# Poznámky k Schrödingerově vlnové mechanice.

*V. Trkal.*

1. Kvantová a vlnová mechanika. — Zkušenost učí, že při fysikálních pochodech, odehrávajících se ve velmi malých prostorech, hraje rozhodující úlohu typická diskontinuita, element obyčejné fysice velmi cizí. A tak naproti obvyklé představě, kterou si v prostorově časovém nazírání činíme, že totiž prostor a hmota jsou spojité a že se dají libovolně děliti, vznikla představa o složení hmoty z nepatrných částic, korpuskulí. Snaha popsati jejich mechanism pomocí obyčejné, t. zv. klasické mechaniky, nevedla k cíli — bylo nutno zavésti dodatečné podmínky, t. zv. podmínky kvantové, aby se docílilo souhlasu teorie se zkušeností. Značné vady, ba nepřípustnost tohoto postupu, pociťovaly se od samého začátku teorie; tyto potíže daly vznik t. zv. kvantové mechanice, která tvoří jisté analogon klasické mechaniky (jež platí pro pochody makroskopické), a netrpí vadami této mechaniky, když jí má býti použito pro pochody mikroskopické. Avšak zato ukázalo se nemožností oněm korpuskulím přisouditi v prostoru nějakou polohu vůbec, jakožto funkci času; na místo takového popisu prostorově časového nastupují matematické vztahy mezi skutečně pozorovatelnými veličinami. Tato kvantová mechanika,[1]) jejímž tvůrcem jest Heisenberg, jest po formální stránce identická s t. zv. vlnovou mechanikou Schrödingerovou,[2]) jejíž fysikální základy spočívají na »vlnové teorii« de Broglieově. Vlnová mechanika Schrödingerova dovoluje však učiniti si přec jen trochu názornější představy fysikálního dění ve velmi malých prostorech než teorie Heisenbergova, třebaže dosud fysice chybí pro názornou interpretaci onoho diskontinuitního elementu ještě nějaký, dosud neznámý, avšak podstatný tah v obrazu, který si o struktuře hmoty vykreslila.

2. Vlnová rovnice Schrödingerova.[3]) — Poněvadž v české literatuře dosud nebylo o Schrödingerově teorii psáno

---

[1]) W. Heisenberg, ZS. f. Phys. *33*, 879, 1925; viz přehledy literatury pod názvem »*Nová epocha v teorii kvant*« v »Časopise pro pěst. mat. a fys.« *55*, 207, 423—424, 1926; *56*, 53—56, 1927, a přehled pod týmž názvem v prvém čísle tohoto ročníku Časopisu.

[2]) E. Schrödinger, Ann. d. Phys. *79*, 361—376, 1926.

[3]) E. Schrödinger, Abhandlungen zur Wellenmechanik, Leipzig 1927, (J. A. Barth), pp. 1, 2, 16.

vůbec, vyložím nejdříve stručně prvé její začátky, ovšem jen po formální její stránce.

Problémy starší atomové dynamiky řeší se tak, že za východisko slouží Hamiltonova funkce

$$H(q, p) = E,$$

kde $q$ značí zobecněné souřadnice a $p$ příslušné jim impulsy, kdežto $E$ znamená konstantu úhrnné energie. Po zavedení účinnostní funkce $S$ přejde Hamiltonova funkce v parciální rovnici diferenciální

$$H\left(q, \frac{\partial S}{\partial q}\right) = E.$$

Obvyklý postup byl ten, že se hledalo řešení této rovnice ve tvaru součtu funkcí, z nichž každá závisí na jedné, jediné proměnné $q$. Avšak Schrödinger zavádí místo účinnostní funkce $S$ novou neznámou $\psi$, která má býti součinem funkcí, z nichž každá závisí jen na jedné proměnné, t. j.

$$S = K \log \psi,$$

kde konstanta $K$ musí býti zavedena z důvodů dimensionálních a má rozměr účinnosti. Z důvodů numerického souhlasu se zkušeností volí se

$$K = \frac{h}{2\pi},$$

kde $h$ jest Planckova konstanta. Tak obdrží Schrödinger rovnici

$$H\left(q, \frac{h}{2\pi} \cdot \frac{1}{\psi} \frac{\partial \psi}{\partial q}\right) = E.$$

Nyní však nehledá řešení této rovnice, nýbrž tomuto problému přiřadí úlohu jinou, která v případě problému jednoho elektronu spočívá v tomto:

