогия здесь та же, что и между гармоническим осциллятором и натянутой струной. Мы имеем в атоме водорода как бы пример жидкого шара, скорость распространения колебаний в котором изменяется от точки к точке, согласно формуле:

$$u^2 = \frac{E^2}{2m\left(E + \frac{e^2}{r}\right)} \qquad (73)$$

Нам необходимо найти теперь соответствующие стоячие колебания.

Если E является положительной постоянной, то скорость распространения волн по всей массе шара действительна. В этом случае могут быть предписаны пограничные условия обычного типа (напр. условие, согласно которому шар должен быть ограничен твердой сферой известного радиуса). Мы можем вычислить, при данных пограничных условиях, „характеристические числа" параметра E и соответствующие этим характеристическим числам распределения стоячих колебаний в жидкости и их частоты. При отсутствии каких-либо пограничных условий, уравнение (72) может быть разрешено для любого значения параметра E.

Но если мы придадим E отрицательные значения, то положение изменится. Теперь u, скорость распространения волн, является действительной только в границах сферы с радиусом $-\frac{e^2}{E}$; на поверхности этой сферы она становится равной 0, а вовне ее — мнимой. Это напоминает нам осциллятор и струну, которой мы воспользовались для иллюстрации его. В последней скорость распространения колебаний была действительной в средней части и мнимой на обоих концах. Между обоими случаями есть существенные различия: в случае водородного атома переменная r имеет только положительные значения, и в точке $r=0$ скорость является хотя и бесконечно большой, но действительной.

Рассматривая струну с переменной n в известной области мнимой скоростью распространения колебаний, мы нашли, что закон изменения скорости может быть подобран таким образом, чтобы в струне образовались стоячие колебания с постоянным распределением узлов и пучностей и с определенными собственными периодами колебаний. С этой целью необходимо было выбрать для параметра одно из значений определенного ряда. То же самое мы должны будем сделать и в случае атома водорода.

Мы пытаемся найти для уравнения (72), как и раньше, решение в форме произведения функции углов φ и ϑ на функцию радиуса r. Идя этим знакомым путем, мы приходим к уравнению:

$$\operatorname{cosec}\vartheta\left[\frac{d}{d\vartheta}\left(\sin\vartheta\frac{dY}{d\vartheta}\right)+\frac{d}{d\varphi}\left(\operatorname{cosec}\vartheta\frac{dY}{d\varphi}\right)\right]=-\lambda Y \qquad (74)$$

и

$$\frac{d}{dr}\left(r^2\frac{df}{dr}\right)+\frac{8\pi^2 m r^2}{h^2}\left(E+\frac{e^2}{r}\right)f=\lambda f. \qquad (75)$$

Уравнение (75) тождественно с тем, которое нам пришлось встретить при обсуждении жидкого пара (52). Здесь, как и там, из циклического характера переменных φ и ϑ вытекает, что постоянная λ может принимать только определенные значения — „характеристические числа".

$$\lambda=l(l+1), \qquad l=0,\ 1,\ 2,\ 3... \qquad (76)$$

Уравнение (75), наоборот, несколько отличается от соответствующего уравнения (52) в предыдущем отделе. Здесь выступает различие между свойствами действительных жидкостей и свойствами той искусственно созданной „воображаемой" жидкости, которая служит материалом для создания модели водородного атома в волновой механике.

Если в уравнении (75) мы придадим параметру E произвольное отрицательное значение, то в общем случае получится уравнение, не имеющее решений, которые оставались бы конечными как в начале координат, так и при росте r до бесконечности. В этом случае мы имеем полную аналогию с тем, что мы видели на примере линейного осциллятора. И там произвольный выбор параметра, обозначенного буквой G, вел к невозможности найти решение, при котором амплитуды остались бы конечными на обоих концах струны.

Шрёдингер показал однако, что имеется ряд значений параметра E — характеристических чисел, — которые позволяют дать однозначные, непрерывные и конечные решения для любого значения переменной r.

Эти характеристические числа суть следующие:

$$E_n=\frac{2\pi^2 m e^4}{h^2 n^2}; \qquad n=1,\ 2,\ 3,\ 4... \qquad (77)$$

Последовательные возможные значения энергии в системе с потенциальной энергией $-\frac{e^2}{r}$, т. е. энергии стационарных состояний

атома водорода, определяются волновой механикой, как частные от деления основного множителя — $\frac{2\pi^2 m^4}{h^2}$ на квадраты последовательных целых чисел 1, 2, 3, 4.

Этот вывод совпадает с результатами опыта. Формула (77) представляется не чем иным как повторением формулы Бора, на которой основывается вся современная теория спектров. Эта формула так блестяще оправдалась на практике, что вряд ли какая-либо новая теория строения атомов могла бы рассчитывать на признание, если бы она со своей стороны также не приводила к ней.

Если мы пожелаем наглядно представить себе Шрёдингеровский атом водорода, то мы должны вообразить для каждого атома особую жидкость, заполняющую все бесконечное пространство, скорость распространения колебаний в которой для каждого стационарного состояния иначе зависит от радиуса. Закон изменения этой скорости получается в каждом отдельном случае путем подстановки в (73) соответствующего значения параметра E, избранного из ряда (77). Если мы подставим в (73) какое-либо другое наугад выбранное значение E, то мы также можем представить себе полученное уравнение как выражающее движение воображаемой жидкости; но жидкость эта не будет в состоянии поддерживать в себе стоячее и непрерывное колебание с повсеместно конечными амплитудами. Только при Боровских значениях энергии мы получаем системы, способные резонировать наподобие шаров из реальной жидкости.

Следующая наша задача состоит в уяснении характера тех стоячих колебаний, которые соответствуют отдельным стационарным состояниям. Это проблема гораздо более сложная, чем в случае воображаемых струн, соответствующих различным стационарным состояниям гармонического осциллятора. Затруднения связаны не только с переходом от одного измерения к трем, но и с фактом математической „дегенерации", характерной для данной проблемы. Эта дегенерация обусловливает собой неоднозначность решений: каждому дозволенному значению энергии E (кроме первого)

соответствует не одно, а несколько различных колебаний. Для уяснения этого факта необходимо вернуться к обоим уравнениям (74) и (75).

Так как уравнение (74) тождественно с уравнением, выведенным нами для пара из реальной жидкости, то распределение стоячих волн в водородном атоме Шрёдингера ничем не отличается от такового в жидком паре, поскольку речь идет о зависимости амплитуды от угловых переменных φ и θ. Воображаемая жидкость так же, как и реальная, делится на отделения, ограниченные узловыми плоскостями, узловыми двойными конусами и узловыми сферами, и распределение узловых плоскостей и двойных конусов тождественно с таковым в случае реальной жидкости при одинаковых характеристических числах. Только распределение узловых сфер, которые соответствуют нулевым значениям функции $f(r)$ в случае H-атома, иное, так как уравнение (75) для $f(r)$ существенно отличается от уравнения (52).

