Druck von Friedr. Vieweg & Sohn Akt.-Ges., Braunschweig.

ZEITSCHRIFT FÜR PHYSIK

HERAUSGEGEBEN UNTER MITWIRKUNG
DER
DEUTSCHEN PHYSIKALISCHEN GESELLSCHAFT
VON
KARL SCHEEL

Sonderabdruck Band 36, Heft 3

Viktor Trkal

Zur Dynamik des Heliumatoms

VERLAG VON JULIUS SPRINGER, BERLIN
1926

Die

Zeitschrift für Physik

erscheint zwanglos in einzelnen Heften, die zu Bänden von 60 Bogen vereinigt werden.

Die Zeitschrift für Physik ist durch jede Buchhandlung sowie durch die Verlagsbuchhandlung Julius Springer, Berlin W 9, Linkstr. 23/24 zu beziehen. Mitglieder der Deutschen Physikalischen Gesellschaft haben Anspruch auf einen Vorzugspreis bei unmittelbarem Bezuge vom Verlage.

Die Verfasser erhalten von Arbeiten bis zu $1^{1}/_{2}$ Druckbogen Umfang 100 Sonderabdrucke, von größeren Arbeiten 50 Sonderabdrucke kostenfrei, weitere gegen Berechnung.

Manuskriptsendungen sind zu richten an Herrn **Geh. Reg.=Rat Professor Dr. Karl Scheel, Berlin=Dahlem, Werderstr. 28.**

36. Band. **Inhalt.** **3. Heft.**

Zur Dynamik des Heliumatoms [1]).

Von **Viktor Trkal** in Prag.

(Eingegangen am 30. Januar 1926.)

Es wird versucht, das Problem des Heliumatoms in Analogie zu dem des Wasserstoffatoms für einen „singulären“ Fall ($Q_1 =$ konst) (Bedeutung bei He: Summe der Entfernungsquadrate der Elektronen vom Kern ist konstant; bei H: Kreisbahn des Elektrons) zu behandeln. Die Hamiltonsche Funktion des Dreikörperproblems vom He-Typus wird „wasserstoffähnlich“ gemacht [Gleichungen (1), (2), (1a)]. Durch das Verschwinden der zeitlichen Änderung der Hamiltonschen Funktion (wegen Energiekonstanz) wird mit Rücksicht auf sieben (von acht) Bewegungsgleichungen der Ansatz des „singulären“ Falles $Q_1 =$ konst nahegelegt [Gleichungen (6), (7)]. Es wird gezeigt, daß für diesen Fall die Energie des Heliumatoms $W = -2\pi^2 m e^4 \hat{Z}^2/J_2^2$, wo $\hat{Z}$ eine in Abschnitt IV angegebene Funktion der Quantenzahlen bedeutet. Aus dem Jacobischen Satz über die Mittelwerte der potentiellen und kinetischen Energie für das Coulombsche Feld wird die allgemeine Gestalt der Energiekonstante als Funktion der Wirkungsvariablen abgeleitet [Gleichung (40)]. Es wird als Gegenstück zur Gleichung für die Frequenzen $\nu_k = \frac{\partial W(J)}{\partial J_k}$ eine solche zur Bestimmung der Wirkungsvariablen

$$J_k = \frac{\partial \overline{L(\nu)}}{\partial \nu_k}$$ angegeben.

Die bisherigen Versuche, das Rutherfordsche Modell des Heliumatoms mit Hilfe der klassischen Mechanik und der Prinzipien der Quantentheorie, wie sie Bohr, Sommerfeld und andere formuliert haben, zu bearbeiten, haben keinen Erfolg gehabt.

Born und Heisenberg [2]) gelangen bei der Behandlung des angeregten Heliumatoms, indem sie von der Vorstellung ausgehen, daß ein Heliumion ein zweites Elektron einfängt und daß die Entfernung des letzteren vom Kern immer größer bleibt als die des ersten, zu Widersprüchen mit der Erfahrung. Sie schließen daraus, daß entweder einige der benutzten Quantenbedingungen falsch sein müssen oder aber die Bewegung der Elektronen auch in den stationären Zuständen nicht mehr den Gleichungen der klassischen Mechanik gehorcht.

Es scheint aber, daß, wenn man die obengenannte, sehr wesentliche Beschränkung über die Bahnen der Elektronen fallen läßt, welche Born und Heisenberg durch die Entwicklung eines Teiles der Hamiltonschen Funktion nach Kugelfunktionen einführen, man zu Ergebnissen

[1]) Vorgelegt der Böhmischen Akademie „Česká Akademie ved a umění“ in Prag in der Sitzung vom 8. Januar 1926.

[2]) M. Born und W. Heisenberg, ZS. f. Phys. **16**, 229, 1923; M. Born, Vorlesungen über Atommechanik, S. 327 und besonders S. 334, Berlin, J. Springer, 1925.

gelangen kann, deren Widerspruch mit der Erfahrung nicht erwiesen ist, so daß man vorderhand ein Versagen der klassischen Mechanik und der Quantenregeln nicht behaupten kann.

Die Unzulänglichkeit der Behandlung von Fragen des Atombaues mit Hilfe der klassischen Mechanik und der Quantenregeln, wie sie sich darin zeigt, daß es bisher nur gelungen ist, das Wasserstoffatom und seinen Starkeffekt befriedigend zu erklären, sucht Heisenberg [1]) durch Aufstellung einer neuen Quantenmechanik zu beheben. Da diese Quantenmechanik, der offenbar große Bedeutung zukommt, scheinbar noch nicht so entwickelt ist, daß man sie auf das Problem des Heliumatoms anwenden könnte, wird es vielleicht nicht überflüssig sein, im folgenden zu versuchen, dieses Problem in engster Anlehnung an die Lösung des Problems des Wasserstoffatoms (für den Fall von Kreisbahnen) auf Grund der klassischen Mechanik und der bisher angewendeten Quantenregeln zu behandeln, ohne an der Spitze der Überlegungen eine so tiefgreifende Beschränkung einzuführen, wie es Born und Heisenberg tun.

I.

Die Bewegungsgleichungen des mechanisch-elektrostatischen Systems, bestehend aus dem positiv geladenen Kern und den beiden Elektronen, als welches wir uns das Heliumatom denken, lauten

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

wo

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

die Hamiltonsche Funktion dieses Problems ist [2]). Die Bedeutung der Koordinaten q_1' und q_2' ist klar: es sind die Entfernungen der Elektronen vom Kern, also wesentlich positive Größen. Die von der Zeit un-

[1]) W. Heisenberg, ZS. f. Phys. **33**, 879, 1925; P. A. M. Dirac, Proc. Roy. Soc. **109**, 642, 1925. Besonders M. Born und P. Jordan, ZS. f. Phys. **34**, 858, 1925.