Dejme tomu, že užíváme pravoúhlých souřadnic Descartesových; pak

$$H\left(q, \frac{h}{2\pi} \cdot \frac{1}{\psi} \frac{\partial \psi}{\partial q}\right) = \frac{h^2}{4\pi^2} \cdot \frac{1}{2m\psi^2} \left\{\left(\frac{\partial \psi}{\partial x}\right)^2 + \left(\frac{\partial \psi}{\partial y}\right)^2 + \left(\frac{\partial \psi}{\partial z}\right)^2\right\} + \\ + V(x, y, z) = E,$$

kde $m$ jest hmota elektronu a $V(x, y, z)$ jeho potenciální energie. Problém, který přiřadíme této rovnici, zní pak ve tvaru variačního principu takto:

$$\delta \int [H - E] \psi^2 d\tau = \delta \int\int\int dx\, dy\, dz \left[\left(\frac{\partial \psi}{\partial x}\right)^2 + \left(\frac{\partial \psi}{\partial y}\right)^2 + \left(\frac{\partial \psi}{\partial z}\right)^2 + \\ + (V - E) \cdot \frac{8m\pi^2}{h^2} \psi^2\right] = 0.$$

Provedeme-li naznačenou variaci, obdržíme vlnovou rovnici Schrödingerovu

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

kde $\Delta$ značí Laplaceův symbol. To jest diferenciální parciální rovnice pro šíření vln, kterou jest řešiti za daných krajových podmínek, které zpravidla jsou vyjádřeny požadavkem spojitosti a jednoznačnosti nalezeného řešení v celém oboru proměnnosti souřadnic. Takové řešení není však možno nalézti pro jakoukoli hodnotu konstanty energie $E$, nýbrž jen pro zcela určité, význačné hodnoty její, t. zv. charakteristické hodnoty (Eigenwerte); řešení rovnice těmto charakteristickým hodnotám příslušná slují charakteristické funkce (Eigenfunktionen). A tím sám sebou vystoupí tolik žádaný diskontinuitní element!

Místo toho, abychom vycházeli vysloveně z Hamiltonovy funkce, lze variační problém svrchu uvedený formulovati elegantněji takto:

Budiž $T\ (q, p)$ kinetická energie jakožto funkce souřadnic a impulsů, $V$ potenciální energie, $d\tau$ objemový element konfiguračního prostoru »měřený racionálně«, t. j. ne jen jednoduše součinem $dq_1\, dq_2 \ldots dq$, nýbrž dělený ještě odmocninou z diskriminantu kvadratické formy $T\ (q, p)$. Pak $\psi$ má činiti »Hamiltonův integrál«

$$\int d\tau \left\{\left(\frac{h}{2\pi}\right)^2 T\left(q, \frac{\partial\psi}{\partial q}\right) + \psi^2 V\right\}$$

stacionárním za normující vedlejší podmínky

$$\int \psi^2\, d\tau = 1.$$

Charakteristické hodnoty tohoto variačního problému jsou stacionární hodnoty Hamiltonova integrálu právě uvedeného; jsou to zároveň též kvantová niveaux energie.

Tolik po formální stránce; věcné stránky teorie, totiž té okolnosti, že klasická mechanika (ve tvaru Hamilton-Jacobiho) odpovídá geometrické optice, kdežto Schrödingerova vlnová mechanika vlnové optice, nemíním se zde dotýkati.

3. Rotátor s osou v prostoru pevnou.[4]) Je to nejjednodušší příklad k Schrödingerově teorii. Potenciální energie jest v tomto případě rovna nule a kinetická energie jest $\frac{1}{2} A \dot{\varphi}^2$, kde $A$ jest moment setrvačnosti a $\varphi$ úhel otočení. Hamiltonova funkce zní

$$H = \frac{p_\varphi^2}{2A} = E.$$

[4]) E. Schrödinger, Ann. d. Phys., *79*, 519, 1926 anebo »Abhandlungen zur Wellenmechanik«, p. 47.