Первому значению характеристического числа для параметра E соответствует только одна фундаментальная функция уравнения (75). Второму характеристическому числу отвечают две фундаментальные функции, третьему — три, и т. д. Это ограничение множественности фундаментальных функций связано с ограничением, которому подвержены значения параметра. Если в выражении функции ψ в виде произведения двух функций —

$$\psi(r,\ \theta,\ \varphi) = F(r) \cdot Y_l\ (\theta,\ \varphi) \qquad (78)$$

мы придадим параметру E в первом множителе какое-либо из разрешенных для него значений, то у нас еще остается свободный выбор между различными возможными значениями параметра l во втором множителе. Однако этот выбор ограничен одним условием. Мы не имеем права взять для l значение равное или большее, чем избранное нами значение n; в противном случае E_n не будет характеристическим числом уравнения (75) в принятом нами смысле. Таким образом, для $n=1$ мы ограничены значением $l=0$; для $n=2$ — значениями $l=0$ и 1, и т. д. Каждому характеристическому

числу E_n соответствует $(n-1)$ различных шаровых функций $Y_1(\theta, \varphi)$, $Y_2(\theta, \varphi)\ldots$ $Y_{n-1}(\theta, \varphi)$ в качестве возможных решений уравнения (74). Каждое из этих решений дает особую фундаментальную функцию $F_{n,l}(r)$ уравнения (75). Если мы введем новую переменную

$$\rho = \frac{2\pi\sqrt{-2mE_n}}{h} r = \frac{4\pi^2 me^2}{nh^2} r = \frac{1}{na_0} r$$

вместо r $\left(a_0 = \frac{h^2}{4\pi^2 me^2}\right.$ есть радиус первого „Боровского круга“ $\left.\right)$, то фундаментальные функции, о которых идет речь, примут следующую сравнительно простую форму [1]:

$$X_{n,l}(\rho) = \text{const}\,\rho^{+le} \sum_{k=0}^{n-l-1} \frac{(-2\rho)^k}{k!} \binom{n+l}{n-l-1-k}; \qquad (79)$$

функция $X_{n,l}$ имеет $(n-l-1)$ корень, так что соответствующее колебание должно характеризоваться $(n-l-1)$ узловых сфер. Каждому разрешенному значению E_n соответствуют, таким образом, n разных решений общего уравнения (72), которые отличаются друг от друга по числу узловых сфер:

$$\psi_{n,l}(r, \theta, \varphi) = X_{n\,l}(\rho) Y_l(\theta, \varphi); \quad l = 0, 1, 2\ldots(n-1). \qquad (80).$$

Каждое из этих уравнений изображает разрешенный класс колебаний, отвечающих каждое в отдельности одному из членов, из которых складывается шаровая функция, согласно уравнению (54).

Благодаря подразделению шаровых функций, для n-го разрешенного значения параметра E имеется $(1+2+3+\ldots n) = \frac{n(n+1)}{2}$ различных способов колебания.

Уравнение (80) изображает различные колебания, в которых может участвовать воображаемое жидкое образование, которое служит для нас моделью атома водорода. Мы могли бы попытаться подробно и возможно наглядно описать характер

[1] Множитель в скобках в уравнении (79) изображает собой „число сочетаний из $(n+l)$ по $(n-l-1-k)$“, т. е. $(n-l-1-k)$-тый коэффициент бинома $(a+b)^{l+n}$.

колебания в каждом отдельном случае. Однако я сомневаюсь, имеет ли это начинание смысл. В свое время много энергии и искусства было положено на описание и изображение различных электронных орбит, которые теперь так быстро „устарели". Кто осмелится утверждать, что та же судьба не постигнет через несколько лет и картины, которые мы можем себе сейчас представить с помощью воображаемой колеблющейся жидкости? Однако можно считать вероятным, что по крайней мере в течение нескольких ближайших лет образ колеблющейся жидкости при интерпретации опытных данных в области теории строения атома будет наиболее адэкватным. Поэтому я все же позволю себе указать несколько деталей характера колебательных процессов, соответствующих трем наиболее „глубоким" (т. е. бедным энергией) состояниям атома водорода.

Нормальное состояние, $n=1$. Одна фундаментальная функция; одна экспоненциальная функция от r, уменьшающаяся от начала координат до бесконечности без узловых сфер. Соответствующая шаровая функция $Y_0(\theta, \varphi)$ представляет собой постоянную. Колебание изображается уравнением:

$$\psi(r) = \text{const.}\ e^{-\frac{r}{a_0}}; \qquad a_0 = \frac{h^2}{4\pi^2 me^2} \tag{81}$$

и обладает совершенной сферической симметрией.

Первое возбужденное состояние, $n=2$ (конечное состояние после испускания линий серии Бальмера). Две фундаментальные функции, $X_{2,0}$ и $X_{2,1}$. Первая изображает собой колебание с одной узловой сферой; вторая вообще не имеет узловых сфер, и амплитуда колебания падает экспоненциально при перемещении от центра до бесконечности. Первая фундаментальная функция должна быть для получения общей формулы движения умножена на $Y_0(\theta,\varphi)$. Так как Y_0 есть постоянная, то это колебание отличается полной сферической симметрией. Вторая фундаментальная функция подлежит умножению на Y_1; этот последний множитель состоит из членов, выписанных полностью в уравнении (54); получаемые в результате умножения различные системы

колебаний характеризуются наличием узловых плоскостей и конусов и не могут обладать поэтому сферической симметрией. Читатель может сам уяснить себе на основании уравнения (55) расположение узловых поверхностей в этих случаях.

Второе возбужденное состояние, $n=3$ (исходное состояние атома при испускании линии $H\alpha$). Три фундаментальные функции $X_{3,0}$, $X_{3,1}$ и $X_{3,2}$. Первая отвечает колебанию с двумя узловыми сферами и с совершенной сферической симметрией. Вторая и третья изображают колебания с одной узловой сферой и совсем без таковой. Будучи умножены на шаровые функции Y_1 и Y_2, колебания эти приобретают узловые плоскости и конусы и лишаются сферической симметрии.

Вообще стационарное состояние, характеризуемое значением параметра E_n, обладает n фундаментальных функций, соответствующих колебаниям с 0, 1, 2, 3... $(n-1)$ узловых сфер; фундаментальной функции с максимальным числом узловых сфер соответствует только один род колебаний, отличающийся полной сферической симметрией. Другие фундаментальные функции соответствуют нескольким родам колебаний каждая, с различным количеством узловых плоскостей и конусов.

Если приведенные нами примеры должны явиться образцами языка для описания атомных явлений, то необходимо составить словарь, с помощью которого можно было бы переводить на этот язык выражения, к которым мы привыкли прибегать, объясняясь на языке настоящего, т. е. на языке атомной теории Бора и Зоммерфельда. Этот словарь должен будет содержать определения в роде следующих: число n есть так называемое главное квантовое число электронной орбиты; число l на 1 меньше так называемого азимутального или „побочного“ квантового числа (k) в Боровской модели; число $(n-l-1)$, определяющее собой число узловых сфер, соответствует радиальному квантовому числу электронной орбиты. Дабы сделать смысл этих определений более ясным, я напомню, что модель атома водорода, предложенная Бором и Зоммерфельдом, приписывала атому в n-ом энергетическом состоянии n различных орбит, из коих одна круговая, а остальные $(n-1)$ — эллиптические с различным эксцентрицитетом. (Введение в эту модель представления о вра-

ящемся электроне несколько видоизменило ее, так что с этой точки зрения наш словарь относится не к языку настоящего, а к языку „глубокой древности“, т. е. приблизительно 1925 г.) „Эллиптические орбиты избираются в модели Бора и Зоммерфельда с помощью квантового условия, согласно которому интеграл $\int p_\varphi d\varphi$ момента вращения p_φ, взятый вдоль всей замкнутой орбиты, должен равняться произведению из h на целое число k, меньшее или равное главному квантовому числу n. В то же время интеграл $\int p_r dr$ радиального момента p_r должен равняться произведению h на целое число $(n-k)$, так что сумма интегралов $\int p_\varphi d\varphi + \int p_r dr$ будет равняться n. Числа n, k и $(n-k)$ назывались в модели Бора главным, азимутальным и радиальным квантовыми числами. Определения в роде данных выше должны позволить переход от различных орбит в прежних атомных моделях к различным видам колебаний в моделях нового типа.

Возмущения.

