530.145.6

КВАНТОВАНИЕ КАК ЗАДАЧА О СОБСТВЕННЫХ ЗНАЧЕНИЯХ **)

(первое сообщение)

Э. Шрёдингер (Цюрих)

(Поступило 27 января 1926 г.)

§ 1. В этом сообщении я собираюсь показать на простейшем примере нерелятивистского свободного атома водорода, что обычные правила квантования могут быть заменены другими положениями, в которых уже не вводится каких-либо «целых чисел». Целочисленность получается при этом естественным образом сама по себе подобно тому, как сама по себе получается целочисленность *числа узлов* при рассмотрении колеблющейся

---

*) В частном случае осциллятора Планка значение частоты получается правильной в любом случае, так как энергия является линейной функцией переменной действия J.

**) E. Schrödinger, Quantisierung als Eigenwertproblem (Erste Mitteilung), Ann. d. Phys. (Lpz.) 79 (Hf. 4), 361—376 (1926). Перепечатывается в переводе А. М. Бродского из сборника «Вариационные принципы механики» (редакция, послесловие и примечания Л. С. Полака, М., Физматгиз, 1959), с. 668—678.

струны. Это новое представление может быть обобщено, и я думаю, что оно тесно связано с истинной природой квантования.

Обычная форма квантовых правил связана с уравнением в частных производных Гамильтона:

$$H\left(q, \frac{\partial S}{\partial q}\right) = E. \tag{1}$$

Ищется решение этого уравнения, представляющее собой *сумму* функций, каждая из которых зависит только от одной из независимых переменных q.

Введем теперь вместо S новую неизвестную функцию ψ так, чтобы эта функця ψ имела вид *произведения* функций, зависящих только от одной координаты. Для этого положим

$$S = K \ln \psi. \tag{2}$$

Постоянную K приходится ввести из соображений размерности, по которым она должна обладать размерностью *действия*. Таким образом, получаем соотношение

$$H\left(q, \frac{K}{\psi}\frac{\partial \psi}{\partial q}\right) = E. \tag{1'}$$

Мы *не* будем искать решение уравнения (1′), а поставим следующую задачу. При пренебрежении изменениями массы уравнение (1′) можно всегда свести, по крайней мере в случае *одно*электронной проблемы, к следующему виду:

квадратичная форма от функции ψ и ее первых производных равна нулю.

Ищем такую действительную во всем конфигурационном пространстве, однозначную, ограниченную и всюду дважды дифференцируемую функцию ψ, которая дает *экстремальное значение* интегралу от упомянутой квадратичной формы, распространенному по всему конфигурационному пространству *). *Эта вариационная проблема и заменяет у нас квантовые условия.*

Возьмем сначала H в виде функции Гамильтона кеплеровой проблемы и покажем, что выставленное требование может быть выполнено не для всех, а только для всех *положительных* и лишь для некоторых *дискретных отрицательных значений* E. Это означает, что названная вариационная проблема имеет непрерывную и дискретную области спектра собственных значений. Дискретная часть спектра соответствует *бальмеровским* термам, а непрерывная — энергиям движения по гиперболическим траекториям. Чтобы сохранялось численное соответствие, величину K следует приравнять $h/2\pi$.

Поскольку выбор системы координат является несущественным при установлении вариационных уравнений, воспользуемся прямоугольными декартовыми координатами. Тогда уравнение (1′) будет записываться в нашем случае (e, m —заряд и масса электрона) следующим образом**):

$$\left(\frac{\partial \psi}{\partial x}\right)^2 + \left(\frac{\partial \psi}{\partial y}\right)^2 + \left(\frac{\partial \psi}{\partial z}\right)^2 - \frac{2m}{K^2}\left(E + \frac{e^2}{r}\right)\psi^2 = 0, \tag{1''}$$

$$r = \sqrt{x^2 + y^2 + z^2},$$

*) Я не упускаю из вида, что подобная формулировка не является вполне однозначной.