Variační problém bude v našem případě míti tvar

$$\delta \int_0^{2\pi} \left\{ \frac{1}{2A} \cdot \frac{h^2}{4\pi^2} \psi'^2 - E\psi^2 \right\} d\varphi = 0$$

a vlnová rovnice

$$\frac{1}{A} \psi'' + \frac{8\pi^2 E}{h^2} \psi = 0;$$

její řešení jest

$$\psi = \frac{\sin}{\cos} \left[ \sqrt{\frac{8\pi^2 EA}{h^2}} \varphi \right].$$

V původním problému $\varphi + 2\pi$ znamená totéž jako $\varphi$; aby řešení právě uvedené bylo jednoznačné a spojité v oboru proměnné $\varphi$, musí býti

$$\sqrt{\frac{8\pi^2 EA}{h^2}} (\varphi + 2\pi) = \sqrt{\frac{8\pi^2 EA}{h^2}} \varphi + 2n\pi,$$

t. j.

$$\sqrt{\frac{8\pi^2 EA}{h^2}} = n,$$

kde $n$ jest celé číslo. Odtud plynou charakteristické hodnoty, jež jsou kvantovými niveaux energie tohoto rotátoru, ve tvaru

$$E_n = \frac{n^2 h^2}{8\pi^2 A}.$$

4. R o t á t o r s v o l n o u o s o u.[5]) V polárních souřadnicích má kinetická energie jako funkce impulsů tvar

$$T = \frac{1}{2A} \left( p_\vartheta{}^2 + \frac{p_\varphi{}^2}{\sin^2 \vartheta} \right)$$

a vlnová rovnice S c h r ö d i n g e r o v a v tomto případě zní

$$\frac{1}{\sin\vartheta} \frac{\partial}{\partial\vartheta} \left( \sin\vartheta \frac{\partial \psi}{\partial \vartheta} \right) + \frac{1}{\sin^2\vartheta} \frac{\partial^2 \psi}{\partial \varphi^2} + \frac{8\pi^2 AE}{h^2} \psi = 0.$$

Požadavek, aby $\varphi$ bylo na kulové ploše jednoznačné a spojité, vede k podmínce

$$\frac{8\pi^2 A}{h^2} E = n(n+1), \quad n = 0, 1, 2, 3, \ldots$$

Niveaux energie jsou tedy

$$E_n = \frac{n(n+1) h^2}{8\pi^2 A}, \quad n = 0, 1, 2, 3, \ldots$$

[5]) E. S c h r ö d i n g e r, Ann. d. Phys., *79*, 520, 1926 anebo »Abhandlungen...«, p. 48.

Kvantový výsledek, který dává rotátor s volnou osou, jest tedy odlišný od případu, že se jedná o rotátor s osou pevnou; třebaže rotátor s osou pevnou jest zvláštním případem rotátoru s osou volnou, nelze nijakou specialisací přejíti od kvantových hodnot energie rotátoru druhého ke kvantovým hodnotám energie rotátoru prvého.

Při této příležitosti Schrödinger praví: »Není dovoleno při užívání undulační mechaniky snížiti si pro zjednodušení počtu stupeň volnosti pohybu systému proti skutečnému stupni volnosti a to i v tom případě, když na základě integrálů mechanických rovnic víme, že systém při jednotlivých pohybech nepoužívá určitých volností. Pro mikromechaniku jest právě systém mechanických základních rovnic zcela nekompetentní; jednotlivé dráhy systému, o nichž jest řeč v klasické mechanice, nemají v mikromechanice právo na existenci.«

5. Atom vodíku. Variační problém v tomto případě zní:

$$\delta \int\int\int dx\,dy\,dz \left[\left(\frac{\partial \psi}{\partial x}\right)^2 + \left(\frac{\partial \psi}{\partial y}\right)^2 + \left(\frac{\partial \psi}{\partial z}\right)^2 - \frac{8\pi^2 m}{h^2}\left(E + \frac{e^2}{r}\right)\psi^2\right] = 0$$

a vlnová rovnice jest

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

Řešení její dá se provésti na př. v prostorových polárních souřadnicích a vede,[6]) jak nebudu obšírně odvozovati, ke známému výsledku pro kvantová niveaux energie

$$E_n = -\frac{2\pi^2 m e^4}{n^2 h^2}, \quad n = 1, 2, 3, \ldots$$

Ve starší teorii kvantové výsledek prostorového problému jednoho elektronu se kryje úplně s výsledkem v případě kruhových drah elektronu.

Jak tomu bude ve vlnové mechanice?