Согласно изложенному выше, волновая механика приводит к заключению, что каждому дозволенному значению энергии E_n соответствуют n различных способов колебания, отличающихся друг от друга количеством узловых сфер (не говоря уже о различных распределениях узловых плоскостей и конусов). Естественно возникает вопрос: можно ли на практике отличить эти колебания друг от друга и установить, какому из них или какой комбинации их отвечает данное конкретное состояние атома водорода?

Переводя этот вопрос на язык модели Бора-Зоммерфельда, мы получаем следующую формулировку его: можно ли в каждом конкретном случае сказать, на какой именно из разрешенных эллиптических орбит находится электрон?

На этот вопрос теория Бора отвечала, что электрон в действительности находится не в строго-кулоновском поле, так что сила, действующая на него, не в точности обратно пропорциональна квадрату его расстояния от ядра. К кулоновской силе притяжения электрона ядром должна быть при точном вычислении присоединена еще некоторая возмущающая сила. Вычисление показывает, что при наличии

возмущающей силы энергия различных электронных орбит с одинаковым квантовым числом n перестает быть тождественной. Представим себе, например, атом, состоящий из ядра с зарядом $11e$ и с 10 электронами, группирующимися вблизи него, в то время как одиннадцатый электрон находится на орбите со значительно большей осью (обычная модель атома натрия). В этом случае, в первом приближении, на внешний электрон будет действовать такая же сила, как если бы он находился в поле ядра с зарядом $1e$. Однако при более точном вычислении необходимо будет принять во внимание, что внутренние электроны не вполне совпадают с ядром; этот факт может быть учтен путем введения в вычисление особой возмущающей силы. При наличии таковой те n электронных орбит, которые возможны для внешнего электрона при энергии, равной в первом приближении E_n, не будут более тождественны между собой; n-ое стационарное состояние атома распадется на n различных стационарных состояний, немного отличающихся друг от друга. Даже в атоме водорода, несмотря на отсутствие внутренних электронов, нельзя обойтись без введения возмущающей силы; источником ее служит требуемая теорией относительности зависимость массы электрона от его скорости. Это обстоятельство вызывает распад стационарных состояний водорода на отдельные, лежащие тесно друг возле друга ступени; в спектре этот распад обнаруживается появлением так называемой тонкой структуры линий.

Аналогичное наблюдается и при более точном выводе стационарных состояний по методам волновой механики. Если ввести „возмущающий член“ в выражение, изображающее собой потенциальную энергию атома в волновом уравнении, то можно надеяться, что эта поправка позволит отличить друг от друга различные фундаментальные функции, первоначально отвечавшие одному и тому же характеристическому числу, и установить, какая из дозволенных колебательных систем отвечает действительности. (На языке математики можно сказать, что введение возмущающих сил уничтожает дегенерацию проблемы; это уничтожение может быть полным или только частичным.)

В этой области волновая механика дает совершенно те же результаты, что и первоначальная атомная теория Бора и Зоммерфельда. Этот результат не очень утешителен, ибо несколько лет тому назад выяснилось, что теория Бора-Зоммерфельда нуждается в расширении, для того чтобы она могла успешно объяснить детали тонкой структуры спектров. Это усовершенствование заключалось в введении представления о вращающемся вокруг собственной оси электроне. Нечто аналогичное должно быть, очевидно сделано, и в волновой механике, в противном случае она будет обнаруживать те же недостатки, что и первоначальная теория электронных орбит, которая не принимала во внимание собственного вращения электрона—например эта теория не могла полностью объяснить аналогию между спектрами водорода и щелочных металлов.

Есть один случай возмущающих сил, в котором выводы теории Бора-Зоммерфельда совпадают в первом приближении с выводами волновой механики и в то же время согласуются с данными эксперимента, без того чтобы необходимо было прибегнут к помощи вращающегося электрона. Это — область так называемого эффекта Штарка, т. е. тот случай, когда возмущающая сила исходит от внешнего электрического поля. Так как этот пример может послужить удобным переходом к вопросу, которому будет посвящена последняя часть настоящей статьи, то я остановлюсь на нем несколько подробнее.

Эффект Штарка. Представим себе атом водорода, который находится во внешнем электрическом поле произвольного направления. Мы совместим с этим направлением ось z нашей системы координат. Благодаря наличию этого поля электрон в положении (x, y, z), помимо потенциальной энергии $-\frac{e^2}{r}$, обусловленной притяжением к ядру (расположенному в начале координат), приобретает добавочную потенциальную энергию $+eFz$. (Мы продолжаем, таким образом, пользоваться представлением о точечном ядре и точечном электроне.)

Общая потенциальная энергия системы состоит, таким образом, из обычного члена $-\frac{e^2}{r}$ и „члена возмущения“ $+eFz$.

Волновое уравнение приобретает вид:

$$\Delta\psi + \frac{8\pi^2 m}{h^2}\left(E + \frac{e^2}{r} - eFz\right) = 0. \qquad (82)$$

Проблема требует в этом случае для своего успешного разрешения применения параболических координат. Вместо плоскостей, двойных конусов и сфер, которыми мы пользовались раньше, желательно ввести теперь плоскости и два семейства параболоидов вращения. Плоскости должны пересекать друг друга вдоль линии, параллельной направлению поля, т. е. вдоль оси z. Оба семейства параболоидов имеют общий фокус, расположенный в центре координат, т. е. совпадающий с ядром; перигели их расположены на оси z, в двух противоположных направлениях от центра. Переход от прямоугольных координат к параболическим совершается с помощью уравнений:

$$x = \sqrt{\xi\eta}\cos\varphi \qquad y = \sqrt{\xi\eta}\sin\varphi \qquad z = \frac{1}{2}(\xi - \eta). \qquad (83)$$

Волновое уравнение приобретает в новых координатах форму:

$$\frac{d}{d\xi}\left(\xi\frac{d\psi}{d\xi}\right) + \frac{d}{d\eta}\left(\eta\frac{d\psi}{d\eta}\right) + \frac{1}{4}\left(\frac{1}{\xi} + \frac{1}{\eta}\right)\frac{d^2\varphi}{d\varphi^2} + \frac{2\pi^2 m}{h^2}\Big[E(\xi+\eta) + 2e^2 - \frac{1}{2}eF(\xi^2 - \eta^2)\Big]\psi = 0. \qquad (84)$$

Пытаясь разложить это дифференциальное уравнение на уравнения, в каждое из коих входит только одна из переменных, по способу, которым мы уже многократно пользовались, мы получаем три уравнения, содержащие кроме E еще два параметра. Для всех трех параметров допускаются только определенные значения — характеристические числа, выбор коих обусловливается с одной стороны циклическим характером переменной φ, а с другой стороны тем обстоятельством, что только при определенных значениях параметров решения уравнений остаются конечными при любом значении независимой переменной.

Положим $E = 0$; найдем соответствующие характеристические числа и подставим их в уравнения. Мы получим опреде-

ленное распределение стоячих волн в нашей воображаемой жидкости; ближайшее рассмотрение показывает, что жидкость будет в этом случае разделена на отделения узловыми поверхностями, имеющими форму плоскостей и параболоидов, с осью параллельной направлению поля, смотрящих в две противоположные стороны. Каждому дозволенному значению энергии E соответствует $(1+2+3+4+\ldots n)$ различных систем стоячих волн, каждая из коих характеризуется особым числом k_1 узловых параболоидов одного направления, числом k_2 узловых параболоидов другого направления и, наконец, особым числом узловых плоскостей s. Возможные значения чисел k_1, k_2 и s ограничены условием, согласно которому они должны быть целыми числами, не меньшими 0 и не большими n, и что их сумма должна равняться $(n-1)$,— другими словами, они должны удовлетворять уравнению:

$$k_1 + k_2 + s + 1 = n. \tag{85}$$

(Переводя эти утверждения на язык электронных орбит, мы называем s экваториальным квантовым числом, определяющим момент вращения электрона вокруг направления поля, измеренный в единицах $\frac{h}{2\pi}$; k_1 и k_2 суть параболические квантовые числа.)