[2]) M. Born und W. Heisenberg, ZS. f. Phys. **16**, 229, 1923; E. T. Whittaker, Analytical Dynamics, 2nd ed. Cambridge, University Press, 1917, §§ 155, 157, 158.

abhängige Größe k ist der Gesamtimpuls des Heliumatoms. Die Hamiltonsche Funktion H ist bekanntlich gleich der Gesamtenergie $W < 0$ des Atoms. $Z = 2$ ist die Kernladungszahl.

Die kanonische Transformation mit der Erzeugenden [1])

$$V_1 = p_x q_1' \cos q_3' + p_y q_1' \sin q_3' + p_z q_2' \cos q_4' + p_u q_2' \sin q_4'$$

ist durch folgende Gleichungen gegeben:

$$x = \frac{\partial V_1}{\partial p_x} \text{ usw.,} \quad p_i' = \frac{\partial V_1}{\partial q_i'}, \quad (i = 1, 2, 3, 4)$$

d. h.

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

Daraus folgt

$$q_1' = \sqrt{x^2 + y^2} > 0, \quad p_1'^2 + \frac{p_3'^2}{q_1'^2} = p_x^2 + p_y^2, \quad p_3' = -p_x y + p_y x,$$

$$q_2' = \sqrt{z^2 + u^2} > 0, \quad p_2'^2 + \frac{p_4'^2}{q_2'^2} = p_z^2 + p_u^2, \quad p_4' = -p_z u + p_u z,$$

und durch diese Transformation geht die Funktion H in die neue H_1 über:

$$H_1 = \frac{1}{2m}(p_x^2 + p_y^2 + p_z^2 + p_u^2) - e^2 Z \left(\frac{1}{\sqrt{x^2 + y^2}} + \frac{1}{\sqrt{z^2 + u^2}}\right) +$$

$$+ \frac{e^2}{\sqrt{x^2 + y^2 + z^2 + u^2 + 2xz - \lambda y u}} = W,$$

$$\lambda = \frac{k^2 - (x p_y - y p_x)^2 - (z p_u - u p_z)^2}{(x p_y - y p_x)(z p_u - u p_z)}.$$

Die Bewegungsgleichungen unseres Systems sind dann

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

Wir führen jetzt eine zweite kanonische Transformation mit der Erzeugenden [2])

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

[1]) M. Born, Vorlesungen über Atommechanik, S. 37, Formel (12), Berlin 1925.

[2]) Diese kanonische Transformation findet sich, soweit mir bekannt ist, noch nicht in der Literatur vor. Man kann zu ihr durch Zusammensetzung der Transformationen (C) und (A) dieser Arbeit gelangen.

durch:

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

d. h.

$$x = q_1 \cos q_4 - \frac{p_y \cos q_4 - p_x \sin q_4}{\sqrt{p_z^2 + (p_y \cos q_4 - p_x \sin q_4)^2}} \cdot q_2 \sin q_4,$$

$$y = q_1 \sin q_4 + \frac{p_y \cos q_4 - p_x \sin q_4}{\sqrt{p_z^2 + (p_y \cos q_4 - p_x \sin q_4)^2}} \cdot q_2 \cos q_4,$$

$$z = \frac{p_z}{\sqrt{p_z^2 + (p_y \cos q_4 - p_x \sin q_4)^2}} \cdot q_2,$$

$$u = q_3,$$

$$p_1 = p_y \sin q_4 + p_x \cos q_4,$$

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

$$p_3 = p_u,$$

$$p_4 = (p_y \cos q_4 - p_x \sin q_4)\left(q_1 - q_2 \frac{p_y \sin q_4 + p_x \cos q_4}{\sqrt{p_z^2 + (p_y \cos q_4 - p_x \sin q_4)^2}}\right),$$

oder

$$\left.\begin{aligned} p_x &= p_1 \cos q_4 - \frac{p_4}{q_1 p_2 - q_2 p_1} \cdot p_2 \sin q_4, \\ p_y &= p_1 \sin q_4 + \frac{p_4}{q_1 p_2 - q_2 p_1} \cdot p_2 \cos q_4, \\ p_z &= p_2 \sqrt{1 - \frac{p_4^2}{(q_1 p_2 - q_2 p_1)^2}}, \\ p_u &= p_3, \\ x &= q_1 \cos q_4 - \frac{p_4}{q_1 p_2 - q_2 p_1} \cdot q_2 \sin q_4, \\ y &= q_1 \sin q_4 + \frac{p_4}{q_1 p_2 - q_2 p_1} \cdot q_2 \cos q_4, \\ z &= q_2 \sqrt{1 - \frac{p_4^2}{(q_1 p_2 - q_2 p_1)^2}}, \\ u &= q_3. \end{aligned}\right\} \quad \text{(B)}$$

Durch diese kanonische Transformation geht die Summe $p_x^2 + p_y^2 + p_z^2 + p_u^2$ in $p_1^2 + p_2^2 + p_3^2$ und die Summe $x^2 + y^2 + z^2 + u^2$ in $q_1^2 + q_2^2 + q_3^2$ über. Weiter ist

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

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

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

Es geht also die Hamiltonsche Funktion H_1 über in

$$\begin{aligned} H_2 = \frac{1}{2m}(p_1^2 + p_2^2 + p_3^2) - e^2 Z \Bigg\{ & \left(q_1^2 + q_2^2 \frac{p_4^2}{(q_1 p_2 - q_2 p_1)^2}\right)^{-1/2} + \\ & + \left[q_3^2 + q_2^2\left(1 - \frac{p_4^2}{(q_1 p_2 - q_2 p_1)^2}\right)\right]^{-1/2} \Bigg\} + \\ & + e^2 \Bigg\{ q_1^2 + q_2^2 + q_2^3 \\ & + 2 q_2 \sqrt{1 - \frac{p_4^2}{(q_1 p_2 - q_2 p_1)^2}} \left(q_1 \cos q_4 - \frac{p_4}{q_1 p_2 - q_2 p_1} q_2 \sin q_4\right) \\ & - q_3 \cdot \left(q_1 \sin q_4 + \frac{p_4}{q_1 p_2 - q_2 p_1} q_2 \cos q_4\right) \times \\ & \times \frac{k^2 - p_4^2 - (q_2 p_3 - q_3 p_2)^2 \left(1 - \frac{p_4^2}{(q_1 p_2 - q_2 p_1)^2}\right)}{p_4 (q_2 p_3 - q_3 p_2) \sqrt{1 - \frac{p_4^2}{(q_1 p_2 - q_2 p_1)^2}}} \Bigg\}^{-1/2}, \end{aligned}$$

und die Bewegungsgleichungen sind

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

Endlich führen wir eine dritte kanonische Transformation mit der Erzeugenden [1])

