ROZPRAVY II. TŘÍDY ČESKÉ AKADEMIE.
ROČNÍK XXXV. ČÍSLO 3.

# Příspěvek k dynamice neutrálního atomu heliového.

Podává

**V. Trkal.**

Předloženo dne 8. ledna 1926.

Dosavadní pokusy podati uspokojivé řešení problému, jejž poskytuje Rutherfordův model atomu neutrálního helia[1]), a to užitím klasické mechaniky a principií kvantové teorie, jak je formuloval Bohr, Sommerfeld a ostatní, ztroskotaly úplně. Je to problém tří těles působících na sebe silami danými elektrostatickým zákonem Coulombovým a v tom tkví jedna z hlavních obtíží této otázky. Nejdůležitější práce sem spadající jest společným dílem Bornovým a Heisenbergovým.

Born a Heisenberg[2]) vyšetřili důkladně t. zv. excitovaný neutrální atom helia na základě představy, že k ionisovanému atomu helia (sestávajícímu z jádra o náboji $+2e$, kolem něhož obíhá jediný elektron, t. zv. *vnitřní elektron*, o náboji $-e$ buď v Keplerově elipse nebo

[1]) Rutherfordův model atomu neutrálního helia sestává, jak známo, z kladně nabitého jádra o náboji $+2e$, kolem něhož obíhají dva elektrony, z nichž každý má náboj $-e = -4{\cdot}774 \times 10^{-6}$ absol. jedn. elst. $\left(\frac{e}{m} = 5{\cdot}31 \times 10^{17} \frac{\text{absol. jedn. elst.}}{\text{gram}}\right)$; hmota $m$ každého z obou elektronů jest řádově asi $\frac{1}{8000}$ hmoty jádra.

[2]) M. Born u. W. Heisenberg, Ztschr. f. Phys. *16*, 229, (1923). — Viz též M. Born (F. Hund): Vorlesungen über Atommechanik. Berlin (J. Springer) 1925; p. 327 a zvl. p. 334. — Před tím zabýval se tímto problémem též J. H. van Vleck v práci „The normal Helium Atom and its relation to the Quantum Theory", Phil. Mag. (6), *44*, 842—869, 1922, ovšem jiným způsobem, avšak dospěl taktéž k výsledku, že pomocí klasické mechaniky a dosavadních kvantových podmínek nelze problém heliového atomu uspokojivě rozřešiti.

v dráze kruhové) přidruží se druhý elektron (o náboji $-e$), t. zv. *vnější elektron*, a to tak, že *jeho vzdálenost od jádra jest stále větší než vzdálenost vnitřního elektronu od jádra.* Tento předpoklad o vzdálenostech jest pro jejich další úvahy podstatný, neboť jenom na základě něho bylo jim lze, takřka na samém začátku jejich pojednání, rozvinouti tu část potenciální energie atomu, která pochází od vzájemného působení obou elektronů na sebe, v kulové funkce, v kterémžto rozvoji se pak omezili na prvé tři členy. Další postup jejich práce záleží v aplikaci metody perturbací, z nebeské mechaniky převzaté a pro účele mechaniky atomu přizpůsobené, kombinované s principiemi teorie kvant. *Výsledek* jejich práce *jest negativní,* totiž teoreticky jimi nalezené hodnoty pro energii atomu v různých excitovaných stavech jeho nesouhlasí s experimentálními. Práci svoji končí tímto závěrem:

*Důsledné užití principií kvantové teorie,* totiž výpočet hodnot energie atomu dle zákonů klasické mechaniky a výběr z těchto hodnot pro energii atomu ve stacionárních stavech atomu docílený tím, že t. zv. účinnostní proměnné učiníme rovny celistvým násobkům Planckovy konstanty $h$, *vede k souhlasu se zkušeností jenom v těch případech, kdy se jedná o pohyb jednoho jediného elektronu; selhává již v případě, kdy chceme vyšetřiti pohyb obou elektronů v atomu helia.*

Tím se zdálo, že — aspoň po negativní stránce — jest tento problém vyřízen.

Dosavadní zkušenost tedy ukázala, že *jen atom vodíku a Starkův zjev vodíkového atomu* dají se ovládnouti formálními prostředky, jež skýtá teorie kvant v dosavadní své podobě. V době zcela nedávné pak učinil Heisenberg[3]) slibný pokus o vybudování nové mechaniky, (jež by měla platiti místo klasické mechaniky všude tam, kde se vyskytují kvanta), t. zv. *kvantové mechaniky,* která jest založena na vztazích mezi veličinami principielně pozorovatelnými (a nikoliv jako dosud na veličinách, které — jak se zdá — principielně se pozorovati nedají, jako na př. místo, oběžná doba elektronu). Avšak tato nová kvantová mechanika je teprve v prvých počátcích a skutečné matematické provedení její se podařilo dosud jen v nejjednodušších případech. Již u takového celkem jednoduchého případu, jako jest atom vodíku, jenž se dal dosavadní teorií kvant ovládnouti bezvadně, vznikají pro novou kvantovou mechaniku zvláštní komplikace, které se nepodařilo dosud zdolati[4]).

[3]) W. Heisenberg, Ztschr. f. Phys. *33*, 879, (1925). Viz též P. A. M. Dirac: Proceedings of the Royal Society *109*, 642 (1925) a zvláště M. Born a P. Jordan: Ztschr. f. Phys. *34*, 858 (1925).

[4]) Poznámka při korektuře (v červenci 1926). — Mezi tiskem této práce podařilo se zpracovati pomocí nové kvantové mechaniky atom vodíku. Viz práce: P. A. M. Dirac, Proc. Roy. Soc., A *110*, 561—579, 1926, W. Pauli jr., ZS. f. Phys. *36*, 336—363, 1926. — Přehled literatury (časopisecké) pojednávající o nové kvantové mechanice podal jsem v „Časopisu pro pěst. mat. a fys., *55*, 207, 208, 423, 424 (1926). — Jiným způsobem hleděl modifikovati dosavadní teorii kvant





Přes to, že skončily nezdarem všechny dosvadní pokusy o rozřešení problému, který poskytuje dynamika neutrálního atomu heliového (poněvadž vycházely z jistých — jak se zdálo — plausibilních představ a předpokladů o drahách a pohybech obou elektronů), anebo snad lépe, právě proto, myslím, že není zbytečné pokusiti se o cestu, která nečiníc žádných zvláštních předpokladů na samém svém počátku a zůstávajíc na půdě klasické mechaniky i dosud užívaných principií v teorii kvant, může aspoň částečně vrhnouti světlo do tajů heliového atomu. Cesta ta, o niž v následujícím se chci pokusiti, naráží sice na svém konci na značné početní obtíže; jest však vedena tak, *aby se* — pokud možno — *neztrácela analogie s řešením pro atom vodíku,* které se tak skvěle osvědčilo.

## I.

Buďtež $A$, $B$, $C$ tři hmotné body (opatřené elektrickými náboji), $m_1$, $m_2$, $m_3$ jejich hmoty, $e_1$, $e_2$, $e_3$ jejich elektrické náboje, $r_{23}$, $r_{31}$, $r_{12}$ jejich vzájemné vzdálenosti. Zvolme si pevný pravoúhlý systém souřadný $O\,x\,y\,z$, v němž souřadnice těchto tří bodů jsou:

$$A \equiv (q_1,\ q_2,\ q_3), \quad B \equiv (q_4,\ q_5,\ q_6), \quad C \equiv (q_7,\ q_8,\ q_9).$$

Soustava těchto tří bodů má kinetickou energii

$$T = \tfrac{1}{2}\, m_1 (\dot{q}_1^2 + \dot{q}_2^2 + \dot{q}_3^2) + \tfrac{1}{2}\, m_2 (\dot{q}_4^2 + \dot{q}_5^2 + \dot{q}_6^2) + \tfrac{1}{2}\, m_3 (\dot{q}_7^2 + \dot{q}_8^2 + \dot{q}_9^2).$$

Mezi body $A$, $B$ působí síla Coulombova $e_1 e_2 r_{12}^{-2}$; podobně mezi $B$, $C$ síla $e_2 e_3 r_{23}^{-2}$, mezi $C$, $A$ síla $e_3 e_1 r_{31}^{-2}$. Přitažlivé síly mezi těmito body dle gravitačního zákona Newtonova jsou vůči uvedeným silám Coulombovým mizivě nepatrné, tak že je lze zanedbati. Tudíž potenciální energie soustavy uvažovaných tří bodů jest

$$\begin{aligned} V = \frac{e_2 e_3}{r_{23}} + \frac{e_3 e_1}{r_{31}} + \frac{e_1 e_2}{r_{12}} = e_2 e_3 \left[(q_4 - q_7)^2 + (q_5 - q_8)^2 + (q_6 - q_9)^2\right]^{-\frac{1}{2}} + \\ + e_3 e_1 \left[(q_7 - q_1)^2 + (q_8 - q_2)^2 + (q_9 - q_3)^2\right]^{-\frac{1}{2}} + \\ + e_1 e_2 \left[(q_1 - q_4)^2 + (q_2 - q_5)^2 + (q_3 - q_6)^2\right]^{-\frac{1}{2}}. \end{aligned}$$

Pohybové rovnice soustavy bodů $A$, $B$, $C$ znějí

$$m_k\, \ddot{q}_r = -\frac{\partial V}{\partial q_r}, \qquad (r = 1, 2, \ldots, 9),$$

kde $k$ značí největší číslo celé $\leqq \frac{1}{3}\,(r + 2)$. Je to systém 9 differenciálních rovnic 2. řádu, tedy systém 18. řádu.