Вводя теперь в вычисление внешнее поле F, мы находим, что между $(1+2+3+4\ldots n)$ различных колебаний, соответствующих одному значению E_n, те, которые характеризуются соотношением $k_1 = k_2$, сохраняют свою энергию неизменной, в то время как остальные смещаются в различно сильной степени, согласно известной формуле Эпштейна:

$$\Delta E = \frac{3}{8}\frac{Fh^2n}{8\pi^2me}(k_1 - k_2). \tag{86}$$

Таким образом, n-е стационарное состояние распадается или разлагается на несколько отдельных стационарных состояний; однако это разложение не представляется полным: некоторые из общего числа $(1+2+3+4+\ldots n)$ колебаний остаются и при наличии внешнего электрического поля энергетически тождественными (неполное уничтожение дете-

перации). Спектральная линия, соответствующая переходу из состояния E_i в состояние E_j, должна, таким образом, распасться в электрическом поле на ряд отдельных линий, лежащих близко друг от друга. Этот так называемый эффект Штарка наглядно показывает самостоятельное существование различных колебаний, которые при отсутствии внешнего поля дают одинаковую энергию и не могут быть поэтому отличены друг от друга.

Перед тем как перейти к дальнейшему изложению, я хотел бы коснуться одного маленького парадокса, который, быть может, уже обратил на себя внимание читателя. Выше было сказано, что в отсутствии внешнего поля колебания нашей воображаемой жидкости характеризуются распределением узловых плоскостей и узловых параболоидов, между тем как в предыдущем параграфе мы вывели для невозмущенного атома водорода распределение стоячих волн, определяемое узловыми плоскостями, двойными конусами и сферами. Однако ближайшее рассмотрение показывает, что эти два утверждения не противоречат друг другу. Ибо колебание одного рода может быть получено как сумма нескольких колебаний другого рода. Возьмем для примера первое возбужденное состояние атома водорода ($n=2$). С помощью процедуры, описанной в предыдущем параграфе, мы находим три системы колебаний: 1) систему с одной только узловой сферой, 2) систему с одним двойным узловым конусом и 3) систему с одной узловой плоскостью. По второму способу, принятому нами при изучении эффекта Штарка, мы получаем также три различных системы колебаний: 1) с одним узловым параболоидом, направленным в одну сторону, 2) с одним узловым параболоидом, направленным в другую сторону, и 3) с одной узловой плоскостью. Последние способы колебания в обеих группах очевидно тождественны. Колебания 1) и 2) второй группы могут быть воспроизведены путем взаимного наложения — с надлежащей интенсивностью — колебаний 1), 2) и 3) первой группы. Если поле, действующее на атом водорода, постепенно ослабляется и в конце концов сводится к нулю, то атом остается колеблющимся по способам 1), 2) или 3) второй группы; эти виды колебания доступны, однако, аналитическому

изображению, как определенные комбинации колебаний 1), 2) и 3) первого типа.

Предположим теперь, что мы имеем перед собой невозмущенный атом водорода (опять-таки в первом возбужденном состоянии). Мы прилагаем к нему некоторое весьма слабое поле F. Перед приложением поля атом может характеризоваться л ю б о й комбинацией колебаний 1), 2) и 3) первого рода. В качестве колебаний второго рода, к которым атом должен теперь перейти, годится не всякая комбинация колебаний первого рода, а только о п р е д е л е н н ы е, специально подобранные по амплитуде сочетания их. Если в атоме до приложения поля этого сочетания не было, — спрашивается, каким образом весьма слабое — в пределе бесконечно-слабое — внешнее поле F может вызвать соответствующую перегруппировку колебаний? (Аналогичный парадокс возникает и при рассмотрении проблемы с точки зрения теории электронных орбит.)

И н т е р п р е т а ц и я р о т а т о р а в в о л н о в о й м е х а н и к е. Ротатор, т. е. твердое тело, способное вращаться вокруг неподвижной или свободной оси, является одним из важнейших элементов в арсенале физиков, которые занимаются конструкцией атомных и молекулярных моделей. Это — обычная модель, которой физика пользуется при объяснении явлений электрической и магнитной поляризации газов, а также при толковании полосатых спектров двух- и многоатомных молекул. Большинство моделей, которыми пользуются в этом последнем случае, правда, соединяют с представлением о ротаторе еще и представление об осцилляторе; другими словами, они рассматривают ротатор не как твердое тело, а как эластическую систему, способную колебаться. В настоящей статье мы ограничимся примером твердого ротатора неизменной формы.

Трактовка ротатора по методу волновой механики необычайно проста; однако в общем случае для ее проведения необходимо воспользоваться волновым уравнением в обобщенной форме, в конфигурационном пространстве многих измерений. Этого осложнения можно избежать, если ограничиться рассмотрением того простого идеализированного ротатора, который был введен в науку около пятидесяти лет назад для

объяснения удельной теплоты двухатомных газов, в роде водорода. Модель эта состоит из двух шаров, неподвижно соединенных друг с другом, в роде гимнастической гири. При этом предполагается, что вся система может вращаться только вокруг осей перпендикулярных к линии, соединяющей между собой центры обоих шаров, а не вокруг оси параллельной этой линии (фигурной оси). Расположение этой модели определяется углами ϑ и φ, которые характеризуют собой (в полярной системе координат) направление фигурной оси в пространстве. Энергия системы состоит исключительно из живой силы вращения. Поэтому член V исчезает в этом случае из волнового уравнения. Это обстоятельство сильно упрощает проблему. Мы обозначаем через A момент инерции модели по отношению к оси вращения и находим для волнового уравнения форму:

$$\Delta\psi + \frac{8\pi^2 EA}{h^2}\psi = 0. \qquad (87)$$

В этом уравнении оператор Лапласа Δ должен быть выражен в полярных координатах, как уже было сделано в уравнении (50). Члены, содержащие отсутствующую в данном случае координату r, могут быть опущены. Таким образом, мы получаем для нашей проблемы снова второе уравнение (52), со специальным значением постоянной, обозначенной в упомянутом уравнении буквой λ:

$$-\operatorname{cosec}\vartheta\left[\frac{d}{d\varphi}\left(\operatorname{cosec}\vartheta\,\frac{d\psi}{d\varphi}\right)+\frac{d}{d\vartheta}\left(\sin\vartheta\,\frac{d\psi}{d\vartheta}\right)\right]=\frac{8\pi^2 EA}{h^2}\psi. \qquad (88)$$

И в настоящем примере функция ψ должна возвращаться к своему первоначальному значению при увеличени φ на целое кратное 2π, а ϑ на целое кратное π, ибо такое изменение обеих координат ведет к возвращению модели в первоначальное положение. Мы опять должны заключить, что для коэффициента правой части уравнения возможны только определенные значения — характеристические числа; условия, которым этот коэффициент должен удовлетворять, равносильны следующему условию для энергии ротатора E:

$$E = n(n+1)\frac{h^2}{8\pi^2 A} = \left(n+\frac{1}{2}\right)^2\frac{h^2}{8\pi^2 A} + \text{const};\ n = 0, 1, 2, 3. \qquad (89)$$

Таким образом, вследствие циклического характера переменных, энергия ротатора оказывается квантованной согласно уравнению (89). Это уравнение дает нам второй (после гармонического осциллятора) пример полуцелых квантовых чисел.