Kinetická energie elektronu obíhajícího v kruhové dráze kolem jádra jest $\frac{1}{2}mr^2\dot{\varphi}^2$ a potenciální $-\frac{e^2}{r}$, kde $r$ jest konstantní (poloměr kruhu). Tedy

$$\tfrac{1}{2}mr^2\dot{\varphi}^2 - \frac{e^2}{r} = E$$

a Hamiltonova funkce bude zníti:

$$H = \frac{p_\varphi^2}{2mr^2} - \frac{e^2}{r} = E.$$

[6]) Viz na př. pojednání citované v pozn. [2]) (na str. 371) anebo »Abhandlungen . . .«, pp. 2—11.

Pohybové rovnice jsou

$$\dot{\varphi} = \frac{\partial H}{\partial p_r} = \frac{p_\varphi}{mr^2}, \qquad \dot{p}_\varphi = -\frac{\partial H}{\partial \varphi} = 0$$

$$\dot{r} = \frac{\partial H}{\partial p_\varphi} = 0, \qquad \dot{p}_r = -\frac{\partial H}{\partial r} = \frac{p_\varphi^2}{mr^3} - \frac{e^2}{r^2} = 0.$$

Z poslední rovnice plyne známá vlastnost, že kinetická energie jest až na znamení rovna polovině potenciální energie. Poloměr $r$ jest tudíž

$$r = \frac{p_\varphi^2}{me^2}.$$

Dosazením do Hamiltonovy funkce, což jest v tomto případě dovoleno, získáme novou funkci Hamiltonovu

$$H^* = -\frac{me^4}{2p_\varphi^2} = E,$$

z níž plynou tyto pohybové rovnice:

$$\dot{\varphi} = \frac{\partial H^*}{\partial p_\varphi}, \qquad p_\varphi = -\frac{\partial H^*}{\partial \varphi}.$$

Abychom převedli tento případ na případ rotátoru s osou v prostoru pevnou,[4]) položme

$$H^* = \frac{1}{K};$$

pak pohybové rovnice znějí

$$\dot{\varphi} = -E^2 \frac{\partial K}{\partial p_\varphi}, \qquad \dot{p}_\varphi = E^2 \frac{\partial K}{\partial \varphi} = 0.$$

Zvolme nyní $H^{**} = -E^2 K$ za novou Hamiltonovu funkci; obdržíme pohybové rovnice

$$\dot{\varphi} = +\frac{\partial H^{**}}{\partial p_\varphi}, \qquad \dot{p}_\varphi = -\frac{\partial H^{**}}{\partial \varphi} = 0,$$

při čemž

$$H^{**} = E^2 \cdot \frac{2p_\varphi^2}{me^4} = -E.$$

To jest však problém úplně stejný jako u rotátoru s pevnou osou,[4]) jenom jest nutno nahraditi moment setrvačnosti $A$ výrazem

$$\frac{me^4}{2E^2}$$

a konstantu energie $E$ výrazem $-E$. Podmínky pro charakteristické hodnoty jsou, jak patrno, tytéž, a tak nacházíme vztah

$$\sqrt{\frac{8\pi^2}{h^2}(-E)\cdot\frac{me^4}{4E^2}}=n,$$

čili

$$E_n=-\frac{2\pi^2 me^4}{h^2 n^2},$$

jako v případě obecném.

Téhož postupu lze však užíti i v obecném případě, jak vidno z této okolnosti. V pravoúhlých souřadnicích zní Hamiltonova funkce uvažovaného problému takto:

$$H_1=\frac{1}{2m}(p_x^2+p_y^2+p_z^2)-e^2(x^2+y^2+z^2)^{-\frac{1}{2}}=E.$$

Pomocí kanonické transformace[7])

$$x=\frac{\partial V_1}{\partial p_x},\qquad y=\frac{\partial V_1}{\partial p_y},\qquad z=\frac{\partial V_1}{\partial p_z},$$

$$p_i=\frac{\partial V_1}{\partial q_i},\quad (i=1,2,3),$$

$$V_1=(p_y\sin q_3+p_x\cos q_3)\,q_1\cos q_2+$$
$$+\sqrt{p_z^2+(p_y\cos q_3-p_x\sin q_3)^2}\,.\,q_1\sin q_2,$$

přejde Hamiltonova funkce v novou

$$H_2=\frac{1}{2m}\left(p_1^2+\frac{p_2^2}{q_1^2}\right)-\frac{e^2}{q_1}=E.$$

Pomocí další kanonické transformace[7])

$$Q_i=\frac{\partial V_2}{\partial P_i},\qquad p_i=\frac{\partial V_2}{\partial q_i},\qquad (i=1,2,3),$$

$$V_2=\int_{\xi}^{q_1}dq_1\sqrt{-\frac{m^2e^4}{P_1^2}+\frac{2me^2}{q_1}-\frac{P_2^2}{q_1^2}}+P_2q_2+P_3q_3$$