Položíme-li

$$m_k\, \dot{q}_r = p_r, \qquad (r = 1, 2, \ldots, 9)$$

E. Schrödinger, Ann. d. Phys. *79*, 361—376, 490—527, 734—756, (1926). Avšak jeho teorie dá se převésti na teorii Heisenbergovu, tak že jsou obě vlastně identické.

a
$$H = \sum_{r=1}^{9} \frac{p_r^2}{2\, m_k} + V,$$

tu obdrží pohybové rovnice H a m i l t o n ů v tvar

$$\frac{d\, q_r}{d\, t} = \frac{\partial H}{\partial p_r}, \qquad \frac{d\, p_r}{d\, t} = -\frac{\partial H}{\partial q_r}, \qquad (r = 1, 2, \ldots, 9).$$

Tento systém 18. řádu lze postupem docela týmž jako je vyložen na př. v knize W h i t t a k e r o v ě,[5]) převésti na systém 8. řádu

$$\begin{aligned} H = {} & \frac{1}{2\,\mu}\left(p_1'^2 + \frac{p_3'^2}{q_1'^2}\right) + \frac{1}{2\,\mu'}\left(p_2'^2 + \frac{p_4'^2}{q_2'^2}\right) + e_1\, e_2\, q_1'^{-1} + \\ & + e_1\, e_3 \left\{ q_2'^2 - \frac{2\, m_2\, q_1'\, q_2'}{m_1 + m_2}\left(\cos q_3' \cos q_4' + \frac{k^2 - p_3'^2 - p_4'^2}{2\, p_3'\, p_1'} \sin q_3' \sin q_4'\right) + \right. \\ & \left. \qquad + \frac{m_2^2}{(m_1 + m_2)^2}\, q_1'^2 \right\}^{-\frac{1}{2}} \\ & + e_2\, e_3 \left\{ q_2'^2 + \frac{2\, m_1\, q_1'\, q_2'}{m_1 + m_2}\left(\cos q_3' \cos q_4' + \frac{k^2 - p_3'^2 - p_4'^2}{2\, p_3'\, p_4'} \sin q_3' \sin q_4'\right) + \right. \\ & \left. \qquad + \frac{m_1^2}{(m_1 + m_2)^2}\, q_1'^2 \right\}^{-\frac{1}{2}}, \end{aligned}$$

$$\dot{q}_r' = \frac{\partial H}{\partial p_r'}, \qquad \dot{p}_r' = -\frac{\partial H}{\partial q_r'}, \qquad (r = 1,\ 2,\ 3,\ 4),$$

při čemž význam obecných souřadnic $q_1'$, $q_2'$, $q_3'$, $q_4'$ a obecných impulsů $p_1'$, $p_2'$, $p_3'$, $p_4'$, $p_5' = k =$ konst. jest jiný než význam $q_1, q_2, q_3, \ldots, q_9, p_1, p_2, p_3, \ldots, p_9$ v původním systému 18. řádu, a kde také H a m i l t o n o v a funkce $H$ má nyní zcela jiný tvar než u původního systému 18. řádu. Při tom $\mu$ a $\mu'$ jsou zkratky

$$\mu = \frac{m_1\, m_2}{m_1 + m_2}, \qquad \mu' = \frac{m_3\,(m_1 + m_2)}{m_1 + m_2 + m_3}.$$

Zvolíme-li nyní bod $A$ o hmotě $m_1$ za jádro mající náboj $e_1 = + Z e$ a body $B$, $C$ o hmotách $m_2 = m$, $m_3 = m$ za elektrony o nábojích $e_2 = - e$, $e_3 = - e$, lze vzhledem k tomu, že pak $m_1 \gg m$, položiti $m_1 = \infty$, tak že obdržíme

$$\mu = \mu' = m$$

a funkce H a m i l t o n o v a se redukuje na tvar

$$\begin{aligned} H = {} & \frac{1}{2\, m}\left(p_1'^2 + \frac{p_3'^2}{q_1'^2}\right) + \frac{1}{2\, m}\left(p_2'^2 + \frac{p_4'^2}{q_2'^2}\right) - e^2 Z \left(\frac{1}{q_1'} + \frac{1}{q_2'}\right) + \\ & + \frac{e^2}{\sqrt{q_1'^2 + q_2'^2 + 2\, q_1'\, q_2' \left(\cos q_3' \cos q_4' + \dfrac{k^2 - p_3'^2 - p_4'^2}{2\, p_3'\, p_4'} \sin q_3' \sin q_4'\right)}} = W. \end{aligned} \qquad (1)$$

---

[5]) E. T. W h i t t a k e r: Analytical Dynamics, 2nd ed., Cambridge (University Press) 1917, § 155, 157, 158. — V citované knize Whittakerově jest třeba změniti znamení minus u činitele $-\dfrac{k^2 - p_3^2 - p_4^2}{2\, p^3\, p^4}$ ve plus, str. 351, 7. a 8. ř. shora.





Pohybové rovnice naší soustavy skládající se z jádra a obou elektronů jsou

$$\dot{q}_r' = \frac{\partial H}{\partial p_r'}, \qquad \dot{p}_r' = -\frac{\partial H}{\partial q_r'}, \qquad (r = 1,\ 2,\ 3,\ 4).$$

Význam souřadnic $q_1'$, $q_2'$ jest patrný: jsou to vzdálenosti elektronů $B$, $C$ od jádra $A$, tudíž ($q_1' > 0$, $q_2' > 0$) jsou to vždy kladná čísla; konstanta $k$ na čase nezávislá má význam totálního impulsu celého atomu helia. H a m i l t o n o v a funkce tuto posléze uvedená rovná se, jak známo, úhrnné energii atomu; tuto konstantu energie označíme $W$. Při tom musí býti, jak rovněž známo, $W < 0$, nemá-li se atom rozletěti. V konečném výsledku pak nutno položiti $Z = 2$, ježto atomové číslo helia jest 2.

## II.

Kanonická transformace (t. j. taková, která nechává kanonické rovnice H a m i l t o n o v y invariantní), jejíž vytvořující funkce jest:[6])

$$V_1 = p_x\, q_1' \cos q_3' + p_y\, q_1' \sin q_3' + p_z\, q_2' \cos q_4' + p_u\, q_2' \sin q_4', \qquad (2)$$

jest dána vztahy

$$x = \frac{\partial V}{\partial p_x}, \qquad p_x = \frac{\partial V}{\partial x} \text{ atd.},$$

t. j.

$$\left.\begin{aligned} & x = q_1' \cos q_3', \quad y = q_1' \sin q_3', && z = q_2' \cos q_4', \quad u = q_2' \sin q_4', \\ & p_1' = p_x \cos q_3' + p_y \sin q_3', && p_3' = q_1'\,(- p_x \sin q_3' + p_y \cos q_3'), \\ & p_2' = p_z \cos q_4' + p_u \sin q_4', && p_4' = q_2'\,(- p_z \sin q_4' + p_u \cos q_4'), \end{aligned}\right\} \qquad (3)$$

Odtud najdeme ihned

$$\left.\begin{aligned} & q_1' = \sqrt{x^2 + y^2} > 0, \quad p_1'^2 + \frac{p_3'^2}{q_1'^2} = p_x^2 + p_y^2, \quad p_3' = - p_x\, y + p_y\, x, \\ & q_2' = \sqrt{z^2 + u^2} > 0, \quad p_2'^2 + \frac{p_4'^2}{q_2'^2} = p_z^2 + p_u^2, \quad p_4' = - p_z\, u + p_u\, z, \end{aligned}\right\} \qquad (4)$$

a tím se transformuje Hamiltonova funkce posléze uvedená na tvar

$$\begin{aligned} H_1 = {} & \frac{1}{2\, m}\,(p_x^2 + p_y^2 + p_z^2 + p_u^2) - e^2 Z \left(\frac{1}{\sqrt{x^2 + y^2}} + \frac{1}{\sqrt{z^2 + u^2}}\right) + \\ & + \frac{e^2}{\sqrt{x^2 + y^2 + z^2 + u^2 + 2\, x\, z + \dfrac{k^2 - (x\, p_y - y\, p_x)^2 - (z\, p_u - u\, p_z)^2}{(x\, p_y - y\, p_x)\,(z\, p_u - u\, p_z)} . y u}} = W. \end{aligned} \qquad (5)$$

---

[6]) Viz na př. M. B o r n (F. Hund): Vorlesungen über Atommechanik. Berlin 1925, p. 37, form. (12).

Pohybové rovnice naší soustavy tvořící atom helia jsou pak

$$\dot{x} = \frac{\partial H_1}{\partial p_x}, \quad \dot{p}_x = -\frac{\partial H_1}{\partial x} \text{ atd.}$$

Nyní provedeme novou kanonickou transformaci, jejíž vytvořující funkce jest[7])

$$V_2 = (p_y \sin q_4 + p_x \cos q_4)\, q_1 + \sqrt{p_z^2 + (p_y \cos q_4 - p_x \sin q_4)^2} \,.\, q_2 + p_u \,.\, q_3, \tag{6}$$

a která jest dána relacemi

$$x = \frac{\partial V_2}{\partial p_x} \text{ atd.}, \quad p_i = \frac{\partial V_2}{\partial q_i}, \quad (i = 1,\ 2,\ 3,\ 4),$$

t. j.

$$\left.\begin{aligned}
x &= q_1 \cos q_4 - \frac{p_y \cos q_4 - p_x \sin q_4}{\sqrt{p_z^2 + (p_y \cos q_4 - p_x \sin q_4)^2}} \,.\, q_2 \sin q_4, \\
y &= q_1 \sin q_4 + \frac{p_y \cos q_4 - p_x \sin q_4}{\sqrt{p_z^2 + (p_y \cos q_4 - p_x \sin q_4)^2}} \,.\, q_2 \cos q_4, \\
z &= \frac{p_z}{\sqrt{p_z^2 + (p_y \cos q_4 - p_x \sin q_4)^2}} \,.\, q_2, \\
u &= q_3, \\
p_1 &= p_y \sin q_4 + p_x \cos q_4, \\
p_2 &= \sqrt{p_z^2 + (p_y \cos q_4 - p_x \sin q_4)^2}, \\
p_3 &= p_u, \\
p_4 &= (p_y \cos q_4 - p_x \sin q_4) \left( q_1 - q_2 \frac{p_y \sin q_4 + p_x \cos q_4}{\sqrt{p_z^2 + (p_y \cos q_4 - p_x \sin q_4)^2}} \right).
\end{aligned}\right\} \tag{7}$$