Таким образом, собственные значения энергии ротатора определяются особенно простым и ясным способом. Однако осложнение, ведущее к необходимости перехода к неэвклидовому конфигурационному пространству, уже выступает на горизонте. Уравнение (87) отличается от волновых уравнений, которые мы применяли до сих пор, заменой массы m моментом инерции A. Эта замена является в достаточной степени естественной, и, производя ее, можно сослаться на „интуицию". Но, строго говоря, для оправдания этой подстановки необходимо было бы сослаться на форму, которую приобретает в этом случае выражение кинетической энергии в общем волновом уравнении. Если мы откажемся от ограничения, введенного нами выше, и позволим ротатору вращаться также и вокруг фигурной оси, то кинетическая энергия примет другую форму, и в этом общем случае твердого ротатора со свободной осью мы не сможем обойтись без написания волнового уравнения в его общей, неэвклидовой форме. Эта проблема была разрешена несколькими исследователями, и применение полученной таким образом формулы к некоторым проблемам молекулярных спектров показало, что форма общего волнового уравнения, выведенная де Бройлем и Шрёдингером, хорошо оправдывается на практике.

Поляризация газов в магнитном или электрическом поле может быть рассматриваема с помощью представления о молекулах, как магнитных или электрических диполях. Вычисление является наиболее простым при предположении, что направление магнитного (или электрического) момента совпадает с направлением фигурной оси молекулы, которая не может вращаться вокруг этой оси. Пусть M обозначает (магнитный или электрический) момент такой молекулы. Пусть, далее, поле, в котором находится молекула, направлено параллельно оси z (т. е. тому направлению, от которого считается угол θ). Поле обусловливает появление потенциаль-

ной энергии, которая должна быть прибавлена к левому члену уравнения (88). Этот прибавочный член имеет форму:

$$-V\psi = (MH\cos 0)\,\psi. \qquad (90)$$

Легко вывести, что волновое уравнение имеет в этом случае характеристические числа, которые ограничивают возможности ориентации молекулы по отношению к полю. Это заключение, которое было сделано уже первоначальной атомной механикой Бора и Зоммерфельда, было подтверждено на практике опытами Герлаха и Штёрна. Вычислить действительную поляризацию газа в электрическом или магнитном поле можно, только сделав какое-либо дополнительное допущение касательно вероятности различных ориентаций молекулы по отношению к полю при различных температурах. Сделав такое допущение, мы получаем формулу для диэлектрической постоянной и для магнитной восприимчивости газа, в виде функции приложенного поля и температуры. Обычно в этих случаях допущение (одинаковая вероятность всех разрешенных случаев) ведет к формуле, которая при высоких температурах асимптотически переходит в известную эмпирическую формулу Ланжевена:

$$\text{Восприимчивость} = \frac{Y}{H} = \frac{NM^2}{3kT}. \qquad (91)$$

Интерпретация свободного электрона в волновой механике. Мы оставляем теперь вычисления характеристических чисел и стационарных состояний и возвращаемся к первоначальным идеям де Бройля.

Волновое уравнение электрона, движущегося со скоростью V в пространстве, лишенном каких-либо электрических или магнитных сил (или для любой другой частицы, летящей с постоянной скоростью вдоль оси x), в своей классической (т. е. не релятивистической) форме имеет следующий вид:

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{8\pi^2 mE}{h^2}\psi = 0 \qquad \left(E = \frac{1}{2}mv^2\right) \qquad (92)$$

Это уравнение имеет решение в виде синусоидальной функции при любом значении параметра E и, следовательно, не требует никаких ограничений энергии определенными дискрет-

ными значениями (противоположный результат был бы слишком парадоксальным!) Приписывая колебанию частоту, определяемую уравнением (19), $\nu = \frac{E}{h}$ и скорость распространения, согласно (15), выражаемую формулой:

$$u = \frac{E}{\sqrt{2mE}},$$

мы получаем для длины волны, связанной с движением электрона (или другой свободной частицы с массой m), выражение:

$$\lambda = \frac{E}{\sqrt{2mE}} \cdot \frac{h}{E} = \frac{h}{\sqrt{2mE}} = \frac{h}{mv}. \qquad (93)$$

Если мы вычислим абсолютное значение λ для электронов, летящих со скоростью в несколько сот или тысяч вольт, т. е. для обыкновенных катодных лучей, то мы получим волны, длина коих приблизительно соответствует длине рентгеновских волн. Так, например, электрону в 150 вольт соответствует длина волны почти точно в 1 Ангстрём.

Это совпадение невольно наводит на мысль о возможности диффракции электронных лучей при падении их на кристаллические решетки, вызывающие, как известно, диффракцию рентгеновских лучей той же длины волны. Ничто сказанное нами до сих пор касательно волн, связанных с материальными частицами, не обязывает нас к этому заключению. Наоборот, скептик мог бы с некоторым основанием утверждать, что надежда увидеть когда-либо наглядно распространение описанных волн в нашем трехмерном пространстве так же необоснована, как надежда увидеть когда-либо воочию другие математические фикции, применяемые при вычислении, например, x и y из какого-нибудь алгебраического уравнения. При теоретическом обсуждении этой возможности невольно приходит в голову, что только в отдельных простейших случаях, например в случае свободного электрона или атома водорода волновая механика ведет к представлению о волнах в трехмерном эвклидовом пространстве. В других случаях — примером может служить свободный ротатор — „волны“ необходимо рассматривать лишь в неэвклидовом

многомерном пространстве. Несмотря на это, как упомянуто ранее, в обоих случаях мы можем представить процессы совершенно аналогично построенными „волновыми уравнениями". Сказать, что волны существуют только в неэвклидовом „пространстве конфигурации" практически означает почти то же самое, что сказать, что в физическом смысле они не существуют вообще. Почему же в частном случае, который приводит к волнам в трехмерном пространстве, эти волны должны быть более реальны нежели в общем случае? Таким образом a priori вопрос остается открытым, однако эксперимент дает совершенно однозначный ответ: дифракция электронных волн в кристаллических решетках действительно существует. Она была предсказана Эльзассером и открыта Дэвиссоном и Джермером и, в другой форме, Г. П. Томсоном.[1] На основании дифракционной картины можно известным образом, зная постоянную решетки, вычислить длину волны. Таким путем, из опыта, получаются для длин волн де Бройля величины, совершенно совпадающие с вычисленными на основании соотношения $\frac{1}{2}mv^2=h\nu$.

Необходимо еще раз отметить, что скорость распространения волн материи отнюдь не совпадает со скоростью движения материальной частицы, к которой эти волны „приписаны". Скорость волны равняется $u=\frac{E}{\sqrt{2m(E-V)}}$, скорость частицы $v=\sqrt{\frac{2T}{m}}=\sqrt{\frac{2(E-V)}{m}}$. То, что мы измеряем при исследовании дифракции, есть длина волны, а не скорость распространения ее и не частота колебаний. Это обстоятельство весьма существенно, ибо длина волны, как мы сейчас увидим, есть величина, не зависящая от абсолютного значения энергии, которая — по крайней мере в классической механике — всегда известна только со включением неопределенной аддитивной постоянной. Если мы прибавим к измеренной нами по отношению к какой-либо произвольно выбранной системе координат кинетической энергии частицы

[1] Ср. статьи П. С. Тартаковского, Успехи физич. наук, *8*, 338, 1928 г. и В. Л. Грановского, Успехи физич. наук, *9*, 308, 1929 г.