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

durch

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

[1]) E. T. Whittaker, l. c. § 160, S. 349; J. M. Burgers, Het atoommodel van Rutherford-Bohr, Proefschrift Leiden, Haarlem 1918, § 17, S. 80.

d. h.

$$q_1 = Q_1 \cos Q_2 \cos Q_3 - \frac{p_2 \cos Q_3 - p_1 \sin Q_3}{\sqrt{p_3^2 + (p_2 \cos Q_3 - p_1 \sin Q_3)^2}} Q_1 \sin Q_2 \sin Q_3,$$

$$q_2 = Q_1 \cos Q_2 \sin Q_3 + \frac{p_2 \cos Q_3 - p_1 \sin Q_3}{\sqrt{p_3^2 + (p_2 \cos Q_3 - p_1 \sin Q_3)^2}} Q_1 \sin Q_2 \cos Q_3,$$

$$q_3 = \frac{p_3}{\sqrt{p_3^2 + (p_2 \cos Q_3 - p_1 \sin Q_3)^2}} Q_1 \sin Q_2,$$

$$q_4 = Q_4,$$

$$\begin{aligned} P_1 = {} & (p_2 \sin Q_3 + p_1 \cos Q_3) \cos Q_2 \\ & + \sqrt{p_3^2 + (p_2 \cos Q_3 - p_1 \sin Q_3)^2} \cdot \sin Q_2, \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} P_2 = {} & -(p_2 \sin Q_3 + p_1 \cos Q_3) Q_1 \sin Q_2 \\ & + \sqrt{p_3^2 + (p_2 \cos Q_3 - p_1 \sin Q_3)^2} \cdot Q_1 \cos Q_2, \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} P_3 = {} & (p_2 \cos Q_3 - p_1 \sin Q_3) Q_1 \cos Q_2 \\ & - \frac{(p_2 \cos Q_3 - p_1 \sin Q_3)(p_2 \sin Q_3 + p_1 \cos Q_3)}{\sqrt{p_3^2 + (p_2 \cos Q_3 - p_1 \sin Q_3)^2}} Q_1 \sin Q_2, \end{aligned}$$

$$P_4 = p_4$$

oder

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

Die letzte kanonische Transformation führt die Summe $p_1^2 + p_2^2 + p_3^2$ in $P_1^2 + \frac{P_2^2}{Q_1^2}$ und die Summe $q_1^2 + q_2^2 + q_3^2$ in Q_1^2 über. Weiter ist:

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

Wir erhalten also aus der Funktion H_2 die neue Hamiltonsche Funktion

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

wo

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

Die Bewegungsgleichungen des Heliumatoms sind nun

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

Wir hätten von der Funktion H_1 direkt zur Funktion H_3 übergehen können durch Anwendung der kanonischen Transformation

$$p_x = \left(P_1 \cos Q_2 - \frac{P_2}{Q_1}\sin Q_2\right)\left(\cos Q_3 \cos Q_4 - \frac{P_4}{P_3}\sin Q_3 \sin Q_4\right)$$
$$- \frac{P_3}{P_2}\left(P_1 \sin Q_2 + \frac{P_2}{Q_1}\cos Q_2\right)\left(\sin Q_3 \cos Q_4 + \frac{P_4}{P_3}\cos Q_3 \sin Q_4\right),$$

$$p_y = \left(P_1 \cos Q_2 - \frac{P_2}{Q_1}\sin Q_2\right)\left(\cos Q_3 \sin Q_4 + \frac{P_4}{P_3}\sin Q_3 \cos Q_4\right)$$
$$- \frac{P_3}{P_2}\left(P_1 \sin Q_2 + \frac{P_2}{Q_1}\cos Q_2\right)\left(\sin Q_3 \sin Q_4 - \frac{P_4}{P_3}\cos Q_3 \cos Q_4\right),$$

$$p_z = \left[P_1\left(\cos Q_2 \sin Q_3 + \frac{P_3}{P_2}\sin Q_2 \cos Q_3\right)\right.$$
$$\left.- \frac{P_2}{Q_1}\left(\sin Q_2 \sin Q_3 - \frac{P_3}{P_2}\cos Q_2 \cos Q_3\right)\right]\sqrt{1 - \frac{P_4^2}{P_3^2}},$$

$$p_u = \left[P_1 \sin Q_2 + \frac{P_2}{Q_1}\cos Q_2\right]\sqrt{1 - \frac{P_3^2}{P_2^2}},$$

$$x = Q_1\left\{\left(\cos Q_3 \cos Q_4 - \frac{P_4}{P_3}\sin Q_3 \sin Q_4\right)\cos Q_2\right.$$
$$\left.- \frac{P_3}{P_2}\left(\sin Q_3 \cos Q_4 + \frac{P_4}{P_3}\cos Q_3 \sin Q_4\right)\sin Q_2\right\},$$

$$y = Q_1\left\{\left(\cos Q_3 \sin Q_4 + \frac{P_4}{P_3}\sin Q_3 \cos Q_4\right)\cos Q_2\right.$$
$$\left.- \frac{P_3}{P_2}\left(\sin Q_3 \sin Q_4 - \frac{P_4}{P_3}\cos Q_3 \cos Q_4\right)\sin Q_2\right\},$$

$$z = Q_1\left\{\cos Q_2 \sin Q_3 + \frac{P_3}{P_2}\sin Q_2 \cos Q_3\right\}\sqrt{1 - \frac{P_4^2}{P_3^2}},$$

$$u = Q_1\sqrt{1 - \frac{P_3^2}{P_2^2}}\sin Q_2.$$

II.

Wir bezeichnen die Funktion H_3 von nun an mit H, so daß das ursprüngliche Problem übergeführt ist in das der Lösung des kanonischen Systems achter Ordnung (1a):

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

wo

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

Dabei ist

$$Z^* = Z^*\left(\frac{P_3}{P_2}, \frac{P_4}{P_2}, \frac{P_5}{P_2}, Q_2, Q_3, Q_4\right), \tag{2a}$$

($P_5 = k$ ist eine von der Zeit unabhängige Konstante)

eine homogene Funktion nullten Grades in den Impulsen $P_2, P_3, P_4, P_5 = k$.

Wir haben also das Problem des Heliumatoms auf dieselbe Form gebracht wie das Problem des Wasserstoffatoms, mit dem Unterschied, daß Z^* beim Wasserstoff gleich Eins ist.