**) Таким образом, уже на второй странице своего первого сообщения Шрёдингер написал уравнение для стационарной задачи электрона, известное под его именем и вошедшее как основное в волновую механику атома. Для полного совпадения с обычным видом уравнения Шрёдингера, как оно фигурирует во всех курсах квантовой механики, достаточно положить $K^2 = (h/2\pi)^2$. (*Прим. Л. С. Полака.*)

и наша вариационная проблема примет вид

$$\delta J = \delta \int\int\int dx\,dy\,dz \left[\left(\frac{\partial\psi}{\partial x}\right)^2 + \left(\frac{\partial\psi}{\partial y}\right)^2 + \left(\frac{\partial\psi}{\partial z}\right)^2 - \frac{2m}{K^2}\left(E + \frac{e^2}{r}\right)\psi^2 \right] = 0. \quad (3)$$

Интеграл берется здесь по всему пространству. Обычным способом отсюда получаем

$$\frac{1}{2}\delta J = \int df \delta\psi \frac{\partial\psi}{\partial n} - \int\int\int dx\,dy\,dz\delta\psi \left[\Delta\psi + \frac{2m}{K^2}\left(E + \frac{e^2}{r}\right)\psi\right] = 0. \quad (4)$$

Следовательно, должно быть, во-первых, справедливо уравнение

$$\Delta\psi + \frac{2m}{K^2}\left(E + \frac{e^2}{r}\right)\psi = 0, \quad (5)$$

и, во-вторых, должен равняться нулю распространенный по всей бесконечно удаленной замкнутой поверхности интеграл

$$\int df \delta\psi \frac{\partial\psi}{\partial n} = 0. \quad (6)$$

(Из (6) следует, что мы должны наложить дополнительное условие, касающееся поведения $\delta\psi$ в бесконечности, если хотим действительно получить упомянутый выше *непрерывный* спектр. На данном вопросе мы еще специально остановимся ниже.)

Уравнение (5) можно решить, *например*, в сферических координатах r, ϑ, φ, представив ψ в виде *произведения* функций от r, ϑ и φ. Этот метод решения общеизвестен. Зависимость от углов будет выражаться *шаровой функцией*, зависимость от радиуса r (соответствующую функцию мы обозначим через χ) можно получить без труда из дифференциального уравнения

$$\frac{\partial^2\chi}{\partial r^2} + \frac{2}{r}\frac{\partial\chi}{\partial r} + \left(\frac{2mE}{K^2} + \frac{2me^2}{K^2 r} - \frac{n(n+1)}{r^2}\right)\chi = 0 \qquad (n = 0, 1, 2, 3, \ldots). \quad (7)$$

Как известно, n должно быть *обязательно* целым, в противном случае зависимость от углов не будет *однозначной*. Нам нужны лишь решения (7), которые остаются конечными для всех положительных, действительных значений r. Уравнение (7) имеет на комплексной r-плоскости *две* особенности при $r = 0$ и при $r = \infty$, причем лишь во второй из них, $r = \infty$, *все* интегралы уравнения будут иметь существенно особую точку *). Эти две особые точки являются *граничными для нашего действительного интервала* изменения r. Как известно, в подобном случае требование *ограниченности* в граничных точках для функции χ равносильно наложению *граничного условия*. Уравнение, *вообще говоря*, может не иметь ни одного интеграла, остающегося ограниченным в *обеих* этих точках; подобный интеграл существует лишь при некоторых специальных значениях входящих в уравнения постоянных. Эти специальные значения следует определить.

Рассмотренные выше положения составляют *основное содержание* всего исследования.

Изучим прежде всего поведение решения в особой точке $r=0$. Так называемое *определяющее уравнение*, характеризующее поведение интеграла

*) Я глубоко благодарен Герману Вейлю за его помощь в решении уравнения (7). В дальнейшем за подтверждением не доказанных в самой работе утверждений я отсылаю к книге: L. Schlesinger, Differentialgleichungen, Sammlung Schubert, Nr. 13, Göschen, 1900 (см. особенно гл. 3 и 5).

в особой точке, будет в данном случае иметь вид

$$\rho(\rho-1)+2\rho-n(n+1)=0, \tag{8}$$

причем его корни равны

$$\rho_1=n, \ \rho_2=-(n+1). \tag{8'}$$

Оба канонических интеграла будут содержать в этой точке n и соответственно $-(n+1)$ в показателе степени. Из положительности n следует, что для нашей цели пригоден лишь *первый* из этих интегралов, который может быть представлен в виде степенного ряда, начинающегося с r^n, поскольку он соответствует *большему* значению степени n. (Второй, не интересующий нас интеграл, соответствующий меньшему значению корня определяющего уравнения, может при разложении содержать логарифмический член, поскольку разность $-(n+1)-n$ целочисленна.) Так как ближайшая особая точка лежит в бесконечности, ряд, соответствующий взятому нами первому интегралу, везде сходится и представляет собой *целую трансцендентную функцию*. Мы установили, таким образом:

Искомое решение представляет собой определенную с точностью до несущественного постоянного множителя однозначную целую трансцендентную функцию, соответствующую при $r=0$ показателю степени n.