Dělením 5. a 6. rovnice uvedené v systému (7) obdržíme

$$\frac{p_1}{p_2} = \frac{p_y \sin q_4 + p_x \cos q_4}{\sqrt{p_z^2 + (p_y \cos q_4 - p_y \sin q_4)^2}},$$

což dosadíme do poslední rovnice v systému (7), čímž obdržíme

$$p_4 = (p_y \cos q_4 - p_x \sin q_4) \left( q_1 - q_2 \frac{p_1}{p_2} \right)$$

a odtud

$$p_y \cos q_4 - p_x \sin q_4 = \frac{p_2\, p_4}{q_1 p_2 - q_2 p_1}.$$

Z této rovnice a z 5. rovnice systému (7) plyne

$$\left.\begin{aligned}
p_x &= p_1 \cos q_4 - \frac{p_4}{q_1 p_2 - q_2 p_1} \,.\, p_2 \sin q_4, \\
p_y &= p_1 \sin q_4 + \frac{p_4}{q_1 p_2 - q_2 p_1} \,.\, p_2 \cos q_4;
\end{aligned}\right\} \tag{8}$$

[7]) Tato kanonická transformace se (v této formě) dosud v literatuře nevyskytla, pokud je mi známo. Lze ji však odvoditi složením transformací (11) a (2) v této práci.





dále

$$\left.\begin{aligned}
p_z &= p_2 \sqrt{1 - \frac{p_4^2}{(q_1 p_2 - q_2 p_1)^2}}, \\
p_u &= p_3.
\end{aligned}\right\} \tag{8}$$

Třetí rovnici systému (8) obdržíme ze 6. rovnice systému (7), použijeme-li poslední rovnice uvedené před systémem (8).

Pomocí poslední rovnice uvedené před systémem (8) a 6. rovnice systému (7) najdeme z prvních dvou rovnic systému (7)

$$\left.\begin{aligned}
x &= q_1 \cos q_4 - \frac{p_4}{q_1 p_2 - q_2 p_1} \,.\, q_2 \sin q_4, \\
y &= q_1 \sin q_4 + \frac{p_4}{q_1 p_2 - q_2 p_1} \,.\, q_2 \cos q_4;
\end{aligned}\right.$$

dále

$$\left.\begin{aligned}
z &= q_2 \sqrt{1 - \frac{p_4^2}{(q_1 p_2 - q_2 p_1)^2}}, \\
u &= q_3.
\end{aligned}\right\} \tag{9}$$

Třetí rovnici systému (9) najdeme kombinací 3. rovnice systému (7) se 3. rovnicí systému (8) a s poslední rovnicí uvedenou před systémem (8).

Tato kanonická transformace definovaná vzorci (8) a (9) převádí, jak lehce patrno, součet $p_x^2 + p_y^2 + p_z^2 + p_u^2$ ve výraz $p_1^2 + p_2^2 + p_3^2$ a součet $x^2 + y^2 + z^2 + u^2$ ve výraz $q_1^2 + q_2^2 + q_3^2$. Dále

$$x^2 + y^2 = q_1^2 + q_2^2 \frac{p_4^2}{(q_1 p_2 - q_2 p_1)^2}; \qquad x\, p_y - y\, p_x = p_4,$$

$$z^2 + u^2 = q_2^2 \left(1 - \frac{p_4^2}{(q_1 p_2 - q_2 p_1)^2}\right) + q_3^2;$$

$$z\, p_u - u\, p_z = (q_2 p_3 - q_3 p_2) \sqrt{1 - \frac{p_4^2}{(q_1 p_2 - q_2 p_1)^2}}.$$

Tudíž Hamiltonova funkce $H_1$ se transformuje na tvar

$$\left.\begin{aligned}
H_2 = {} & \frac{1}{2m} (p_1^2 + p_2^2 + p_3^2) - e^2 Z \left\{ \left( q_1^2 + q_2^2 \frac{p_4^2}{(q_1 p_2 - q_2 p_1)^2} \right)^{-\frac{1}{2}} + \right. \\
& \left. + \left( q_3^2 + q_2^2 \left( 1 - \frac{p_4^2}{(q_1 p_2 - q_2 p_1)^2} \right) \right)^{-\frac{1}{2}} \right\} + \\
& + e^2 \left\{ q_1^2 + q_2^2 + q_3^2 + 2 q_2 \sqrt{1 - \frac{p_4^2}{(q_1 p_2 - q_2 p_1)^2}} \left( q_1 \cos q_4 + \right. \right. \\
& \left. - \frac{p_4}{q_1 p_2 - q_2 p_1} q_2 \sin q_4 \right) + \\
& + q_3 \left( q_1 \sin q_4 + \frac{p_4}{q_1 p_2 - q_2 p_1} q_2 \cos q_4 \right) . \\
& \left. . \frac{k^2 - p_4^2 - (q_2 p_3 - q_3 p_2)^2 \left( 1 - \frac{p_4^2}{(q_1 p_2 - q_2 p_1)^2} \right)}{p_4 (q_2 p_3 - q_3 p_2) \sqrt{1 - \frac{p_4^2}{(q_1 p_2 - q_2 p_1)^2}}} \right\}^{-\frac{1}{2}}.
\end{aligned}\right\} \tag{10}$$

Pohybové rovnice jsou pak

$$\dot{q}_i = \frac{\partial H_2}{\partial p_i}, \quad \dot{p} = -\frac{\partial H_2}{\partial q_i}, \quad (i = 1, 2, 3, 4).$$

Při tom ovšem $q_1, q_2, q_3, q_4, p_1, p_2, p_3, p_4$ zde se vyskytující nemají co činiti s proměnnými $q_1, q_2, q_3, \ldots, q_9, p_1, p_2, p_3, \ldots, p_9$ v odstavci I. této práce.

Konečně provedeme poslední kanonickou transformaci, jejíž vytvořující funkce jest[8])

$$\begin{aligned} V_3 &= (p_2 \sin Q_3 + p_1 \cos Q_3) \,.\, Q_1 \cos Q_2 + \\ &+ \sqrt{p_3^2 + (p_2 \cos Q_3 - p_1 \sin Q_3)^2} \,.\, Q_1 \sin Q_2 + p_4 Q_4. \end{aligned} \tag{11}$$

Transformační vzorce samy jsou pak dány vztahy

$$q_i = \frac{\partial V_3}{\partial p_i}, \quad P_i = \frac{\partial V_3}{\partial Q_i}; \quad (i = 1, 2, 3, 4),$$

t. j.

$$\left.\begin{aligned} q_1 &= Q_1 \cos Q_2 \cos Q_3 - \frac{p_2 \cos Q_3 - p_1 \sin Q_3}{\sqrt{p_3^2 + (p_2 \cos Q_3 - p_1 \sin Q_3)^2}} Q_1 \sin Q_2 \sin Q_3, \\ q_2 &= Q_1 \cos Q_2 \sin Q_3 + \frac{p_2 \cos Q_3 - p_1 \sin Q_3}{\sqrt{p_3^2 + (p_2 \cos Q_3 - p_1 \sin Q_3)^2}} Q_1 \sin Q_2 \cos Q_3, \\ q_3 &= \frac{p_3}{\sqrt{p_3^2 + (p_2 \cos Q_3 - p_1 \sin Q_3)^2}} Q_1 \sin Q_2, \\ q_4 &= Q_4, \\ P_1 &= (p_2 \sin Q_3 + p_1 \cos Q_3) \cos Q_2 + \\ &\qquad + \sqrt{p_3^2 + (p_2 \cos Q_3 - p_1 \sin Q_3)^2} \,.\, \sin Q_2, \\ P_2 &= -(p_2 \sin Q_3 + p_1 \cos Q_3) Q_1 \sin Q_2 + \\ &\qquad + \sqrt{p_3^2 + (p_2 \cos Q_3 - p_1 \sin Q_3)^2} \,.\, Q_1 \cos Q_2, \\ P_3 &= (p_2 \cos Q_3 - p_1 \sin Q_3) Q_1 \cos Q_2 + \\ &\qquad \frac{(p_2 \cos Q_3 - p_1 \sin Q_3)(p_2 \sin Q_3 + p_1 \cos Q_3)}{\sqrt{p_3^2 + (p_2 \cos Q_3 - p_1 \sin Q_3)^2}} \,.\, Q_1 \sin Q_2, \\ P_4 &= p_4. \end{aligned}\right\} \tag{12}$$

Způsobem velmi podobným jako bylo užito při systému transformačních vzorců (7) obdržíme zde definitivní transformační formule ve tvaru

[8]) Viz na př. E. T. Whittaker: Analytical Dynamics, 2nd ed., Cambridge 1917, § 160, p. 349, nebo též J. M. Burgers: Het atoomodel van Rutherford-Bohr (proefschrift, Leiden), Haarlem 1918, § 17, p. 80.





$$\left.\begin{aligned} p_1 &= \left(P_1 \cos Q_2 - \frac{P_2}{Q_1} \sin Q_2\right) \cos Q_3 + \\ &\qquad - \frac{P_3}{P_2} \left(P_1 \sin Q_2 + \frac{P_2}{Q_1} \cos Q_2\right) \sin Q_3, \\ p_2 &= \left(P_1 \cos Q_2 - \frac{P_2}{Q_1} \sin Q_2\right) \sin Q_3 + \\ &\qquad + \frac{P_3}{P_2} \left(P_1 \sin Q_2 + \frac{P_2}{Q_1} \cos Q_2\right) \cos Q_3, \\ p_3 &= \left(P_1 \sin Q_2 + \frac{P_2}{Q_1} \cos Q_2\right) \sqrt{1 - \frac{P_3^2}{P_2^2}}, \\ p_4 &= P_4, \\ q_1 &= Q_1 \left(\cos Q_2 \cos Q_3 - \frac{P_3}{P_2} \sin Q_2 \sin Q_3\right), \\ q_2 &= Q_1 \left(\cos Q_2 \sin Q_3 + \frac{P_3}{P_2} \sin Q_2 \cos Q_3\right), \\ q_3 &= Q_1 \sqrt{1 - \frac{P_3^2}{P_2^2}} \sin Q_2, \\ q_4 &= Q_4. \end{aligned}\right\} \tag{13}$$

Tato kanonická transformace definovaná vzorci (13) převádí součet $p_1^2 + p_2^2 + p_3^2$ ve výraz $P_1^2 + \frac{P_2^2}{Q_1^2}$ a součet $q_1^2 + q_2^2 + q_3^2$ ve tvar $Q_1^2$.