Ausführlicher geschrieben ist das System (1 a) das folgende:

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

$$\dot{Q}_2 = \frac{\partial H}{\partial P_2} = \frac{P_2}{m Q_1^2} - \frac{e^2}{Q_1}\frac{\partial Z^*}{\partial P_2}, \quad (3\,b) \qquad \dot{P}_2 = -\frac{\partial H}{\partial Q_2} = \frac{e^2}{Q_1}\frac{\partial Z^*}{\partial Q_2}, \quad (3\,b')$$

$$\dot{Q}_3 = \frac{\partial H}{\partial P_3} = -\frac{e^2}{Q_1}\frac{\partial Z^*}{\partial P_3}, \quad (3\,c) \qquad \dot{P}_3 = -\frac{\partial H}{\partial Q_3} = \frac{e^2}{Q_1}\frac{\partial Z^*}{\partial Q_3}, \quad (3\,c')$$

$$\dot{Q}_4 = \frac{\partial H}{\partial P_4} = -\frac{e^2}{Q_1}\frac{\partial Z^*}{\partial P_4}, \quad (3\,d) \qquad \dot{P}_4 = -\frac{\partial H}{\partial Q_4} = \frac{e^2}{Q_1}\frac{\partial Z^*}{\partial Q_4}. \quad (3\,d')$$

Die zeitliche Änderung von Z^* ist

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

Mit Hilfe der Gleichungen (3 b bis 3 d, 3 b' bis 3 d') unter Beachtung der Konstanz von P_5 erhalten wir die einfache Beziehung

$$\frac{dZ^*}{dt} = \frac{P_2}{m Q_1^2}\frac{\partial Z^*}{\partial Q_2} = \frac{P_2 \dot{P}_2}{m e^2 Q_1}. \quad (4)$$

Durch Differentiation der Gleichung (1') ergibt sich

$$\left.\begin{aligned} \frac{dH}{dt} &= \frac{1}{m}\left(P_1 \dot{P}_1 + \frac{P_2 \dot{P}_2}{Q_1^2} - \frac{P_2^2 \dot{Q}_1}{Q_1^3}\right) \\ &+ \frac{e^2 Z^*}{Q_1^2}\dot{Q}_1 - \frac{e^2}{Q_1}\frac{dZ^*}{dt} = \frac{dW}{dt} = 0, \end{aligned}\right\} \quad (4\,a)$$

da W die Energiekonstante, also von der Zeit unabhängig ist. Mit Rücksicht auf (4) geht die Gleichung (4 a) über in

$$\frac{1}{m} P_1 \dot{P}_1 - \left(\frac{P_2^2}{m Q_1^3} - \frac{e^2 Z^*}{Q_1^2}\right)\dot{Q}_1 = 0; \quad (5)$$

setzen wir $P_1 = m\dot{Q}_1$ [Gleichung (3 a)] in (5) ein, so finden wir

$$\left(\dot{P}_1 - \frac{P_2^2}{m Q_1^3} + \frac{e^2 Z^*}{Q_1^2}\right)\dot{Q}_1 = 0. \quad (6)$$

Es gilt entweder

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

allein, das ist die Gleichung (3 a') des kanonischen Systems (3 a bis 3 d'), oder noch

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

also

$$\boxed{Q_1 = \text{const.}} \quad (7)$$

Dies stellt eine „singuläre" Lösung unseres kanonischen Systems dar, und mit dieser werden wir uns im folgenden beschäftigen.

Die Gleichung (3 a) gibt mit (7)

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

d. h.

$$P_1 = 0. \quad (8)$$

Dann gibt aber (3 a')

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

und mit (7) erhalten wir

$$Q_1 = \frac{P_2^2}{m e^2 Z^*} = \text{const.} \quad (9)$$

Setzen wir (7), (8), (9) in das kanonische System (3 a bis 3 d') ein, so ergibt sich das folgende kanonische System der Bewegungsgleichungen

$$\dot{Q}_1 = 0, \quad (10\,a) \qquad \dot{P}_1 = 0, \quad (10\,a')$$

$$\dot{Q}_2 = \frac{m e^4 Z^*}{P_2^2}\left(\frac{Z^*}{P_2} - \frac{\partial Z^*}{\partial P_2}\right), \quad (10\,b) \qquad \dot{P}_2 = \frac{m e^4 Z^*}{P_2^2}\frac{\partial Z^*}{\partial Q_2}, \quad (10\,b')$$

$$\dot{Q}_3 = -\frac{m e^4 Z^*}{P_2^2}\frac{\partial Z^*}{\partial P_3}, \quad (10\,c) \qquad \dot{P}_3 = \frac{m e^4 Z^*}{P_2^2}\frac{\partial Z^*}{\partial Q_3}, \quad (10\,c')$$

$$\dot{Q}_4 = -\frac{m e^4 Z^*}{P_2^2}\frac{\partial Z^*}{\partial P_4}, \quad (10\,d) \qquad \dot{P}_4 = \frac{m e^4 Z^*}{P_2^2}\frac{\partial Z^*}{\partial Q_4}. \quad (10\,d')$$

Wir erhalten also dieselben Gleichungen, als ob wir in die Hamiltonsche Funktion H für P_1 und Q_1 die Werte aus den Gleichungen (8) und (9) eingesetzt und die Bewegungsgleichungen für unseren „singulären" Fall aus der Hamiltonschen Funktion

$$H' = -\frac{m e^4 Z^{*2}}{2 P_2^2} = W = \text{Const} \quad (11)$$

mit Hilfe der kanonischen Gleichungen

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

abgeleitet hätten.

Diese und die Gleichungen (10a bis 10d') stimmen überein wegen der Beziehung

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

wo s irgend eine der Größen $P_2, P_3, P_4, Q_2, Q_3, Q_4$ bedeutet.

Setzt man für Q_1 seinen Wert nach (9) in die Gleichung (4), so findet man in unserem Falle

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

woraus folgt

$$\frac{Z^*}{P_2} = \text{konst.}$$

Aus dieser und Gleichung (9) ergibt sich, daß sowohl P_2 als auch Z^* von der Zeit unabhängige Größen sind, was man auch leicht durch den Vergleich von (9) und (11) findet.