какую-либо наугад выбранную постоянную и назовем сумму энергией системы E, то мы изменим этим соответствующую данной частице частоту колебаний. Но так как одновременно в том же отношении изменится и скорость распространения волны, то длина волны останется неизменной. Длина волны, на основании соотношений $\lambda\nu = u$ и $h\nu = E$, определяется всегда уравнением

$$\lambda = \frac{h}{\sqrt{2m\,(E-V)}},$$

где V обозначает собой потенциальную энергию. Всякое увеличение энергии при неизменной скорости частицы в одинаковой степени увеличивает оба члена под знаком корня — E и V, и таким образом разность $E - V$ остается неизменной. Возвращаясь к предыдущим отделам нашей статьи, мы видим, что произведенное Шрёдингером вычисление стационарных состояний основывалось на предъявлении известных требований к длинам волн, а не к частотам; ибо распределение стоячих волн в пространстве зависит только от длины волны, а не от частоты колебаний. Частота колебаний, доступных непосредственному измерению,—именно частота колебаний световых волн, испускаемых атомом при переходе из одного стационарного состояния в другое,—зависит исключительно от разности энергий этих двух состояний и ни в коей степени не предопределяет абсолютной величины их. В релятивистической механике энергия определяется абсолютно, как произведение из массы частицы на квадрат скорости света. Если с самого начала пользоваться релятивистической механикой, то затронутый нами вопрос вообще не может возникнуть. Стоит однако отметить, что неполнота определения энергии в классической механике ни в какой степени не отзывается на практических выводах волновой механики, так что предсказания ее в этой области не могут служить аргументами ни за, ни против релятивистических формул.

В релятивистической механике волновая формула летящего свободно в пространстве электрона приобретает вид:

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} = \frac{4\pi^2}{h^2c^2}\,(E - m_e{}^2c^4) = 0; \qquad E = \frac{m_0c^2}{\sqrt{1 - \dfrac{v^2}{c^2}}}. \quad (94)$$

Длина соответствующей волны определяется выражением $h\sqrt{1-\frac{v^2}{c^2}}\cdot\frac{1}{m_0 v}=\frac{h}{mv}$, частота колебаний — выражением $m_0c^2\frac{1}{h\sqrt{1-\frac{v^2}{c^2}}}$. Волны распространяются со скоростью $\frac{c^2}{v}$, превосходящей скорость света.

Я должен ограничиться только упоминанием того важного факта, что скорость частицы связана в волновой механике со скоростью волны совершенно тем же соотношением, какое связывает в оптике скорость распространения фазы с так называемой групповой скоростью.

Попытка дать физическое объяснение величине ψ.

Прошло тридцать три года с того дня, когда выдающийся английский государственный деятель лорд Сэлисбери, избранный президентом Британского Общества содействия развитию наук, произнес в своей вступительной речи, богатой перлами остроумия, следующие достопамятные слова, вызванные многочисленными попытками физиков того времени дать наглядное объяснение свойствам эфира: „Главная, если не единственная функция эфира, как кажется, состоит в том, чтобы быть подлежащим к глаголу колебаться". То же самое мы можем сказать в настоящее время относительно величины ψ. Эта величина позволяет нам определять энергию стационарных состояний атома. Когда эта цель достигнута, функция ψ исчезает из нашего поля зрения. Подобно тому как переменная под знаком определенного интеграла исчезает после окончания интеграции, величина ψ теряет для нас свой интерес, когда цель, для достижения которой она была введена, является достигнутой. Можно даже вообще не давать этой величине особенного обозначения: многие математики предпочитают просто говорить о дифференциальном операторе:

$$\Delta - 8\pi^2 m\,(E - V)\cdot\frac{1}{h^2}.$$

Шрёдингер сделал однако смелую попытку — без сомнения, не полную и не окончательную, но тем более интересную — придать величине ψ, соответственно ее значению в теории, определенное физическое значение. Предположение Шрёдингера заключалось в том, что он положил квадрат амплитуды ψ пропорциональным квадрату плотности электричества в данной точке, „размазав" таким образом электрон на сравнительно большое практически (теоретически — на бесконечное) пространство.

Присмотримся ближе к этой теории и к ее последствиям.

Дабы избежать, насколько возможно, всяческих осложнений, я возьму наиболее простой возможный пример — именно гармонический линейный осциллятор. Мы заменяем этот осциллятор воображаемой струной, натянутой вдоль оси x; скорость распространения волн в подобной струне, как мы знаем, определяется уравнением $V\sqrt{1-\frac{x^2}{L^2}}$ и является таким образом действительной по обе стороны от начала координат вплоть до точек $x=\pm L$ и мнимой вне этого интервала. Я буду пользоваться при изложении также и еще более простым примером, который послужил нам предварительной ступенью к изучению осциллятора — именно реальной натянутой вдоль оси x-ов и зажатой в точках $x=\pm L$ струной, с постоянной скоростью распространения волн вдоль нее.

В обоих случаях — при исследовании реальной и воображаемой струны — поиски характеристических чисел и фундаментальных функций привели нас к установлению определенной системы естественных или собственных колебаний, с определенными частотами $\nu_0, \nu_1, \nu_2 \ldots$, каждому из коих отвечает определенное пространственное распределение стоячих волн с их узлами и пучностями, изображаемыми аналитически фундаментальными функциями:

$$y_i = f_i(x)(A_i \cos 2\pi\nu_i t + B_i \sin 2\pi\nu_i t); \quad i = 0, 1, 2, \ldots \quad (95)$$

Для реальной струны функции $f_i(x)$ суть обыкновенные синусоидальные функции; для воображаемой струны, символизирующей собой линейный осциллятор, эти функции выражаются уравнением (60). Я напоминаю, что в этом последнем случае мы

должны были рассматривать не одну струну с различными колебаниями, а столько различных по свойствам струн, сколько различных колебаний мы должны были приписать осциллятору.

Если реальная струна выполняет i-е колебание, или если мы обращаем внимание на колебание i-й струны, из числа символизирующих гармонический осциллятор, то функция $f_i(x)$ пропорциональна амплитуде этого колебания. Форма уравнения (95) показывает, что в каждом данном пункте амплитуда эта не зависит от времени.

Если мы будем рассматривать квадрат амплитуды колебаний как плотность электричества в данной точке, то на основании предыдущих рассуждений мы должны будем заключить, что распределение электричества вдоль воображаемой струны, которой мы для наглядности заменяем линейный осциллятор, постоянно во времени. Для каждого данного стационарного состояния существует определенное постоянное распределение амплитуд, т. е., согласно нашему толкованию, постоянное распределение электрической плотности вдоль струны. Это означает, что пока струна (а следовательно — линейный осциллятор) характеризуется одной фундаментальной функцией, собственное колебание не сопровождается движением электрических зарядов, и потому нет основания ожидать излучения электромагнитной энергии в окружающее пространство.

Представим себе теперь, что реальная струна колеблется сразу по двум разрешенным способам, соответствующим числам i и j, или же что i-я и j-я воображаемая струна одновременно выполняют свои колебания. В этом случае колебание изображается уравнением (96) (в этом уравнении для простоты положено $A_i = A_j = 1$, и $B_i = B_j = 0$, что не равносильно общности выводов):

$$y = y_i + y_j = f_i(x) \cos 2\pi\nu_i t + f_j(x) \cos 2\pi\nu_i t \qquad (96)$$

Уравнение (96) легко приводится к форме:

$$y = C \cos (2\pi\nu_i t - \alpha), \qquad (97)$$

где

$$C^2 = f_i^2 + f_j^2 + 2 f_i f_j \cos 2\pi (\nu_i - \nu_j) t, \qquad (98)$$

а α есть постоянная, не имеющая для нас особенного значения.