Dále $\quad q_1 p_2 - q_2 p_1 = P_3, \quad q_2 p_3 - q_3 p_2 = P_2 \sqrt{1 - \frac{P_3^2}{P_2^2}} \,.\, \sin Q_3.$

Tudíž Hamiltonova funkce $H_2$ se transformuje ve tvar

$$H_3 = \frac{1}{2m}\left(P_1^2 + \frac{P_2^2}{Q_1^2}\right) - \frac{e^2}{Q_1} Z^* = W, \tag{14}$$

kde

$$\left.\begin{aligned} Z^* = Z &\Bigg[\Bigg\{\left(\cos Q_2 \cos Q_3 - \frac{P_3}{P_2} \sin Q_2 \sin Q_3\right)^2 + \\ &\qquad + \frac{P_4^2}{P_3^2}\left(\cos Q_2 \sin Q_3 + \frac{P_3}{P_2} \sin Q_2 \cos Q_3\right)^2\Bigg\}^{-\frac{1}{2}} \\ &+ \left\{\left(1 - \frac{P_3^2}{P_2^2}\right) \sin^2 Q_2 + \left(\cos Q_2 \sin Q_3 + \frac{P_3}{P_2} \sin Q_2 \cos Q_3\right)^2 \left(1 - \frac{P_4^2}{P_3^2}\right)\right\}^{-\frac{1}{2}}\Bigg] \\ &- \Bigg[1 - 2\Bigg\{\frac{P_4}{P_3}\left(\cos Q_2 \sin Q_3 + \frac{P_3}{P_2} \sin Q_2 \cos Q_3\right)^2 \sin Q_4 + \\ &- \left(\cos Q_2 \cos Q_3 - \frac{P_3}{P_2} \sin Q_2 \sin Q_3\right)\Bigg(\cos Q_2 \sin Q_3 + \\ &\qquad + \frac{P_3}{P_2} \sin Q_2 \cos Q_3\Bigg) \cos Q_4\Bigg\} \sqrt{1 - \frac{P_4^2}{P_3^2}} \\ &+ \frac{k^2 - P_4^2 - P_2^2\left(1 - \frac{P_3^2}{P_2^2}\right)\left(1 - \frac{P_4^2}{P_3^2}\right) \sin^2 Q_3}{P_2 P_4 \sqrt{1 - \frac{P_4^2}{P_3^2}} \sin Q_3} \sin Q_2 \Bigg\{\Bigg(\cos Q_2 \cos Q_3 + \\ &- \frac{P_3}{P_2} \sin Q_2 \sin Q_3\Bigg) \sin Q_4 + \left(\cos Q_2 \sin Q_3 + \frac{P_3}{P_2} \sin Q_2 \cos Q_3\right) . \\ &\qquad . \frac{P_4}{P_3} \cos Q_4\Bigg\}\Bigg]^{-\frac{1}{2}}. \end{aligned}\right\} \tag{15}$$

Pohybové rovnice naší soustavy, representující atom helia, jsou dány H a m i l t o n o v ý m i kanonickými rovnicemi

$$\dot{Q}_i = \frac{\partial H_3}{\partial P_i}, \quad \dot{P}_i = -\frac{\partial H_3}{\partial Q_i}, \quad (i = 1, 2, 3, 4).$$

Od H a m i l t o n o v y funkce $H_1$, dané výrazem (5), byli bychom mohli přijíti ihned k funkci $H_3$, dané vzorci (14) a (15), kdybychom byli složili obě kanonické transformace (8), (9) a (13) v jedinou, jež by měla tvar:

$$\left.\begin{aligned}
p_x &= \left(P_1 \cos Q_2 - \frac{P_2}{Q_1} \sin Q_2\right)\left(\cos Q_3 \cos Q_4 - \frac{P_4}{P_3} \sin Q_3 \sin Q_4\right) + \\
&\quad - \frac{P_3}{P_2}\left(P_1 \sin Q_2 + \frac{P_2}{Q_1} \cos Q_2\right)\left(\sin Q_3 \cos Q_4 + \frac{P_4}{P_3} \cos Q_3 \sin Q_4\right), \\
p_y &= \left(P_1 \cos Q_2 - \frac{P_2}{Q_1} \sin Q_2\right)\left(\cos Q_3 \sin Q_4 + \frac{P_4}{P_3} \sin Q_3 \cos Q_4\right) + \\
&\quad - \frac{P_3}{P_2}\left(P_1 \sin Q_2 + \frac{P_2}{Q_1} \cos Q_2\right)\left(\sin Q_3 \sin Q_4 - \frac{P_4}{P_3} \cos Q_3 \cos Q_4\right), \\
p_z &= \left[P_1\left(\cos Q_2 \sin Q_3 + \frac{P_3}{P_2} \sin Q_2 \cos Q_3\right) + \right. \\
&\qquad \left. - \frac{P_2}{Q_1}\left(\sin Q_2 \sin Q_3 - \frac{P_3}{P_2} \cos Q_2 \cos Q_3\right)\right]\sqrt{1 - \frac{P_4^2}{P_3^2}}, \\
p_u &= \left[P_1 \sin Q_2 + \frac{P_2}{Q_1} \cos Q_2\right]\sqrt{1 - \frac{P_3^2}{P_2^2}}, \\
x &= Q_1\left\{\left(\cos Q_3 \cos Q_4 - \frac{P_4}{P_3} \sin Q_3 \sin Q_4\right) \cos Q_2 + \right. \\
&\qquad \left. - \frac{P_3}{P_2}\left(\sin Q_3 \cos Q_4 + \frac{P_4}{P_3} \cos Q_3 \sin Q_4\right) \sin Q_2\right\}, \\
y &= Q_1\left\{\left(\cos Q_3 \sin Q_4 + \frac{P_4}{P_3} \sin Q_3 \cos Q_4\right) \cos Q_2 + \right. \\
&\qquad \left. - \frac{P_3}{P_2}\left(\sin Q_3 \sin Q_4 - \frac{P_4}{P_3} \cos Q_3 \cos Q_4\right) \sin Q_2\right\}, \\
z &= Q_1\left(\cos Q_2 \sin Q_3 + \frac{P_3}{P_2} \sin Q_2 \cos Q_3\right)\sqrt{1 - \frac{P_4^2}{P_3^2}}, \\
u &= Q_1\sqrt{1 - \frac{P_3^2}{P_2^2}} \sin Q_2.
\end{aligned}\right\} \quad (16)$$

## III.

Vynecháme-li nyní pro zjednodušení index 3 u symbolu $H_3$ pro Hamiltonovu funkci (14), převedli jsme původní problém na systém kanonických rovnic 8. řádu

$$\dot{Q}_i = \frac{\partial H}{\partial P_i}, \quad \dot{P}_i = -\frac{\partial H}{\partial Q_i}, \quad (i = 1, 2, 3, 4), \tag{17}$$





kde

$$H = \frac{1}{2m}\left(P_1^2 + \frac{P_2^2}{Q_1^2}\right) - \frac{e^2 Z^*}{Q_1} = W. \tag{18}$$

Při tom

$$Z^* = Z^*\left(\frac{P_3}{P_2}, \frac{P_4}{P_2}, \frac{P_5}{P_2}, Q_2, Q_3, Q_4\right),$$

$$(P_5 = k = \text{konst. na čase nezávislá}), \tag{19}$$

jest homogenní funkce v impulsech $P_2$, $P_3$, $P_4$, $P_5 = k$ stupně nultého daná vzorcem (15).

*Tím jsme převedli uvažovaný problém na tvar do jisté míry analogický tvaru, se kterým se setkáváme při atomu vodíku,* pro nějž platí táž H a m i l t o n o v a funkce jako (18) s tím toliko rozdílem, že $Z^*$ se redukuje na číselnou konstantu $Z$ (atomové číslo, které u vodíku se rovná jednotce).

Vypišme obšírněji kanonické rovnice (17); obdržíme systém

$$\text{(20 a)} \quad \dot{Q}_1 = \frac{\partial H}{\partial P_1} = \frac{P_1}{m}, \qquad \dot{P}_1 = -\frac{\partial H}{\partial Q_1} = \frac{P_2^2}{m Q_1^3} - \frac{e^2 Z^*}{Q_1^2}, \quad \text{(20 a')}$$

$$\text{(20 b)} \quad \dot{Q}_2 = \frac{\partial H}{\partial P_2} = \frac{P_2}{m Q_1^2} - \frac{e^2}{Q_1}\frac{\partial Z^*}{\partial P_2}, \qquad \dot{P}_2 = -\frac{\partial H}{\partial Q_2} = \frac{e^2}{Q_1}\frac{\partial Z^*}{\partial Q_2}, \quad \text{(20 b')}$$

$$\text{(20 c)} \quad \dot{Q}_3 = \frac{\partial H}{\partial P_3} = -\frac{e^2}{Q_1}\frac{\partial Z^*}{\partial P_3}, \qquad \dot{P}_3 = -\frac{\partial H}{\partial Q_3} = \frac{e^2}{Q_1}\frac{\partial Z^*}{\partial Q_3}, \quad \text{(20 c')}$$

$$\text{(20 d)} \quad \dot{Q}_4 = \frac{\partial H}{\partial P_4} = -\frac{e^2}{Q_1}\frac{\partial Z^*}{\partial P_4}, \qquad \dot{P}_4 = -\frac{\partial H}{\partial Q_4} = \frac{e^2}{Q_1}\frac{\partial Z^*}{\partial Q_4}, \quad \text{(20 d')}$$

a vypočtěme časovou změnu funkce $Z^*$, t. j.