Weil also P_2 eine Konstante ist, muß Q_2 eine zyklische Koordinate sein. Die Beziehung

$$P_2 = \text{Konst} \tag{12}$$

differenzieren wir nach der Zeit und erhalten mit (10b')

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

d. h.

$$\frac{\partial Z^*}{\partial Q_2} = 0; \tag{13}$$

aus dieser Gleichung rechnen wir Q_2 als Funktion der übrigen Veränderlichen aus:

$$Q_2 = Q_2\left(\frac{P_3}{P_2}, \frac{P_4}{P_2}, \frac{P_5}{P_2}, Q_3, Q_4\right). \tag{14}$$

Diesen Wert setzen wir in die Funktion H' [siehe Gleichung (11)] ein. Das ergibt die neue Hamiltonsche Funktion

$$H'' = -\frac{m e^4 Z_1^{*2}}{2 P_2^2} = W = \text{Const}, \tag{15}$$

wo

$$Z_1^* = Z_1^*\left(\frac{P_3}{P_2}, \frac{P_4}{P_2}, \frac{P_5}{P_2}, Q_3, Q_4\right). \tag{16}$$

Aus dieser Funktion erhalten wir die neuen Bewegungsgleichungen

$$\dot{Q}_2 = \frac{\partial H''}{\partial P_2} = \frac{m e^4 Z_1^*}{P_2^2}\left(\frac{Z_1^*}{P_2} - \frac{\partial Z_1^*}{\partial P_2}\right), \tag{17a}$$

$$\dot{Q}_3 = \frac{\partial H''}{\partial P_3} = -\frac{m e^4 Z_1^*}{P_2^2}\frac{\partial Z_1^*}{\partial P_3}, \tag{17b}$$

$$\dot{Q}_4 = \frac{\partial H''}{\partial P_4} = -\frac{m e^4 Z_1^*}{P_2^2}\frac{\partial Z_1^*}{\partial P_4}, \tag{17c}$$

$$\dot{P}_2 = -\frac{\partial H''}{\partial Q_2} = 0, \tag{17a'}$$

$$\dot{P}_3 = -\frac{\partial H''}{\partial Q_3} = \frac{m e^4 Z_1^*}{P_2^2}\frac{\partial Z_1^*}{\partial Q_3}, \tag{17b'}$$

$$\dot{P}_4 = -\frac{\partial H''}{\partial Q_4} = \frac{m e^4 Z_1^*}{P_2^2}\frac{\partial Z_1^*}{\partial Q_4}. \tag{17c'}$$

Dabei ist Z_1^* eine von der Zeit unabhängige Größe.

Die Gleichungen (17a bis 17c') und (10a bis 10d') stimmen überein unter Beachtung von (14) und (12) wegen

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

wo s irgend eine der Größen P_2, P_3, P_4, Q_3, Q_4 bezeichnet.

III.

Bevor wir in diesen Überlegungen fortfahren, führen wir als einfaches Beispiel den Fall des Wasserstoffatoms für Kreisbahnen des Elektrons um den Kern näher aus.

Die Hamiltonsche Funktion des ebenen Zweikörperproblems ist im Falle des Wasserstoffs bekanntlich

$$H = \frac{1}{2m}\left(p_x^2 + p_y^2\right) - \frac{e^2 Z}{\sqrt{x^2 + y^2}} = W = \text{Energiekonstante.} \tag{18}$$

Darin bedeuten x und y die Koordinaten des Elektrons in bezug auf ein Koordinatensystem mit dem Ursprung im Kern. Die Bewegungsgleichungen des Elektrons sind folgende:

$$\dot{x} = \frac{\partial H}{\partial p_x}, \qquad \dot{p}_x = -\frac{\partial H}{\partial x},$$

$$\dot{y} = \frac{\partial H}{\partial p_y}, \qquad \dot{p}_y = -\frac{\partial H}{\partial y}.$$

Wir führen jetzt eine kanonische Transformation mit der Erzeugenden

$$V_4 = p_x \sqrt{Q_2^2 - Q_1^2} + p_y Q_1$$

durch, d. h.

$$P_1 = \frac{\partial V_4}{\partial Q_1}, \qquad x = \frac{\partial V_4}{\partial p_x},$$

$$P_2 = \frac{\partial V_4}{\partial Q_2}, \qquad y = \frac{\partial V_4}{\partial p_y}.$$

Die Transformationsgleichungen sind

$$p_x = P_2 \sqrt{1 - \frac{Q_1^2}{Q_2^2}}, \qquad x = Q_2 \sqrt{1 - \frac{Q_1^2}{Q_2^2}},$$

$$p_y = P_1 + P_2 \frac{Q_1}{Q_2}, \qquad y = Q_1.$$

Es geht also die durch (18) gegebene Hamiltonsche Funktion H über in die neue

$$H' = \frac{1}{2m}\left(P_1^2 + P_2^2 + 2 P_1 P_2 \frac{Q_1}{Q_2}\right) - \frac{e^2 Z}{Q_2} = W, \quad (Q_2 > 0), \tag{19}$$

und die Bewegungsgleichungen sind dann diese:

$$\left.\begin{aligned} \dot{Q}_1 &= \frac{\partial H'}{\partial P_1} = \frac{1}{m}\left(P_1 + P_2 \frac{Q_1}{Q_2}\right), \quad \dot{P}_1 = -\frac{\partial H'}{\partial Q_1} = -\frac{P_1 P_2}{m Q_2}, \\ \dot{Q}_2 &= \frac{\partial H'}{\partial P_2} = \frac{1}{m}\left(P_2 + P_1 \frac{Q_1}{Q_2}\right), \quad \dot{P}_2 = -\frac{\partial H'}{\partial Q_2} = \\ &= -\frac{1}{Q_2^2}\left(\frac{P_1 P_2 Q_1}{m} - e^2 Z\right). \end{aligned}\right\} \tag{20}$$

Bekanntlich wird das Problem auch durch Kreisbahnen des Elektrons befriedigt, d. h. durch den Ansatz

$$Q_2 = \text{konst.}$$

Dann gilt

$$\dot{Q}_2 = \frac{1}{m}\left(P_2 + P_1 \frac{Q_1}{Q_2}\right) = 0,$$

woraus folgt:

$$P_2 = -P_1 \frac{Q_1}{Q_2}. \tag{21}$$

Setzen wir den aus (21) sich ergebenden Wert von P_2 in die Hamiltonsche Funktion H' [Gleichung (19)], so erhalten wir die neue Hamiltonsche Funktion

$$H'' = \frac{1}{2m} P_1^2\left(1 - \frac{Q_1^2}{Q_2^2}\right) - \frac{e^2 Z}{Q_2} = W, \tag{22}$$

aus welcher sich die Bewegungsgleichungen durch

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

ergeben, weil

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

wo s irgend eine der Größen Q_1, Q_2, P_1 bedeutet. Ausführlicher geschrieben lauten die Bewegungsgleichungen folgendermaßen:

$$\left.\begin{aligned} \dot{Q}_1 &= \frac{P_1}{m}\left(1 - \frac{Q_1^2}{Q_2^2}\right), \quad \dot{P}_1 = \frac{P_1^2}{m}\frac{Q_1}{Q_2}, \\ \dot{Q}_2 &= 0, \qquad \dot{P}_2 = -\frac{P_1^2 Q_1^2}{m Q_2^3} - \frac{e^2 Z}{Q_2^2}. \end{aligned}\right\} \tag{23}$$