Теперь нужно исследовать поведение этой функции при *стремлении r к бесконечности* по положительной действительной оси. Для этого сделаем в уравнении (7) подстановку

$$\chi=r^{\alpha}U, \tag{9}$$

где α подобрано таким образом, чтобы исключить в уравнении (7) слагаемое, содержащее множитель $\frac{1}{r^2}$. Как нетрудно проверить, величина α при этом должна равняться или n, или $-(n+1)$, а уравнение (7) примет форму

$$\frac{d^2U}{dr^2}+\frac{2(\alpha+1)}{r}\frac{dU}{dr}+\frac{2m}{K^2}\left(E+\frac{e^2}{r}\right)U=0. \tag{7'}$$

Двум интегралам *этого* уравнения при $r=0$ соответствуют показатели степени 0 и $-2\alpha-1$.

При $\alpha=n$ *первый* из этих интегралов, а при $\alpha=-(n+1)$ *второй* интеграл будут соответствовать, согласно (9), нашей *искомой* целой трансцендентной функции, которая является однозначной. Не теряя общности, мы можем, следовательно, ограничиться *одним* из двух значений α. Выберем значение

$$\alpha=n. \tag{10}$$

Решению U при этом будет соответствовать при $r=0$ показатель степени, равный нулю. Уравнение (7') принадлежит к типу уравнений Лапласа, общий вид которых такой:

$$U''+\left(\delta_0+\frac{\delta_1}{r}\right)U'+\left(\varepsilon_0+\frac{\varepsilon_1}{r}\right)U=0. \tag{7''}$$

В нашем случае входящие сюда постоянные равны

$$\delta_0=0, \quad \delta_1=2(\alpha+1), \quad \varepsilon_0=\frac{2mE}{K^2}, \quad \varepsilon_1=\frac{2me^2}{K^2}. \tag{11}$$

Этот тип уравнений сравнительно легко поддается рассмотрению, *так как* преобразование Лапласа, в общем случае *не меняющее порядка* уравнения, сводит в *данном случае* уравнение (7'') к уравнению *первого* порядка, которое в свою очередь разрешимо в квадратурах. Это позволяет выразить решение уравнения (7″) в виде интеграла на комплексной плоскости. Я привожу здесь конечный результат *). Выражение

$$U=\int\limits_L e^{zr}(z-c_1)^{\alpha_1-1}(z-c_2)^{\alpha_2-1}\,dz \tag{12}$$

является решением уравнения (7″), если путь интегрирования L выбран так, чтобы имело место равенство

$$\int\limits_L \frac{d}{dz}\left[e^{zr}(z-c_1)^{\alpha_1}(z-c_2)^{\alpha_2}\right]dz=0. \tag{13}$$

Константы c_1, c_2, α_1, α_2 имеют следующие значения: c_1 и c_2 представляют собой корни квадратного уравнения

$$z^2+\delta_0 z+\varepsilon_0=0, \tag{14}$$

а α_1 и α_2 определяются формулами

$$\alpha_1=\frac{\varepsilon_1+\delta_1 c_1}{c_1-c_2},\qquad \alpha_2=\frac{\varepsilon_1+\delta_1 c_2}{c_2-c_1}. \tag{14′}$$

Таким образом, в частном случае уравнения (7′) согласно (11) и (10) имеем

$$\begin{gathered} c_1=+\sqrt{-\frac{2mE}{K^2}},\qquad c_2=-\sqrt{-\frac{2mE}{K^2}},\\ \alpha_1=\frac{me^2}{K\overset{+}{\sqrt{-2mE}}}+n+1,\ \alpha_2=-\frac{me^2}{K\overset{+}{\sqrt{-2mE}}}+n+1. \end{gathered} \tag{14″}$$

Интегральное представление (12) позволяет не только изучить асимптотическое поведение общей совокупности решений уравнения (7″) при r, стремящемся к бесконечности, но и дает возможность исследовать некоторое *определенное* решение, что всегда значительно труднее.

Мы исключим пока тот случай, при котором постоянные α_1 и α_2 равны действительным целым числам. Это равенство имеет место (причем всегда одновременно для обеих постоянных) лишь тогда, когда выполняется условие

$$\frac{me^2}{K\overset{+}{\sqrt{-2mE}}}=\text{действительное целое число.} \tag{15}$$

Таким образом, мы считаем, что равенство (15) не выполняется.