($\xi$ jest minimální hmota souřadnice $q_1$, jest to vzdálenost perihelia elektronu od jádra) přejde poslední Hamiltonova funkce v novou

$$H_3=-\frac{me^4}{2P_1^2}=E,$$

jejíž tvar jest však (až na označení) úplně týž jako v případě degenerovaném (kruhové dráhy elektronu); další postup jest úplně stejný, neboť $Q_1$ (kanonicky sdružené k $P_1$) jest střední anomalie

---

[7]) J. M. Burgers, Het atoommodel van Rutherford-Bohr, Haarlem 1918, pp. 80—81. — Viz též: E. T. Whittaker: Analytische Dynamik der Punkte und starrer Körper. Berlin 1924, p. 377. (J. Springer).

elektronu v jeho dráze a mění se od 0 do $2\pi$ právě jako úhel otočení $\varphi$ u rotátoru s pevnou osou.

6. Résumé. — Z předešlého jest patrno, že obecně sice nelze ve vlnové mechanice Schrödingerově pro zjednodušení počtu (jak ukazuje příklad rotátorů) pracovati se systémem degenerovaným a míti zato, že obdržíme v nejnepříznivějším případě výsledek, jenž bude speciálním případem výsledku příslušejícího systému nedegenerovanému, avšak že existují výjimky. Jedna taková významná výjimka jest u atomu vodíku (problém jednoho elektronu). Mimo to v hořejších řádcích jest podán nový postup sloužící k nalezení kvantových niveaux energie podle zásad Schrödingerových pro atom vodíku (i v obecném, nedegenerovaném případě), jehož výhoda záleží v tom, že se vyhneme dosti složitému řešení vlnové rovnice Schrödingerovy, původnímu problému příslušející, převedením matematické formulace celého problému na řešení zcela jednoduchého příkladu, t. zv. rotátoru s pevnou osou v prostoru.

Ústav pro teoretickou fysiku Karlovy university
v Praze 29. září 1927.

*

## Note sur la mécanique ondulatoire de Schrödinger.

(Extrait de l'article précédent.)


E. Schrödinger a fait voir, par l'exemple du rotateur autour d'un axe fixe et du rotateur autour d'un axe libre, qu'on ne peut pas considérer — pour simplifier le calcul — un système mécanique dégénéré et s'attendre à ce qu'on obtienne, dans le cas le moins favorable, un résultat qui soit un cas particulier du résultat, valable pour le système dégénéré. Dans le présent travail, l'auteur fait voir que pour l'atome d'hydrogène il y a une exception, à savoir que le problème d'un seul électron, parcourant un orbite circulaire autour du noyau, donne le même résultat que le cas général où l'électron parcourt une ellipse de Képler. On peut, en effet, prendre pour point de départ la fonction de Hamilton

$$H^{**} = E^2 \frac{2p^2_\varphi}{me^4} = -E$$

où $E$ désigne l'énergie totale de l'électron, $m$ sa masse, $e$ sa charge et $p_\varphi$ le moment de quantité de mouvement, correspondant à l'angle de rotation; par-là, ce problème est réduit à celui d'un rotateur autour d'un axe fixe, dont le moment d'inertie est égal à $me^4/4E^2$ et l'énergie totale à $-E$.

De plus, l'auteur fait voir qu'on peut réduire le problème de l'atome d'hydrogène, même dans le cas général, au problème du rotateur autour d'un axe fixe, car on peut, par deux transformations

canoniques successives, donner à la fonction de Hamilton du cas général la forme

$$H_3 = -\frac{me^4}{2P^2_1} = E,$$

où $P_1$ est le moment de quantité de mouvement correspondant à l'angle $Q_1$ qui désigne »l'anomalie moyenne« et varie de 0 à $2\pi$. On peut introduire, au lieu de cette fonction $H_3$, une autre fonction de Hamilton

$$H = E^2 \frac{2P_1^2}{me^4} = -E$$

et le reste du calcul se fait de la même manière que dans le cas spécial des orbites circulaires. Cette manière a l'avantage d'éviter la résolution, assez compliquée, de l'équation ondulatoire de Schrödinger, appartenant au problème primitif.