Aus Gleichung (21) erhält man durch Differentiation nach der Zeit die Beziehung

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

oder nach Einsetzen der Werte von $\dot{Q}_1$, $\dot{P}_1$, $\dot{P}_2$ aus den Gleichungen (20), die Gleichung

$$\frac{P_1^2}{m}\left(1 - \frac{Q_1^2}{Q_2^2}\right) - \frac{e^2 Z}{Q_2} = 0; \tag{24}$$

das ist aber der bekannte Satz, daß im Falle der Kreisbahn des Elektrons die potentielle Energie gleich dem negativen doppelten Werte der kinetischen Energie ist [wie man leicht aus Gleichung (22) erkennt]. Es ist die Energiekonstante

$$W = -\frac{e^2 Z}{2 Q_2}. \tag{25}$$

Aus Gleichung (24) folgt

$$\frac{1}{Q_2} = \frac{1}{2 P_1^2 Q_1^2}\left(-m e^2 Z + \sqrt{m^2 e^4 Z^2 + 4 P_1^4 Q_1^2}\right), \tag{26}$$

wo die Wurzel mit dem positiven Vorzeichen genommen ist, da Q_2 notwendig positiv ist. Es ist klar, daß Q_2 aus Gleichung (24) mit Hilfe der letzten Beziehung (26) zu eliminieren ist; gleichzeitig ist ersichtlich, daß man dadurch von der Hamiltonschen Funktion nicht zu einer neuen Hamiltonschen Funktion

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

gelangt, aus der man durch die üblichen Differentiationen die Bewegungsgleichungen ableiten könnte, da

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

gilt, wo s jede der Größen P_1, Q_1 ist.

Obwohl wir jetzt die entsprechende Hamiltonsche Funktion der Bewegungsgleichungen des betrachteten Elektrons, welche durch Einsetzen des Wertes von Q_2 aus Gleichung (26) in die Gleichungen (23) entstehen, nicht kennen, ist es dennoch möglich, in der Lösung fortzufahren, und zwar so, daß der Wert von Q_2 aus Gleichung (26) in Gleichung (25) eingesetzt wird, wodurch für die Energiekonstante folgender Wert erhalten wird:

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

der jedoch nicht die Hamiltonsche Funktion des betrachteten Problems darstellt.

Hieraus folgt

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

oder

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

und hieraus

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

Wir berechnen jetzt das Phasenintegral

$$J = \oint P_1 \, d Q_1 = \sqrt{2 m(-W)} \oint \frac{d Q_1}{\sqrt{1 - \frac{4 W^2}{e^4 Z^2} Q_1^2}}. \tag{27}$$

Da

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

nimmt (27) die Form

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

an, und für die Gesamtenergie W erhält man

$$W = -\frac{2\pi^2 m e^4 Z^2}{J^2}, \tag{28}$$

also den bekannten Wert für die Energie des Wasserstoffatoms[1]).

---

[1]) M. Born, l. c. S. 159, Formel (3).

IV.

Wir kehren nun wieder zum ursprünglichen Problem zurück. Aus Gleichung (14)

$$Q_2 = Q_2\left(\frac{P_3}{P_2}, \frac{P_4}{P_2}, \frac{P_5}{P_2}, Q_3, Q_4\right) \quad (P_5 = k = \text{konst})$$

entsteht durch Ableitung nach der Zeit die Beziehung

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

Da P_2 [nach Gleichung (12)] und $P_5 = k$ Konstanten sind, verschwinden das erste und vierte Glied auf der rechten Seite der letzten Gleichung, und wir erhalten aus derselben durch Einführung der Größen $\dot{Q}_2$, $\dot{P}_3$, $\dot{P}_4$, $\dot{Q}_3$, $\dot{Q}_4$ aus den Bewegungsgleichungen (17a bis 17d') eine Beziehung zwischen den Größen P_2, P_3, P_4, P_5, Q_3, Q_4, die folgende Form hat:

$$\Phi\left(\frac{P_3}{P_2}, \frac{P_4}{P_2}, \frac{P_5}{P_2}, Q_3, Q_4\right) = 0. \tag{29}$$

Es ist ersichtlich, daß man eine der beiden allgemeinen Koordinaten (Winkel) Q_3 und Q_4 mit Hilfe dieser Beziehung aus dem Ausdruck für die Energiekonstante W [siehe Formel (15), (16)] eliminieren kann; gleichzeitig jedoch, ähnlich, wie im vorhergehenden Beispiel der Kreisbahnen des Elektrons im Wasserstoffatom (Abschnitt III), sieht man, daß die Größe H''', die erhalten wird, wenn man für Q_4 bzw. Q_3 den Wert aus Gleichung (29) in die Gleichung (15) für die Hamiltonsche Funktion H'' einsetzt:

$$H''' = -\frac{m e^4 Z_2^{*2}}{2 P_2^2} = W \tag{30}$$

[wo die Funktion

$$Z_2^* = Z_2^*\left(\frac{P_3}{P_2}, \frac{P_4}{P_2}, \frac{P_5}{P_2}, Q_3\right) \quad \text{bzw.} \quad Z_2^* = Z_{11}^*\left(\frac{P_3}{P_2}, \frac{P_4}{P_2}, \frac{P_5}{P_2}, Q_4\right) \tag{31}$$

durch Einsetzen des Wertes von Q_4 bzw. Q_3 aus Gleichungen (29) in die Funktion Z_1^* entstanden ist] nicht die neue Hamiltonsche Funktion des Problems ist, weil

$$\frac{\partial H'''}{\partial s} = \frac{\partial H''}{\partial s} + \frac{\partial H''}{\partial Q_4}\frac{\partial Q_4}{\partial s} \neq \frac{\partial H''}{\partial s}$$

bzw.

$$\frac{\partial H'''}{\partial s} = \frac{\partial H''}{\partial s} + \frac{\partial H''}{\partial Q_3}\frac{\partial Q_3}{\partial s} \neq \frac{\partial H''}{\partial s},$$

wo s irgend eine der Größen P_2, P_3, P_4, Q_3 bzw. P_2, P_3, P_4, Q_4 bedeutet.