В уравнении (97) мы имеем перед собой пример колебания с амплитудой, меняющейся в каждой данной точке с течением времени. Квадрат амплитуды состоит в этом случае из постоянного члена $f_i^2 + f_j^2$ плюс член, меняющийся в зависимости от времени по синусоидальной функции. При этом частота изменения квадрата амплитуды (период синусоидального члена) определяется разностью частот обеих сосуществующих систем колебаний.[1]

Идентифицируя опять квадрат амплитуды с плотностью электричества, мы видим, что плотность эта уже не будет постоянна во времени, но меняется в каждой точке периодически с частотой $(\nu_i - \nu_j)$. Таким образом, по законам классической электродинамики, следует ожидать излучения энергии частоты $\nu = \nu_i - \nu_j$.

Мы вспоминаем, что частоты ν_i и ν_j определяются энергиями стационарных состояний E_i и E_j, по уравнению $\nu h = E$.

Если бы мы были в праве сделать несколько смутное, но соблазнительное предположение, что осциллятор может одновременно находиться в обоих стационарных состояниях, с энергиями E_i и E_j, то наглядным образом такого осциллятора могла бы служить воображаемая струна, у которой в каждой точке квадрат амплитуды ψ флюктуирует с частотой $(\nu_i - \nu_j)$; и если мы этот квадрат амплитуды ψ отождествим с плотностью электричества, то мы можем ожидать, что подобная система будет давать излучение с частотой $\frac{E_i - E_j}{h}$.

То, что раньше обозначалось как переход от одного стационарного состояния в другое, согласно описанной гипотезе должно называться сосуществованием этих двух

[1] Преобразование (96) в (97) сводится к хорошо известному из теории колебаний сложению двух гармонических колебаний различной частоты ν_i и ν_j в некоторое результирующее колебание, амплитуда которого уже не постоянна, но периодически изменяется с частотой $(\nu_i - \nu_j)$, т. е. возникают биения.

состояний. (Я еще раз раз напоминаю, что речь идет не о сосуществовании двух возможных колебаний одной и той же струны, а о сосуществовании как бы двух самостоятельных струн, с одним единственным основным колебанием на каждой).

Мы делаем теперь еще один шаг вперед в развитии принятой гипотезы, и вычисляем с этой целью интеграл:

$$M \int_{-\infty}^{+\infty} x C^2 dx \int_{-\infty}^{+\infty} x f_i^2 dx + \int_{-\infty}^{+\infty} x f_j^2 dx + \left\{ 2 \int_{-\infty}^{+\infty} x f_i f_j dx \right\} \cos 2\pi (\nu_i - \nu_j) t. \qquad (99)$$

Этот интеграл измеряет собой электрический момент предполагаемого распределения электронного заряда вдоль струны, по отношению к центру ее. Действительно, подинтегральная функция есть произведение $C^2 dx$ — заряда элемента длины воображаемой струны на расстояние x этого элемента от центра, т. е. электрический момент элемента по отношению к началу координат, а следовательно интеграл представляет собой электрический момент всей струны по отношению к началу координат. Если интеграл этот будет равен 0, то это означает, что на обеих половинах струны — правой или левой — находится одно то же количество электричества. Если интеграл будет иметь положительное или отрицательное значение, то мы должны будем заключить, что заряд расположен на струне несимметрично по отношению к середине ее. Если величина интеграла окажется периодически изменяющейся, например если коэффициент при косинусе будет отличаться от 0, то это будет равносильно колебанию заряда вдоль струны.

Функция $f_i(x)$ была выписана полностью в уравнении (60). Мы показали в свое время, что $f_i(x)$ носит поочередно четный и нечетный характер. Так, функции f_0, f_2, f_4 . . . суть четные, функции f_1, f_3, f_5 . . . — нечетные функции x. Квадраты $f(x)$ всегда носят четный характер, а произведения этих квадратов на x суть всегда нечетные функции x. Поэтому два

первые интеграла в формуле (99) исчезают. Что касается интеграла $\int_{-\infty}^{+\infty} x f_i f_j dx$, то его подинтегральная функция представляет собой нечетную функцию в тех случаях, если i и j оба четные или оба нечетные числа; в обоих этих случаях и этот интеграл оказывается равным 0. Таким образом при одновременном сосуществовании двух нечетных или двух четных стационарных состояний не наблюдается колебаний электрического заряда, и электрический момент системы остается постоянным. В случае четного i и нечетного j (а также в обратном случае) вывод не так прост. Однако математическое исследование показывает, что интеграл $\int_{-\infty}^{+\infty} x f_i f_j dx$ и тут оказывается равным нулю, за исключением случаев, когда i отличается от j на 1. Это ведет нас к закону:

При сосуществовании двух колебаний гармонического вибратора только при условии $j = i \mp 1$ электрический момент воображаемой струны, изображающей в нашей модели вибратор, меняется с течением времени по синусоидальному закону, с частотой $(\nu_i - \nu_j)$; во всех других случаях электрический момент остается все время равным нулю.

Физический вывод из этой теоремы заключается в том, что только сосуществование двух соседних стационарных состояний осциллятора ведет к излучению энергии. Переходя на язык прежней теории, мы получаем известное правило: спектральные переходы разрешены только между двумя состояниями осциллятора, отличающимися друг от друга по своим квантовым числам на ∓ 1. Это „правило отбора“, выведенное в старой теории квантов при помощи „принципа соответствия“, подтверждается, как известно, опытом на некоторых молекулярных спектрах, именно в тех случаях, когда мы в праве рассматривать колебания атомов в молекуле как гармонические.

Таким образом, в случае гармонического осциллятора интерпретация величины ψ^2, как электрической плотности,

ведет к двойному успеху: 1) распределение электричества в каждом отдельном из стационарных состояний оказывается статическим; при сосуществовании двух состояний электричество флюктуирует вдоль воображаемой струны с той самой частотой, которой характеризуется, согласно теории Бора (подтвержденной на опыте), испускаемое при переходе из одного из этих состояний в другое излучение, — это первый успех; 2) второй заключается в теоретическом выводе правила, согласно которому только комбинация двух соседних состояний осциллятора ведет к испусканию лучистой энергии. При этом процессе, происходящий в атоме, приобретает наглядный вид: он заключается в колебании электрического заряда около центра равновесия. (Шрёдингер показал, что если мы рассмотрим большое количество стационарных состояний, с высокими значениями i и произвольно избранными относительными „амплитудами", т. е. значениями A_i и B_i в уравнении (95), и представим себе все соответствующие собственные колебания сосуществующими одновременно, то в результате весь электрический заряд электрона окажется сконцентрированным на небольшом пространстве. Таким образом „расплывшийся" электрон вновь соберется в одной точке, которая окажется колеблющейся взад и вперед около центра равновесия, с частотой ν_0. Амплитуда ее колебания будет приблизительно равна амплитуде колебания материальной частицы, с которой мы начали в свое время свое рассуждение, т. е. частицы с массой m, находящейся под влиянием упругой силы $-4\pi^2 m \nu_0^2 x$; при этом энергия колебаний та же, что и для стационарного состояния, которое при суммировании проявляется наибольшей амплитудой. Этот результат показывает, таким образом, что при рассмотрении большого числа процессов колебания с высокими значениями i можно непрерывно перейти от картины, даваемой волновой механикой, к обычной картине пространственно ограниченных колеблющихся частиц: высоко возбужденным состояниям может быть свойственно такое распределение зарядов, при котором можно по праву говорить о точечных зарядах, описывающих определенные орбиты, между тем как при состояниях с малыми квантовыми чис-

лами заряд „расплывается“ до тех пор, пока остается только одно сплошное облако заряда — флюктуирующее или остающееся в покое).