$$\begin{aligned}\frac{dZ^*}{dt} &= \frac{\partial Z^*}{\partial P_2}\dot{P}_2 + \frac{\partial Z^*}{\partial P_3}\dot{P}_3 + \frac{\partial Z^*}{\partial P_4}\dot{P}_4 + \frac{\partial Z^*}{\partial P_5}\dot{P}_5 + \frac{\partial Z^*}{\partial Q_2}\dot{Q}_2 + \\ &\quad + \frac{\partial Z^*}{\partial Q_3}\dot{Q}_3 + \frac{\partial Z^*}{\partial Q_4}\dot{Q}_4.\end{aligned} \tag{21}$$

Použijeme-li rovnic (20 *a*—*d*, 20 *a'*—*d'*) a té okolnosti, že $P_5 = \text{konst.}$ na čase nezávislá, obdržíme jednoduchý vztah

$$\frac{dZ^*}{dt} = \frac{P_2}{m Q_1^2}\frac{\partial Z^*}{\partial Q_2} = \frac{P_2 \dot{P}_2}{m e^2 Q_1}. \tag{22}$$

Z rovnice (18) obdržíme

$$\begin{aligned}\frac{dH}{dt} &= \frac{1}{m}\left(P_1 \dot{P}_1 + \frac{P_2 \dot{P}_2}{Q_1^2} - \frac{P_2^2 \dot{Q}_1}{Q_1^3}\right) + \frac{e^2 Z^*}{Q_1^2}\dot{Q}_1 + \\ &\quad - \frac{e^2}{Q_1}\frac{dZ^*}{dt} = \frac{dW}{dt} = 0,\end{aligned} \tag{23}$$

neboť $W$ jest konstanta úhrnné energie, na čase nezávislá. Vzhledem ke (22) zredukuje se poslední rovnice na tvar

$$\frac{1}{m}P_1 \dot{P}_1 - \left(\frac{P_2^2}{m Q_1^3} - \frac{e^2 Z^*}{Q_1^2}\right)\dot{Q}_1 = 0; \tag{24}$$

vyjádříme-li $P_1$ z rovnice (20 $a$) vztahem $P_1 = m\,\dot{Q}_1$ a dosadíme do (24), najdeme

$$\left(\dot{P}_1 - \frac{P_2^2}{m\,Q_1^3} + \frac{e^2 Z^*}{Q_1^2}\right)\dot{Q}_1 = 0, \tag{25}$$

Tedy jest buď

$$\dot{P}_1 = \frac{P_2^2}{m\,Q_1^3} - \frac{e^2 Z^*}{Q_1^2}, \tag{26}$$

což jest rovnice (20 $a'$) našeho kanonického systému, anebo

$$\dot{Q}_1 = 0, \tag{27}$$

což znamená

$$Q_1 = \textit{konst. na čase nezávislé} \tag{28}$$

a představuje „singulární" řešení daného kanonického systému. Tímto řešením se nyní budeme zabývati.

Ale i nyní, když položíme $Q_1 =$ konst., musí býti splněny kanonické rovnice (20 $a$—$d$, $a'$—$d'$). Rovnice (20 $a$) dává za supposice (28) vztah

$$\dot{Q}_1 = \frac{P_1}{m} = 0, \tag{29}$$

t. j.

$$P_1 = 0, \tag{30}$$

potom z rovnice (20 $a'$) najdeme

$$\dot{P}_1 = \frac{P_2^2}{m\,Q_1^3} - \frac{e^2 Z^*}{Q_1^2} = 0, \tag{31}$$

t. j. přihlédneme-li ještě k rov. (28), obdržíme

$$Q_1 = \frac{P_2^2}{m\,e^2 Z^*} = \text{konst. na čase nezávislé.} \tag{32}$$

Dosadíme-li (27), (29), (30), (31), (32) do kanonických rovnic (20 $a$—$d'$), budeme míti tento systém pohybových rovnic:

$$\text{(33 } a\text{)} \quad \dot{Q}_1 = 0, \qquad \dot{P}_1 = 0, \quad \text{(33 } a'\text{)}$$

$$\text{(33 } b\text{)} \quad \dot{Q}_2 = \frac{m\,e^4 Z^*}{P_2^2}\left(\frac{Z^*}{P_2} - \frac{\partial Z^*}{\partial P_2}\right), \qquad \dot{P}_2 = \frac{m\,e^4 Z^*}{P_2^2}\,\frac{\partial Z^*}{\partial Q_2}, \quad \text{(33 } b'\text{)}$$

$$\text{(33 } c\text{)} \quad \dot{Q}_3 = -\frac{m\,e^4 Z^*}{P_2^2}\,\frac{\partial Z^*}{\partial P_3}, \qquad \dot{P}_3 = \frac{m\,e^4 Z^*}{P_2^2}\,\frac{\partial Z^*}{\partial Q_3}, \quad \text{(33 } c'\text{)}$$

$$\text{(33 } d\text{)} \quad \dot{Q}_4 = -\frac{m\,e^4 Z^*}{P_2^2}\,\frac{\partial Z^*}{\partial P_4}, \qquad \dot{P}_4 = \frac{m\,e^4 Z^*}{P_2^2}\,\frac{\partial Z^*}{\partial Q_4}. \quad \text{(33 } d'\text{)}$$

Obdržíme tudíž výsledek právě takový, jako kdybychom do H a m i l t o n o v y funkce (18) dosadili (30) a (32) a z takto vzniklé nové H a m i l t o n o v y funkce

$$H' = -\frac{m\,e^4 Z^{*2}}{2\,P_2^2} = W = \text{konst. na čase nezávislé,} \tag{35}$$





odvodili pohybové rovnice pro náš „singulární" případ derivováním (jako kanonický systém 6. řádu)

$$\dot{Q}_i = \frac{\partial H'}{\partial P_i}, \quad \dot{P}_i = -\frac{\partial H'}{\partial Q_i}, \quad (i = 2,\ 3,\ 4). \tag{36}$$

Tyto rovnice souhlasí s rovnicemi (33 $b$—$d$, $b'$—$d'$), jak patrno též z toho, že

$$\frac{\partial H'}{\partial s} = \frac{\partial H}{\partial s} + \frac{\partial H}{\partial Q_1}\,\frac{\partial Q_1}{\partial s} = \frac{\partial H}{\partial s} - \dot{P}_1\,\frac{\partial Q_1}{\partial s} = \frac{\partial H}{\partial s}, \tag{37}$$

kde $s$ jest kterákoliv z veličin $P_2$, $P_3$, $P_4$, $Q_2$, $Q_3$, $Q_4$.

Dosazením za $Q_1$ z rovnice (32) do (22) najdeme v našem případě

$$\frac{d\,Z^*}{d\,t} = \frac{Z^*}{P_2}\,\dot{P}_2, \tag{38}$$

odkudž plyne

$$\frac{Z^*}{P_2} = \text{const. na čase nezávislé.} \tag{39}$$

Z této rovnice a z rovnice (32) pro $Q_1$ pak plyne, že *jak* $P_2$ *tak* $Z^*$ *jsou konstanty na čase nezávislé,* jak ostatně je ihned vidno porovnáním vztahů (32) a (35).

Poněvadž je tedy $P_2 =$ konst., musí býti $Q_2$ souřadnicí *cyklickou,* t. j. nesmí se v H a m i l t o n o v ě funkci, která slouží k tvoření kanonických rovnic pohybových, vyskytovati explicitně, čehož docílíme tím, že vztah

$$P_2 = \text{konst.} \tag{40}$$

derivujeme dle času:

$$\dot{P}_2 = \frac{m\,e^4 Z^*}{P_2^2}\,\frac{\partial Z^*}{\partial Q_2} = 0,$$

t. j. položíme

$$\frac{\partial Z^*}{\partial Q_2} = 0; \tag{41}$$

odtud vypočteme $Q_2$ jako funkci ostatních proměnných

$$Q_2 = Q_2\left(\frac{P_3}{P_2},\ \frac{P_4}{P_2},\ \frac{k}{P_2},\ Q_3,\ Q_4\right), \tag{42}$$

načež dosadíme za $Q_2$ do funkce $H'$ [viz (35)]. Tím obdržíme novou H a m i l t o n o v u funkci

$$H'' = -\frac{m\,e^4 Z_1^{*2}}{2\,P_2^2} = W = \text{konst.,} \tag{43}$$

kde

$$Z_1^* = Z_1^*\left(\frac{P_3}{P_2},\ \frac{P_4}{P_2},\ \frac{k}{P_2},\ Q_3,\ Q_4\right);$$

odtud pak plynou pohybové rovnice jakožto kanonický systém

(44 a) $$\dot{Q}_2 = \frac{\partial H''}{\partial P_2} = \frac{m\, e^4\, Z_1^*}{P_2^2}\left(\frac{Z_1^*}{P_2} - \frac{\partial Z_1^*}{\partial P_2}\right),$$

$$\dot{P}_2 = -\frac{\partial H''}{\partial Q_2} = 0, \qquad (44\,a')$$

(44 b) $$\dot{Q}_3 = \frac{\partial H''}{\partial P_3} = -\frac{m\, e^4\, Z_1^*}{P_2^2}\,\frac{\partial Z_1^*}{\partial P_3},$$

$$\dot{P}_3 = -\frac{\partial H''}{\partial Q_3} = \frac{m\, e^4\, Z_1^*}{P_2^2}\,\frac{\partial Z_1^*}{\partial Q_3}, \qquad (44\,b')$$

(44 c) $$\dot{Q}_4 = \frac{\partial H''}{\partial P_4} = -\frac{m\, e^4\, Z_1^*}{P_2^2}\,\frac{\partial Z_1^*}{\partial P_4},$$

$$\dot{P}_4 = -\frac{\partial H''}{\partial Q_4} = \frac{m\, e^4\, Z_1^*}{P_2^2}\,\frac{\partial Z_1^*}{\partial Q_4}. \qquad (44\,c')$$

Při tom $Z_1^*$ jest konstanta na čase nezávislá, tedy

$$\frac{d\,Z_1^*}{d\,t} = 0.$$

Tyto rovnice (44 $a$—$c$, $a'$—$c'$) jsou v souhlasu s rovnicemi (33 $a$—$d$, $a'$—$d'$) za podmínky (40), neboť

$$\frac{\partial H''}{\partial s} = \frac{\partial H'}{\partial s} + \frac{\partial H'}{\partial Q_2}\,\frac{\partial Q_2}{\partial s} = \frac{\partial H'}{\partial s} - \dot{P}_2\,\frac{\partial Q_2}{\partial s} = \frac{\partial H'}{\partial s}, \qquad (45)$$

kde $s$ jest kterákoliv z veličin $P_2$, $P_3$, $P_4$, $Q_3$, $Q_4$.