Obwohl wir jetzt die entsprechende Hamiltonsche Funktion der Bewegungsgleichungen des betrachteten Problems, welche durch Einsetzen des Wertes von Q_4 bzw. Q_3 aus Gleichung (29) in die Gleichungen (17a bis 17c′) entstehen, nicht kennen, ist es dennoch möglich, in der Lösung fortzufahren, und zwar so, daß der Wert von Q_4 bzw. Q_3 aus der Gleichung (29) in Gleichung (30) eingesetzt wird, wodurch für die Energiekonstante W folgender Wert erhalten wird:

$$W = -\frac{m e^4 Z_2^{*2}}{2 P_2^2}, \tag{32}$$

wo Z_2^* durch die Formeln (31) gegeben ist.

Man kann also, wenigstens im Prinzip,

$$\left.\begin{aligned} \frac{P_3}{P_2} &= f\left(-2 W P_2^2, \frac{P_4}{P_2}, \frac{P_5}{P_2}, Q_3\right) \\ \text{bzw.}\quad \frac{P_4}{P_2} &= g\left(-2 W P_2^2, \frac{P_3}{P_2}, \frac{P_5}{P_2}, Q_4\right) \end{aligned}\right\} \tag{33}$$

ausrechnen. Setzt man

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

so läßt sich Gleichung (32) separieren und man kann finden:

$$\left.\begin{aligned} J_3 &= \oint P_3\, d Q_3 = \oint \frac{\partial S}{\partial Q_3} d Q_3 = \oint \frac{d S_3}{d Q_3} d Q_3 \\ \text{bzw.}\quad J_4 &= \oint P_4\, d Q_4 = \oint \frac{\partial S}{\partial Q_4} d Q_4 = \oint \frac{d S_4}{d Q_4} d Q_4, \end{aligned}\right\}, \tag{33a}$$

wo für P_3 bzw. P_4 die Werte (33) einzusetzen sind und wo

$$S = S_2(Q_2) + S_3(Q_3) + S_4(Q_4) + S_5(Q_5);$$

dabei wird Q_4 bzw. Q_3 als zyklische Koordinate betrachtet, der kanonisch ein konstanter Impuls P_4 bzw. P_3 zugeordnet ist. (Wiewohl Q_4 bzw. Q_3 als zyklische Koordinate angesehen wird, ist es mit Rücksicht darauf, daß gezeigt wurde, daß H''' nicht die Hamiltonsche Funktion des Problems darstellt, nicht richtig, die Größen $\frac{\partial H''}{\partial Q_4}$ und $\frac{\partial H''}{\partial Q_3}$ gleich Null zu setzen.) Aus den Gleichungen (33a) kann man die Energiekonstante W als Funktion von J_3, P_2, P_4, P_5 bzw. J_4, P_2, P_3, P_4 ausdrücken.

Damit ist gezeigt, daß es für den „singulären“ Fall (siehe Abschnitt II) prinzipiell möglich ist, die Gesamtenergie des neutralen Heliumatoms in der Form

$$W = -\frac{m e^4 \hat{Z}^2}{2 P_2^2} \tag{34}$$

zu schreiben, wo

$$\hat{Z} = \tilde{Z}\left(\frac{J_3}{P_2}, \frac{P_4}{P_2}, \frac{P_5}{P_2}\right) \quad \text{bzw.} \quad \hat{Z} = \tilde{Z}'\left(\frac{P_3}{P_2}, \frac{J_4}{P_2}, \frac{P_5}{P_2}\right).$$

Nach den bisher benutzten Quantenregeln ist dann zu setzen

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

Wir sind also von den ursprünglichen zu den sogenannten Wirkungsvariablen

$$J_2 = 2\pi P_2, \quad J_3, \quad J_4 = 2\pi P_4, \quad J_5 = 2\pi P_5$$

bzw.

$$J_2 = 2\pi P_2, \quad J_3 = 2\pi P_3, \quad J_4, \quad J_5 = 2\pi P_5$$

übergegangen, mit deren Hilfe die Gesamtenergie des neutralen Heliumatoms (für den „singulären“ Fall) die Form annimmt:

$$W = -\frac{2\pi^2 m e^4 \hat{Z}^2}{J_2^2}, \tag{35}$$

wo

$$\hat{Z} = \hat{Z}\left(\frac{J_3}{J_2}, \frac{J_4}{J_2}, \frac{J_5}{J_2}\right) \quad \text{bzw.} \quad \hat{Z} = \hat{Z}'\left(\frac{J_3}{J_2}, \frac{J_4}{J_2}, \frac{J_5}{J_2}\right). \tag{36}$$

Für jede Wirkungsvariable $J_k = \text{konst}$ ist schließlich der Wert $n_k h$ $(k = 2, 3, 4, 5)$ einzusetzen.

V.

Die der Wirkungsvariablen J_k kanonisch konjugierte Winkelvariable sei w_k. In diesen Veränderlichen J_k und w_k drückt sich die Gesamtenergie in folgender Form aus[1]):

$$W = \sum_{k=2}^{5} J_k \dot{w}_k - \overline{L}, \tag{37}$$

wo $\overline{L}$ den zeitlichen Mittelwert der Lagrangeschen Funktion L und

$$L = T - V$$

die Differenz zwischen der kinetischen Energie T und der potentiellen V bedeutet. Dabei ist W und $\overline{L}$ eine Funktion der J_k allein; weiter gilt[2])

$$\dot{w}_k = \frac{\partial W}{\partial J_k} = \nu_k, \quad \dot{J}_k = 0. \tag{37a}$$

---

[1]) V. Trkal, Proc. Cambr. Phil. Soc. **21**, 81, 1923, Formel (3); J. H. van Vleck, Phys. Rev. **22**, 547, 1923.

[2]) J. M. Burgers, Het atoommodel van Rutherford-Bohr, l. c. § 10, S. 43, Gl. (5); N. Bohr, Über die Quantentheorie der Linienspektren, S. 40, Gl. (5), Braunschweig 1923.