Еще одна выгода от идентифицирования величины ψ^2 с плотностью электричества обнаруживается при переходе от одного измерения к двум и трем. В качестве примера я возьму атом водорода в электрическом поле. Мы представили себе этот атом в виде жидкого образования, совершающего стоячие колебания. Если одновременно существуют две системы колебаний возмущенного атома, то их сосуществование приводит к реальному колебанию электрического заряда в атоме, с частотой равной разности обеих собственных частот. Эта частота биений соответствует частоте при переходе от одного из этих стационарных состояний к другому, согласно законам прежней теории квантов. Если в частном случае оба стационарных состояния будут соответствовать одному и тому же значению квантового числа s [экваториального квантового числа, встречающегося в уравнении (85)], то колебания электрического заряда будут происходить, как это можно показать, параллельно направлению внешнего поля. Таким образом движение заряда не будет иметь компоненты в направлении перпендикулярном к направлению поля. Этот результат соответствует эмпирическому правилу, согласно которому свет, испускаемый атомами при переходах, отвечающих изменению только квантовых чисел k_1 и k_2, при сохранении неизменной величины экваториального квантового числа s, отличается тем, что он линейно поляризован с электрическим вектором параллельным направлению внешнего поля. Если же числа s для обоих сосуществующих стационарных состояний различаются на единицу, то вычисление приводит к колебанию электрического заряда, перпендикулярному к направлению электрического поля. Опыт подтверждает, что получаемый при подобных переходах свет поляризован в плоскости перпендикулярной к направлению поля. Если числа s обоих состояний отличаются друг от друга больше чем на 1, то соответствующие смещения заряда оказываются вообще незначительными, и в соответствии с этим линии, обусловленные переходами, при которых s

меняется больше чем на 1, в спектре вообще не выступают с заметной интенсивностью.

Мы имеем таким образом три пункта, в которых отождествление величины $|\psi|^2$ с плотностью электричества ведет к успешным результатам. В наглядной картине, изображающей атом с помощью воображаемой упругой жидкости, электричество оказывается неподвижно распределенным в пространстве до тех пор, пока атом находится в стационарном состоянии; таким образом становится понятным отсутствие излучения в стационарном состоянии. При одновременном наличии двух стационарных состояний заряд колеблется с частотой, определяемой разностью их энергий; колебание это оказывается заметным только в том случае, если между обоими стационарными состояниями по законам прежней атомной механики (принципу соответствия Бора) возможны спектральные переходы; направление, вдоль которого происходит колебание заряда, оказывается соответствующим наблюденной поляризации испускаемых при данном переходе лучей; в случаях, которые отвечают „запрещенным“ переходам сколько-нибудь значительного колебания заряда, как целого, вообще не существует. Как набросок возможной теории происхождения испускаемого атомом света, гипотеза Шрёдингера отличается несравненными достоинствами. В прежних теориях строения атома не удавалось удовлетворить даже самого элементарного требования наличия закономерной связи между периодами движения частиц, составляющих атом, и периодами излучения, испускаемого им. В теории Шрёдингера такого рода соотношение впервые было установлено, и если мы видим теперь в разрядной трубке водород, испускающий красную Бальмеровскую линию с частотой колебаний равной $4{,}57 \cdot 10^{14}$, то, согласно этой гипотезе, мы по крайней мере в праве утверждать, что в каждом атоме водорода действительно происходит какой-то колебательный процесс, характеризующийся той же частотой.

Даже относительные интенсивности различных спектральных линий доступны теоретическому вычислению с помощью только-что развитого представления волновой механики. Мы видели, что в примере гармонического осциллятора исчезно-

тение интеграла $\int_{-\infty}^{+\infty} x f_i f_j dx$ для всех комбинаций i и j, за исключением тех, при которых i отличалось от j на 1, повело к исчезновению из спектра линий, соответствующих переходам, при которых квантовое число n меняется больше чем на 1. Нельзя ли предположить, что при любой комбинации двух стационарных состояний интенсивность излучения, поляризованного параллельно какому-либо направлению x, определяется величиной интеграла $\int_{-\infty}^{+\infty} x \psi_i \psi_j dx$, составленного из фундаментальных функций обоих состояний ψ_i и ψ_j? Для развития этой идеи необходимо сделать какие-либо добавочные предположения, ибо фундаментальные функции в том виде, в каком мы писали их до сих пор, могут быть помножены на любой коэффициент, оставаясь при этом попрежнему фундаментальными функциями. Если интеграл должен обращаться в нуль (т. е. при выводе правил отбора), эти постоянные множители не имеют значения; если же интеграл не равен нулю (т. е. при выводе правил интенсивности), его абсолютная величина существенным образом зависит от выбора этих постоянных, и потому необходимо определенное допущение относительно значения этих постоянных. Шрёдингер сделал простое и естественное допущение касательно упомянутых коэффициентов при вычислении интенсивности компонентов эффекта Штарка для Бальмеровых линий. Результаты опыта подтвердили его предположения.

Я не могу останавливаться здесь подробнее на этих вопросах; упомяну только, что именно в этой области находится точка соприкосновения волновой механики Шрёдингера с матричной механикой Гейзенберга. Интересующие нас интегралы входят в теорию Гейзенберга в виде матричных элементов. Теория Гейзенберга на практике оказывается другим способом получения тех же выводов, к каким ведет и волновая механика.

Изящное и наглядное представление Шрёдингера, которое мы развивали в этом отделе, встречает однако

много затруднений. Укажем некоторые из них. Мы можем представить себе, что при одновременном наличии двух стационарных колебаний атом должен испускать в окружающее пространство излучение. Но этот поток энергии не может течь без конца; рано или поздно одно из стационарных состояний должно „отмереть" и излучение приостановиться. Между тем мы до сих пор не можем составить себе с помощью волновой механики какого-либо представления о механизме этого отмирания. Быть может, возможно было бы ввести в теорию какое-либо объяснение этого явления, в роде допущения взаимодействия между волнами ψ и электромагнитными волнами, выходящими из атома. Гораздо труднее представить себе, однако, выход из другой дилеммы, перед которой ставит нас идентификация квадрата ψ с плотностью электричества. Наша волновая формула позволила вывести для атома водорода правильные значения энергии стационарных состояний только потому, что мы приняли для потенциальной энергии выражение $V = -\frac{e^2}{r}$, вытекающее из представления о точечном электроне. Если мы приходим теперь к гипотезе „расплывшегося" электрона, занимающего собой все пространство вокруг ядра, то чем мы можем оправдать введение в наши формулы выражения потенциальной энергии, несовместимого с этой гипотезой? Какое право мы имеем определять распределение электрического заряда двумя различными образами для двух целей и совмещать эти два представления в одной формуле?

Волновая механика, дающая столь соблазнительно-наглядные объяснения многих атомных процессов, все еще богата подобными принципиальными затруднениями. Таким образом, поклонники Лессинга, который говорил, что большее наслаждение заключается в приближении к истине, чем в обладании ей, могут опять иметь полное удовлетворение от занятия физикой. Волновая механика — это еще только попытка, а не окончательное достижение. Это план кампании, скорее чем завоевание. Нельзя еще предвидеть, чем эта попытка кончится. Однако мы должны в заключение напомнить: двадцать пять лет назад никто не подозревал о каких-либо

других свойствах света, кроме связанных с его волновой природой. С тех пор опыт показал, что свет во многих отношениях ведет себя как поток дискретных частиц.

В настоящее время опыты один за другим показывают, что материя во многих отношениях ведет себя как волновое явление. Двойственная природа, которая нас так тревожила в случае света, со времени появления теории квантов оказалась свойственной также и материи. Дуализм частицы-волны сделался таким образом всеобщим принципом. Не существует частиц без волновых свойств и не существует волн без корпускулярных свойств. Обобщение этого дуализма быть может укажет путь к высшему единству.