IV.

Dříve, než postoupíme dále, provedeme si jednoduchý příklad, vztahující se k atomu vodíku pro případ kruhové dráhy elektronu obíhajícího kolem vodíkového jádra.

H a m i l t o n o v a funkce rovinného problému dvou těles v případě atomu vodíku zní, jak známo,

$$H = \frac{1}{2\,m}\,(p_x^2 + p_y^2) - \frac{e^2\,Z}{\sqrt{x^2 + y^2}} = W = \text{konst. úhrnné energie.} \qquad (46)$$

Při tom $x$, $y$ jsou souřadnice okamžité polohy výše zmíněného elektronu. Pohybové rovnice tohoto elektronu jsou pak

$$\dot{x} = \frac{\partial H}{\partial p_x};\quad \dot{p} = -\frac{\partial H}{\partial x},$$

$$\dot{y} = \frac{\partial H}{\partial p_z};\quad \dot{p} = -\frac{\partial H}{\partial y}.$$





Nyní provedeme kanonickou transformaci, jejíž vytvořující funkce jest

$$V_4 = p_x\,\sqrt{Q_2^2 - Q_1^2} + p_y\,Q_1; \qquad (47)$$

tudíž

$$x = \frac{\partial V_4}{\partial p_x} = \sqrt{Q_2^2 - Q_1^2};\quad P_1 = \frac{\partial V_4}{\partial Q_1} = -p_x\,\frac{Q_1}{\sqrt{Q_2^2 - Q_1^2}} + p_y,$$

$$y = \frac{\partial V_4}{\partial p_y} = Q_1;\quad P_2 = \frac{\partial V_4}{\partial Q_2} = p_x\,\frac{Q_2}{\sqrt{Q_2^2 - Q_1^2}}.$$

Odtud plynou transformační vzorce

$$\begin{aligned} p_x &= P_2\sqrt{1 - \frac{Q_1^2}{Q_2^2}}; & x &= Q_2\sqrt{1 - \frac{Q_1^2}{Q_2^2}}, \\ p_y &= P_1 + P_2\,\frac{Q_1}{Q_2}; & y &= Q_1. \end{aligned} \qquad (48)$$

Tedy H a m i l t o n o v a funkce $H$ daná rovnicí (46), přejde po této transformaci ve tvar

$$H' = \frac{1}{2\,m}\left(P_1^2 + P_2^2 + 2\,P_1\,P_2\,\frac{Q_1}{Q_2}\right) - \frac{e^2\,Z}{Q_2} = W, \quad (Q_2 > 0) \qquad (49)$$

a pohybové rovnice pak znějí

(50 a) $$\dot{Q}_1 = \frac{\partial H'}{\partial P_1} = \frac{1}{m}\left(P_1 + P_2\,\frac{Q_1}{Q_2}\right);$$

$$\dot{P}_1 = -\frac{\partial H'}{\partial Q_1} = -\frac{P_1 P_2}{m\,Q_2}, \qquad (50\,a')$$

(50 b) $$\dot{Q}_2 = \frac{\partial H'}{\partial P_2} = \frac{1}{m}\left(P_2 + P_1\,\frac{Q_1}{Q_2}\right);$$

$$\dot{P}_2 = -\frac{\partial H'}{\partial Q_2} = -\frac{1}{Q_2^2}\left(\frac{P_1\,P_2\,Q_1}{m} - e^2\,Z\right). \qquad (50\,b')$$

Jak známo, lze vyhověti danému problému také předpokladem, že elektron obíhající kolem jádra opisuje kružnici, t. j. tím, že položíme

$$Q_2 = \text{konst.} \qquad (51)$$

Pak

$$\dot{Q}_2 = 0,$$

tedy

$$0 = \frac{1}{m}\left(P_2 + P_1\,\frac{Q_1}{Q_2}\right),$$

odkudž

$$P_2 = -P_1\,\frac{Q_1}{Q_2}. \qquad (52)$$

Dosadíme-li za $P_2$ hodnotu z rovnice (52) plynoucí do H a m i l t o n o v y funkce $H'$ [viz (49)], obdržíme novou H a m i l t o n o v u funkci

$$H'' = \frac{1}{2\,m}\,P_1^2\left(1 - \frac{Q_1^2}{Q_2^2}\right) - \frac{e^2\,Z}{Q_2} = W, \qquad (53)$$

z níž plynou pohybové rovnice obvyklými procesy derivačními ve tvaru

$$\dot{Q}_i = \frac{\partial H''}{\partial P_i}, \quad \dot{P}_i = -\frac{\partial H''}{\partial Q_i}, \quad (i = 1,\ 2),$$

neboť

$$\frac{\partial H''}{\partial s} = \frac{\partial H'}{\partial s} + \frac{\partial H'}{\partial P_2}\frac{\partial P_2}{\partial s} = \frac{\partial H'}{\partial s} + \dot{Q}_2 \frac{\partial P_2}{\partial s} = \frac{\partial H'}{\partial s}, \tag{54}$$

kde $s$ jest kterákoliv z veličin $Q_1$, $Q_2$, $P_1$. Obšírněji vypsány pohybové rovnice znějí

(55 a) $$\dot{Q}_1 = \frac{P_1}{m}\left(1 - \frac{Q_1^2}{Q_2^2}\right); \qquad \dot{P}_1 = \frac{P_1^2}{m}\frac{Q_1}{Q_2},$$ (55 a')

(55 b) $$\dot{Q}_2 = 0; \qquad \dot{P}_2 = -\frac{P_1^2 Q_1^2}{m Q_2^3} - \frac{e^2 Z}{Q_2^2}.$$ (55 b')

Avšak z rovnice (52) derivováním dle času plyne vztah

$$P_1 \dot{Q}_1 + \dot{P}_1 Q_1 + \dot{P}_2 Q_2 = 0, \tag{56}$$

čili po dosazení za $\dot{Q}_1$, $\dot{P}_1$, $\dot{P}_2$ z pohybových rovnic (55 $a$—$b'$)

$$\frac{P_1^2}{m}\left(1 - \frac{Q_1^2}{Q_2^2}\right) - \frac{e^2 Z}{Q_2} = 0, \tag{57}$$

což však není nic jiného než známá věta, že v případě kruhové dráhy elektronu jest kinetická energie jeho rovna záporné polovině jeho potenciální energie [stačí si povšimnouti funkce $H''$ dané rovnicí (53)]. A tak jest viděti, že konstanta úhrnné energie $W$ jest

$$W = -\frac{e^2 Z}{2 Q_2}. \tag{58}$$

Z rovnice (57) plyne

$$\frac{1}{Q_2} = \frac{1}{2 P_1^2 Q_1^2}\left(-m e^2 Z + \sqrt{m^2 e^4 Z^2 + 4 P_1^4 Q_1^2}\right), \tag{59}$$

kdež za odmocninu nutno bráti její absolutní hodnotu, neboť $Q_2 > 0$. Jest patrno, že z rovnice (53) jest nutno $Q_2$ pomocí posledního vztahu (59) odstraniti, avšak současně jest jasno, že dosazením za $Q_2$ z rovnice (59) do rovnice (53) *neobdržíme* z dosavadní Hamiltonovy funkce $H''$ snad novou Hamiltonovu funkci

$$H''' = -\frac{e^2 Z}{4 P_1^2 Q_1^2}\left(-m e^2 Z + \sqrt{m^2 e^4 Z^2 + 4 P_1^4 Q_1^2}\right) = W, \tag{60}$$

z níž bychom mohli obvyklými derivačními procesy odvoditi pohybové rovnice, neboť

$$\frac{\partial H'''}{\partial s} = \frac{\partial H''}{\partial s} + \frac{\partial H''}{\partial Q_2}\frac{\partial Q_2}{\partial s} \neq \frac{\partial H''}{\partial s}. \tag{61}$$

kde $s$ jest kterákoliv z veličin $P_1$, $Q_1$.





Avšak přes to, že neznáme nyní Hamiltonovu funkci příslušnou k pohybovým rovnicím uvažovaného elektronu, které vzniknou z rovnic (55 $a$—$b'$), když do nich dosadíme za $Q_2$ hodnotu danou rovnicí (59), můžeme přece v řešení pokračovati dále, a to tak, že do (58) dosadíme za $Q_2$ hodnotu plynoucí z (59), čímž obdržíme konstantu úhrnné energie ve tvaru

$$W = -\frac{e^2 Z}{4 P_1^2 Q_1^2}\left(-m e^2 Z + \sqrt{m^2 e^4 Z^2 + 4 P_1^4 Q_1^2}\right), \tag{62}$$

která ovšem nyní nepředstavuje Hamiltonovu funkci uvažovaného problému.

Odtud plyne

$$\left\{\frac{4 P_1^2 Q_1^2}{e^2 Z}(-W) + m e^2 Z\right\}^2 = m^2 e^4 Z^2 + 4 P_1^4 Q_1^2,$$

čili

$$4 P_1^2 Q_1^2 \left\{\frac{4 W^2}{e^4 Z^2} P_1^2 Q_1^2 + 2 m (-W) - P_1^2\right\} = 0$$

a odtud

$$P_1 = \sqrt{\frac{2 m (-W)}{1 - \frac{4 W^2}{e^4 Z^2} Q_1^2}}. \tag{63}$$

Nyní vypočteme fázový integrál

$$J = \oint P_1 \, d Q_1 = \sqrt{2 m (-W)} \oint \frac{d Q_1}{\sqrt{1 - \frac{4 W^2}{e^4 Z^2} Q_1^2}}. \tag{64}$$

Snadno nahlédneme, že

$$\oint \frac{d x}{\sqrt{1 - \left(\frac{x}{\alpha}\right)^2}} = 2 \pi |\alpha|;$$

tudíž (64) přejde ve tvar

$$J = 2 \pi \cdot \frac{e^2 Z}{2 |W|} \cdot \sqrt{2 m (-W)}, \tag{65}$$

odkudž plyne úhrnná energie

$$W = -\frac{2 \pi^2 m e^4 Z^2}{J^2}, \tag{66}$$

což jest známá správná hodnota pro energii vodíkového atomu[9]).