Nach einem bekannten Satze, der von Jacobi herrührt, sind die zeitlichen Mittelwerte der kinetischen Energie und der Hälfte der negativen potentiellen Energie im Coulombschen Kraftfeld einander gleich[1]):

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

Da

$$T + V = W,$$

wird

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

und daher

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

sowie

$$\overline{L} = \overline{T} - \overline{V} = -\tfrac{3}{2}\overline{V} = 3\,\overline{T} = -3\,W. \tag{38}$$

Setzen wir $\overline{L}$ aus Gleichung (38) in Gleichung (37) ein, so wird[2])

$$\sum_{k=2}^{5} J_k \frac{\partial W}{\partial J_k} = -2\,W. \tag{39}$$

Man kann diese Gleichung als partielle Differentialgleichung erster Ordnung für W betrachten, die durch das folgende System gewöhnlicher Differentialgleichungen

$$\frac{d\,J_2}{J_2} = \frac{d\,J_3}{J_3} = \frac{d\,J_4}{J_4} = \frac{d\,J_5}{J_5} = \frac{d\,W}{-2\,W}$$

gelöst wird; seine „Hauptintegrale" sind

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

und das allgemeine Integral der Gleichung (37) ergibt sich zu

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

wo F das Symbol einer willkürlichen Funktion ist, oder

$$W = \frac{1}{J_2^2} \cdot F\left(\frac{J_3}{J_2}, \frac{J_4}{J_2}, \frac{J_5}{J_2}\right), \tag{40}$$

hat also dieselbe (allgemeinere) Form wie die Gesamtenergie des neutralen Heliumatoms für den „singulären" Fall nach Gleichung (35) und (36).

---

[1]) A. Sommerfeld, Atombau und Spektrallinien, 4. Aufl., 1924. Zusatz 5. S. 771, 772; M. Born, Vorlesungen über Atommechanik, S. 165.

[2]) Siehe die Beziehung $2\,\overline{T} = \sum_{k=2}^{5} J_k \nu_k$ bei J. M. Burgers, l. c. § 16, S. 72, Formel (I); M. Born, l. c. S. 94, Formel (18).

Aus Gleichung (38) folgt

$$W = -\tfrac{1}{3}\overline{L}, \tag{41}$$

was, in Gleichung (39) eingesetzt, mit Rücksicht auf (37 a) gibt:

$$\sum_{k=2}^{5} J_k \nu_k = \tfrac{2}{3}\overline{L}. \tag{42}$$

Da W eine Funktion der J_k ($k = 2, 3, 4, 5$) allein ist, hat man

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

und mit Beachtung von Gleichung (41) ist

$$-\tfrac{1}{3}\, d\,\overline{L} = \sum_{k=2}^{5} \nu_k\, d\,J_k. \tag{43}$$

Durch Differentiation von Gleichung (42) bekommt man

$$\tfrac{2}{3}\, d\,\overline{L} = \sum_{k=2}^{5} J_k\, d\,\nu_k + \sum_{k=2}^{5} \nu_k\, d\,J_k; \tag{44}$$

subtrahiert man (43) von (44), so findet man

$$d\,\overline{L} = \sum_{k=2}^{5} J_k\, d\,\nu_k,$$

so daß, wenn $\overline{L}$ als Funktion der Größen ν_k allein betrachtet wird, sich ergibt:

$$J_k = \frac{\partial\,\overline{L}\,(\nu)}{\partial\,\nu_k}, \tag{45}$$

wo $\overline{L}\,(\nu)$ als Funktion der ν_k allein ausgedrückt ist; diese Gleichung bildet ein gewisses Gegenstück zur Gleichung (37 a):

$$\nu_k = \frac{\partial W}{\partial J_k}.$$

Mit Rücksicht auf (38) kann geschrieben werden

$$J_k = -3\,\frac{\partial\,W'}{\partial\,\nu_k}, \tag{46}$$

wobei W' die Gesamtenergie als Funktion der ν_k allein ausgedrückt, bedeutet.

VI.

Zusammenfassend läßt sich also folgendes sagen: Der „singuläre" Fall des Dreikörperproblems vom He-Typus, der dadurch gekennzeichnet ist, das Q_1 konstant ist, d. h. daß die Summe der Quadrate der Entfernungen der beiden Elektronen vom Kern zu jeder Zeit konstant ist, liefert für die Gesamtenergie des neutralen Heliumatoms den Wert (35):

$$W = -\frac{2\pi^2 m e^4 \hat{Z}^2}{J_2^2},$$

wo

$$\left.\begin{aligned}\hat{Z} = \hat{Z}\left(\frac{J_3}{J_2}, \frac{J_4}{J_2}, \frac{J_5}{J_2}\right) \quad \text{bzw.} \quad \hat{Z} = \hat{Z}'\left(\frac{J_3}{J_2}, \frac{J_4}{J_2}, \frac{J_5}{J_2}\right),\\ J_k = n_k h \quad (k = 2, 3, 4, 5)\end{aligned}\right\}$$

ist.

Die Gestalt dieser Funktionen ist weiter unten beschrieben.

Wir wollen jetzt das Resultat betrachten, das erhalten wird, wenn man auf demselben Wege, auf dem wir für das neutrale Heliumatom zu Gleichung (35) gelangt sind, das Wasserstoffatom behandelt. Der Ausdruck für die Gesamtenergie ist dann wieder (35), wo aber $\hat{Z}$ durch die Kernladungszahl $Z = 1$ ersetzt ist; dem „singulären" Fall entsprechen beim Wasserstoff die Kreisbahnen des Elektrons. In diesem Ausdruck hat man $J_2 = n_2 h$ zu setzen und kommt dadurch (für den Fall von Kreisbahnen) auf einen Wert der Gesamtenergie, der mit jenem für Ellipsenbahnen übereinstimmt.

Es scheint nicht ausgeschlossen zu sein, daß der Ausdruck (35) für die Gesamtenergie des Heliumatoms einen mit den experimentellen Resultaten übereinstimmenden Wert liefern könnte; um dies feststellen zu können, wäre es notwendig, zunächst tatsächlich die Differentiation der Funktion Z^* [Gleichung (2)] nach Q_2 auszuführen, das Resultat gleich Null zu setzen und nach Q_2 aufzulösen, wie es die Gleichung (14) andeutet. Der erhaltene Wert von Q_2 wäre dann in Gleichung (2) einzusetzen, wodurch man Z_1^* erhalten würde. Hierauf wären die in Abschnitt IV angegebenen Rechnungen mit diesem Z_1^* wirklich vorzunehmen. Beim Versuch, dies wirklich durchzuführen, stößt man aber bald auf beträchtliche Rechenschwierigkeiten, so daß man wahrscheinlich zu einer geeigneten Approximation wird greifen müssen.

Schließlich soll bemerkt werden, daß die drei kanonischen Transformationen des Abschnittes I nicht die einzigen sind, welche die ursprüngliche Hamiltonsche Funktion auf die Gestalt

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

bringen; viele andere erhält man durch Permutation der generalisierten Koordinaten x, y, z, u (und der ihnen konjugierten Impulse p_x, p_y, p_z, p_u).

Prag, Institut f. theoretische Physik d. tschechischen Karls-Universität.