## V.

Nyní se můžeme vrátiti k původnímu problému. Z rovnice (42)

$$Q_2 = Q_2\left(\frac{P_3}{P_2}, \frac{P_4}{P_2}, \frac{P_5}{P_2}, Q_3, Q_4\right), \tag{42}$$

$P_5 = k =$ konst. na čase nezávislé,

[9]) Viz na př. M. Born, l. c., p. 159, form. (3).

plyne derivováním dle času vztah

$$\dot{Q}_2 = \frac{\partial Q_2}{\partial P_2}\dot{P}_2 + \frac{\partial Q_2}{\partial P_3}\dot{P}_3 + \frac{\partial Q_2}{\partial P_4}\dot{P}_4 + \frac{\partial Q_2}{\partial P_5}\dot{P}_5 + \frac{\partial Q_2}{\partial Q_3}\dot{Q}_3 + \frac{\partial Q_2}{\partial Q_4}\dot{Q}_4. \tag{67}$$

Poněvadž $P_2$ [viz rovnici (40)] a $P_5 = k$ jsou konstanty na čase nezávislé, zmizí první a čtvrtý člen na pravé straně poslední rovnice (67); dosadíme-li ještě za $\dot{Q}_2$, $\dot{P}_3$, $\dot{P}_4$, $\dot{Q}_3$, $\dot{Q}_4$ příslušné výrazy z pohybových rovnic (44 $a$—$c'$), obdržíme z rovnice (67) relaci mezi $P_2$, $P_3$, $P_4$, $P_5$, $Q_3$, $Q_4$, t. j.

$$\Phi\left(\frac{P_3}{P_2}, \frac{P_4}{P_2}, \frac{P_5}{P_2}, Q_3, Q_4\right) = 0. \tag{68}$$

Jest patrno, že jednu z obou obecných souřadnic (úhlů) $Q_3$, $Q_4$ lze pomocí tohoto vztahu eliminovati z výrazu pro konstantu úhrnné energie $W$ danou vzorcem (43); avšak současně — zcela podobně jako v předešlém příkladě (v odstavci IV.) kruhových drah elektronu obíhajícího kolem vodíkového jádra — jest jasno, že dosazením za $Q_4$ resp. $Q_3$ z rovnice (68) do rovnice (43) *neobdržíme* z dosavadní H a m i l t o n o v y funkce $H''$ [viz rovnici (43)] novou H a m i l t o n o v u funkci

$$H''' = -\frac{m e^2 Z_2^*}{2 P_2^2} = W, \tag{69}$$

kde funkce

$$Z_2^* = Z_2^*\left(\frac{P_3}{P_2}, \frac{P_4}{P_2}, \frac{P_5}{P_2}, Q_3\right), \quad \text{resp.}$$
$$Z_2^* = Z_{II}^*\left(\frac{P_3}{P_2}, \frac{P_4}{P_2}, \frac{P_5}{P_2}, Q_4\right), \tag{70}$$

vznikla dosazením za $Q_4$ resp. $Q_3$ z rovnice (68) do funkce

$$Z_1^* = Z_1^*\left(\frac{P_3}{P_2}, \frac{P_4}{P_2}, \frac{P_5}{P_2}, Q_3, Q_4\right),$$

neboť

$$\frac{\partial H'''}{\partial s} = \frac{\partial H''}{\partial s} + \frac{\partial H''}{\partial Q_4}\frac{\partial Q_4}{\partial s} \neq \frac{\partial H''}{\partial s} \quad \text{resp.}$$
$$\frac{\partial H'''}{\partial s} = \frac{\partial H''}{\partial s} + \frac{\partial H''}{\partial Q_3}\frac{\partial Q_3}{\partial s} \neq \frac{\partial H''}{\partial s}, \tag{71}$$

kde $s$ jest kterákoliv z veličin $P_2$, $P_3$, $P_4$, $Q_3$, resp. $P_2$, $P_3$, $P_4$, $Q_4$.

Avšak přes to, že neznáme nyní H a m i l t o n o v u funkci příslušnou k pohybovým rovnicím uvažovaného problému, které vzniknou z rovnic (44 $a$—$c'$), když do nich dosadíme za $Q_4$ resp. $Q_3$ z rovnice (68), můžeme přece v řešení pokračovati dále a to tak, že do výrazu pro konstantu úhrnné energie (43)

$$W = -\frac{m e^4 Z_1^{*2}}{2 P_2^2}, \tag{43'}$$





dosadíme za $Q_4$ resp. $Q_3$ z rovnice (68), čímž obdržíme

$$W = -\frac{m e^4 Z_2^{*2}}{2 P_2^2}, \tag{72}$$

kde $Z_2^*$ jest dáno vzorci (70).

Tudíž lze nyní, aspoň principielně, vypočítati

$$\frac{P_3}{P_2} = f\left(-2 W P_2^2, \frac{P_4}{P_2}, \frac{P_5}{P_2}, Q_3\right) \text{ resp.}$$
$$\frac{P_4}{P_2} = g\left(-2 W P_2^2, \frac{P_3}{P_2}, \frac{P_5}{P_2}, Q_4\right). \tag{73}$$

Položíme-li

$$P_i = \frac{\partial S}{\partial Q_i}, \quad (i = 2, 3, 4, 5), \tag{74}$$

lze rovnici (72) separovati a nalézti

$$J_3 = \oint P_3\, d Q_3 = \oint \frac{\partial S}{\partial Q_3}\, d Q_3 = \oint \frac{d S_3}{d Q_3}\, d Q_3 \quad \text{resp.}$$
$$J_4 = \oint P_4\, d Q_4 = \oint \frac{\partial S}{\partial Q_4}\, d Q_4 = \oint \frac{d S_4}{d Q_4}\, d Q_4, \tag{75}$$

kde za $P_3$ resp. $P_4$ jest dosaditi výrazy (73) a kde

$$S = S_2(Q_2) + S_3(Q_3) + S_4(Q_4) + S_5(Q_5); \tag{76}$$

při tom ovšem se považuje $Q_4$ resp. $Q_3$ za souřadnici cyklickou, k níž přísluší kanonicky sdružený *konstantní* impuls $P_4$ resp. $P_3$. (Avšak třeba že se tu považuje $Q_4$ resp. $Q_3$ za souřadnici cyklickou, není možno vzhledem k tomu, co bylo řečeno o neexistenci H a m i l t o n o v y funkce $H'''$ [viz rovnici (69)], položiti

$$\frac{\partial H''}{\partial Q_4} = 0 \quad \text{resp.} \quad \frac{\partial H''}{\partial Q_3} = 0.)$$

Z rovnic (75) lze pak najíti $W$ jako funkci $J_3$ resp. $J_4$; při tom ovšem $W$ závisí ještě na $P_2$, $P_4$, $P_5$ resp. $P_2$, $P_3$, $P_5$.

Tím tedy jest ukázáno, že principielně jest možno vyjádřiti úhrnnou energii neutrálního heliového atomu ve tvaru

$$W = -\frac{m e^4 \widehat{Z}^2}{2 P_2^2}, \tag{77}$$

kde

$$\widehat{Z} = \widehat{Z}\left(\frac{J_3}{P_2}, \frac{P_4}{P_2}, \frac{P_5}{P_2}\right) \text{ resp. } \widehat{Z} = \widehat{Z}'\left(\frac{P_3}{P_2}, \frac{J_4}{P_2}, \frac{P_5}{P_2}\right). \tag{78}$$

Dle kvantových pravidel dosud užívaných jest pak třeba položiti[9])

$$P_i = \frac{n_i h}{2\pi}, \quad J_k = n_k' h, \quad (i = 2, 3, 4, 5; \; k = 3, 4). \tag{79}$$

Přešli jsme tudíž od původních proměnných k t. zv. účinnostním proměnným

resp.

$$\left.\begin{aligned} &J_2 = 2\pi P_2, \quad J_3, \quad J_4 = 2\pi P_4, \quad J_5 = 2\pi P_5, \\ &J_2 = 2\pi P_2, \quad J_3 = 2\pi P_3, \quad J_4, \ J_5 = 2\pi P_5, \end{aligned}\right\} \tag{80}$$

pomocí nichž se dá vyjádřiti úhrnná energie heliového atomu ve tvaru

$$W = -\frac{2\pi^2 e^4 \widehat{Z}^2}{J_2^{\,2}}, \tag{81}$$

kde

$$\widehat{Z} = \widehat{Z}\left(\frac{J_3}{J_2}, \ \frac{J_4}{J_2}, \ \frac{J_5}{J_2}\right) \text{ resp. } \widehat{Z} = \widehat{Z}'\left(\frac{J_3}{J_2}, \ \frac{J_4}{J_2}, \ \frac{J_5}{J_2}\right). \tag{82}$$

Za každou účinnostní proměnnou $J_k$ = konst. sluší položiti nakonec $n_k h$, $(k = 2, 3, 4, 5)$.[10])

## VI.

Příslušné t. zv. úhlové proměnné kanonicky sdružené k účinnostním proměnným $J_k$ označme $w_k$. Dají-li se takovéto proměnné $J_k$, $w_k$ nalézti, dá se úhrnná energie, jak známo, vyjádřiti ve tvaru[11])

$$W = \sum_{k=2}^{5} J_k w_k - \overline{L}, \tag{83}$$

kde $\overline{L}$ značí časový střed L a g r a n g e o v y funkce

$$L = T - V, \tag{84}$$

t. j. rozdílu mezi energií kinetickou $T$ a potenciální $V$. Při tom $W$ i $\overline{L}$ jsou vyjádřeny jakožto funkce pouze argumentů $J_k$ (a nikoli též proměnných $w_k$), dále[12])

$$\dot{w}_k = \frac{\partial W}{\partial J_k} = \nu_k, \quad \dot{J}_k = 0. \tag{85}$$

Dle známé věty[13]) jest — platí-li pro silové pole zákon C o u l o m b ů v — časový střed energie kinetické roven záporné polovině energie potenciální, t. j.

$$\overline{T} = -\tfrac{1}{2}\overline{V}. \tag{86}$$

Poněvadž jest

$$T + V = W, \tag{87}$$

bude

$$\overline{T} + \overline{V} = \overline{W} = W \tag{88}$$

a tudíž

$$\overline{W} = \tfrac{1}{2}\overline{V} = -\overline{T} \tag{89}$$

a

$$\overline{L} = \overline{T} - \overline{V} = -\tfrac{3}{2}\overline{V} = 3\overline{T} = -3W. \tag{90}$$

Dosadíme-li do (83) za $\overline{L}$ z rovnice (90), obdržíme[14])

$$\sum_{k=2}^{5} J_k \frac{\partial W}{\partial J_k} = -2W. \tag{91}$$

To lze pokládati za parciální diferenciální rovnici (1. řádu) pro $W$, která se řeší pomocí tohoto systému obyčejných rovnic diferenciálních:

$$\frac{dJ_2}{J_2} = \frac{dJ_3}{J_3} = \frac{dJ_4}{J_4} = \frac{dJ}{J_5} = \frac{dW}{-2W}, \tag{92}$$

jehož t. zv. první integrály jsou

$$\frac{J_3}{J_2} = \text{const.}, \quad \frac{J_4}{J_2} = \text{const.}, \quad \frac{J_5}{J_2} = \text{const.}, \quad W J_2^{\,2} = \text{const.}, \tag{93}$$

tak že obecný integrál rovnice (91) zní

$$W J_2^{\,2} = F\left(\frac{J_3}{J_2}, \ \frac{J_4}{J_2}, \ \frac{J_5}{J_2}\right) \tag{94}$$

čili

$$W = \frac{1}{J_2^{\,2}} F\left(\frac{J_3}{J_2}, \ \frac{J_4}{J_2}, \ \frac{J_5}{J_2}\right), \tag{95}$$

což jest tvar zcela takový jako jsme nalezli v rovnici (81) a (82).

Z rovnice (90) plyne

$$W = -\tfrac{1}{3}\overline{L}, \tag{96}$$

což dosazeno do (91) dává vzhledem k (85)

$$\sum_{k=2}^{5} J_k \nu_k = \tfrac{2}{3}\overline{L}. \tag{97}$$

---

[10]) Zde značí $h$ P l a n c k o v o účinnostní kvantum ($h$ = 6·55. $10^{-27}$. erg × sec), $n_i$, $n'_k$, $n_k$ celá čísla (t. zv. kvantová čísla).

[11]) Viz na př. E. T. W h i t t a k e r, Analytical Dynamics, § 41, § 109. — A. S o m m e r f e l d, Atombau u. Spektrallinien, 4. Aufl. (1924), Zusatz 4, p 766,- form. (13a). — Viz též V. T r k a l, Časopis pro pěst. mat. a fys. *51*, p. 104, form. (17), (1922). — Proceedings of the Cambridge Philosophical Society, *21*, (1923) p. 81, form. (3).

[12]) Viz na př. J. M. B u r g e r s, Het atoommodel van Rutherford-Bohr. (Proefschrift Leiden), l. c., § 10, p. 43, rov. (5). — N. B o h r, On the Quantum Theory of Line-Spectra. Part I. (D. Kgl. Danske Vidensk. Selsk. Skrifter, Naturvidensk. og Mathem. Afd., 8. Raekke, IV. 1), Kobenhavn 1918. Separate Copy, p. 29, rov. (5*). — N. B o h r (P. H e r t z). Über die Quantentheorie der Linienspektren. Braunschweig 1923, p. 40, rov. (5*).

[13]) Viz na př. A. S o m m e r f e l d, Atombau u. Spektrallinien, 4. Aufl. (1924), Zusatz 5, p. 771, 772. — M. B o r n, Vorlesungen über Atommechanik, p. 165.

[14]) Povšimneme-li si rovnice (89), přejde (91) ve tvar

$$\sum_{k=2}^{5} J_k \frac{\partial W}{\partial J_k} = \sum_{k=2}^{5} J_k \nu_k = 2\overline{T},$$

jenž platí obecněji. Viz J. M. B u r g e r s, l. c. § 16, p. 72, form. (I), — M. B o r n, l. c., p. 94, form. (18).

Avšak $W$ jakožto funkce pouze $J_k$, $(k = 2, 3, 4, 5)$, dává

$$d\,W = \sum_{k=2}^{5} \frac{\partial W}{\partial J_k} d\,J_k = \sum_{k=2}^{5} \boldsymbol{v}_k\, d\,J_k \tag{98}$$

a tak vzhledem k (96) máme

$$-\tfrac{1}{3}\, d\,\overline{L} = \sum_{k=2}^{5} \boldsymbol{v}_k\, d\,J_k. \tag{99}$$

Diferencováním rovnice (97) obdržíme

$$\tfrac{2}{3}\, d\,\overline{L} = \sum_{k=2}^{5} J_k\, d\,\boldsymbol{v}_k + \sum_{k=2}^{5} \boldsymbol{v}_k\, d\,J_k\,; \tag{100}$$

odečteme-li (99) od (100), najdeme

$$d\,\overline{L} = \sum_{k=2}^{5} J_k\, d\,\boldsymbol{v}_k, \tag{101}$$

takže, pokládáme-li $\overline{L}$ za funkci pouze veličin $\boldsymbol{v}_k$, obdržíme [15])

$$J_k = \frac{\partial \overline{L}}{\partial \boldsymbol{v}_k}, \tag{102}$$

při čemž ovšem $\overline{L}$ musí býti vyjádřeno jakožto funkce pouze veličin $\boldsymbol{v}_k$ (a nikoli argumentů $J_k$); tato formule jest jakýmsi protějškem formule (85)

$$\boldsymbol{v}_k = \frac{\partial W}{\partial J_k}. \tag{85}$$

Vzhledem k (90) lze též psáti

$$J_k = -3\frac{\partial W'}{\partial \boldsymbol{v}_k}, \tag{103}$$

při čemž akcent u $W$ má upozorňovati na to, že úhrnná energie $W$ musí býti ve formuli (103) vyjádřena jakožto funkce pouze veličin $\boldsymbol{v}_k$ (a nikoli $J_k$).

## VII.

Tedy výsledek jest tento:

„Singulární" případ problému tří těles typu $H\,e$ charakterisovaný tím, že $Q_1 = \text{konst.}$, t. j. že součet čtverců vzdáleností obou elektronů od jádra jest v každém okamžiku konstantou na čase nezávislou, dává pro úhrnnou energii atomu heliového hodnotu

$$W = -\frac{2\,\pi^2 e^4 \widehat{Z}^2}{J_2^2}\Big], \tag{81}$$

[15]) P o z n á m k a  p ř i  k o r e k t u ř e (v červenci 1926). Vztah (102) odvozený zde pro případ C o u l o m b o v a silového pole platí obecně, jak jsem ukázal ve stati: Analogon funkce Lagrangeovy Hamiltonovu pro funkci, závisející jedině na „účinnostních konstantách" (Časopis pro pěst. mat. a fys., *55*, 343—351, 1926).





kde

$$\widehat{Z} = \widehat{Z}\left(\frac{J_3}{J_2}, \frac{J_4}{J_2}, \frac{J_5}{J_2}\right) \text{ resp. } \widehat{Z} = \widehat{Z}'\left(\frac{J_3}{J_2}, \frac{J_4}{J_2}, \frac{J_5}{J_2}\right), \quad J_k = n_k\, h, \quad (k = 2, 3, 4, 5). \tag{82}$$

Porovnáme-li (81) s obdobným výsledkem pro vodík, kterýžto se liší od (81) pouze tím, že místo $\widehat{Z}$ nastoupí číselná konstanta $Z = 1$ a položíme-li $J_2 = n_2\, h$, obdržíme pro úhrnnou energii vodíkového atomu tutéž kvantovou hodnotu v „singulárním" případě (který odpovídá kruhové dráze elektronu) jako v obecném případě, kdy elektron vodíkového atomu obíhá kolem jádra v elipse.

Není tudíž vyloučeno, že výraz (81) pro úhrnnou energii heliového atomu mohl by dáti uspokojivou hodnotu, s experimentálními výsledky shodnou; k tomu by ovšem bylo nutno nejprve *skutečně provésti* derivaci funkce $Z^*$ [viz vztah (15)] dle proměnné $Q_2$ a výsledek položiti roven nule; z takto obdržené rovnice pak vypočítati $Q_2$ jako funkci ostatních proměnných, jak je to naznačeno v rovnici (42), potom dosaditi do $Z^*$ v rovnici (15) za $Q_2$, čímž bychom obdrželi $Z_1^*$, a pak *skutečně provésti* všechny ty operace, které byly vylíčeny v odst. V. Při tom však již velmi brzo narazíme, jak ihned patrno, na značné obtíže početní, tak že není vyloučeno, že bude nutno sáhnouti asi k nějaké vhodné aproximaci. Definitivně rozhodnouti o tom, zda tento „singulární" případ dává výsledky shodné se skutečností, bude možno ovšem teprve tehda, až se podaří zdolati právě uvedené obtíže početní.

Konečně sluší poznamenati, že ty tři kanonické transformace uvedené v odst. II. této práce nejsou jediné, které převádějí původní H a m i l t o n o v u funkci na tvar

$$H = \frac{1}{2\,m}\left(P_1^2 + \frac{P_2^2}{Q_1^2}\right) - \frac{e^2}{Q_1} F\left(\frac{P_3}{P_2}, \frac{P_4}{P_2}, \frac{k}{P_2}, Q_2, Q_3, Q_4\right);$$

mnohé z nich na př. plynou permutováním obecných souřadnic $x, y, z, u$ (a příslušných k nim obecných impulsů $p_x, p_y, p_z, p_u$) mezi sebou.

*V lednu 1926.*

*Ústav pro teoretickou fysiku Karlovy university v Praze.*