Поведение совокупности решений при стремлении r к бесконечности по определенному пути (в нашем случае r стремится к бесконечности всегда по положительной действительной оси) определяется поведением двух линейно независимых решений, которые получаются при следующих двух *особо подобранных* путях интегрирования L и которые мы обозначим через U_1 и U_2 **). По *обоим* путям интегрирования z выходит из бесконечности и возвращается обратно в таком направлении, что имеет место соотношение

$$\lim_{z=\infty} e^{zr}=0, \tag{16}$$

*) См. предыдущее примечание. Теория этого уравнения развита Пуанкаре и Горном (J. Horn).

**) В том случае, когда выполняется равенство (15), по крайней мере один из описанных в тексте путей интегрирования не может быть использован, так как соответствующий интеграл равняется при этом нулю.

т. е. действительная часть zr стремится к $-\infty$. Благодаря этому выполняется условие (13). *При этом в одном* случае (решение U_1) обходится один раз точка c_1, а в *другом* случае (решение U_2) — точка c_2.

Оба эти решения при достаточно больших положительных действительных значениях r имеют следующие *асимптотические* (в смысле Пуанкаре) представления:

$$\begin{aligned} U_1 &\sim e^{c_1 r} r^{-\alpha_1} (-1)^{\alpha_1} (e^{2\pi i \alpha_1} - 1) \Gamma(\alpha_1) (c_1 - c_2)^{\alpha_2 - 1}, \\ U_2 &\sim e^{c_2 r} r^{-\alpha_2} (-1)^{\alpha_2} (e^{2\pi i \alpha_2} - 1) \Gamma(\alpha_2) (c_2 - c_1)^{\alpha_1 - 1}, \end{aligned} \tag{17}$$

причем мы ограничились здесь первыми членами асимптотических разложений по возрастающим целым отрицательным степеням. Рассмотрим, далее, раздельно случаи $E > 0$ и $E < 0$.

1. $E > 0$. Прежде всего отметим, что в этом случае равенство (15) автоматически не выполняется, так как величина $\sqrt{-2mE}$ является чисто мнимой. Согласно (14″) чисто мнимыми будут значения C_1 и C_2. Таким образом, поскольку r вещественно, экспоненциальные функции в формуле (17) являются ограниченными периодическими функциями. Принимая также значения α_1 и α_2, можно из (14″) получить, что *оба решения* U_1 и U_2 вблизи нуля пропорциональны r^{-n-1}. *То же самое должно иметь место и для исследуемого нами случая целого трансцендентного* U, *поскольку последнее всегда может быть составлено из некоторой линейной комбинации* U_1 *и* U_2. Соотношение (9) вместе с (10) показывает, далее, что функция χ, т. е. целое трансцендентное решение *исходного* уравнения (7), все еще пропорциональна $1/r$ вблизи нуля, так как χ можно получить умножением U на r^n. Иначе говоря, имеет место следующее:

Эйлеровское дифференциальное уравнение (5) *нашей вариационной задачи имеет при всех положительных значениях* E *решения, которые во всем пространстве однозначны, ограничены, непрерывны и стремятся к нулю как* $1/r$, *все время непрерывно осциллируя.* На поверхностном условии (6) мы еще должны будем остановиться особо.

2. $E < 0$. В данном случае *заранее не очевидно*, что равенство (15) не имеет места, но мы все же вначале предположим. Тогда, согласно формулам (14″) и (17), функция U_1 неограниченно возрастает при $r \to \infty$, функция U_2, наоборот, *экспоненциально* стремится к нулю. Исследуемое целое трансцендентное U (так же как и χ) останется тогда и только тогда ограниченным, если оно будет совпадать с точностью до численного коэффициента с решением U_2. *Это, однако, не имеет места*, что можно проверить следующим образом: выбираем в выражении (12) *замкнутый* путь интегрирования L, обходящий *обе* точки c_1 и c_2, этот путь будет *действительно замкнутым* на римановой плоскости подынтегрального выражения из-за целочисленности *суммы* $\alpha_1 + \alpha_2$; следовательно, условие (13) автоматически выполняется, после чего легко показать, что интеграл (12) представляет в данном случае *нашу целую трансцендентную функцию* U. Этот интеграл в самом деле можно разложить по положительным степеням r в ряд, который сходится во всяком случае при достаточно малых r, так что данный интеграл должен являться решением дифференциального уравнения (7′), совпадающим с U. Итак, решение U представляется с помощью (12), если за L взять замкнутый путь, обходящий точки c_1 и c_2. Этот замкнутый путь можно *аддитивно составить* из частей рассмотренных ранее путей интегрирования, соответствующих U_1 и U_2, с *не равными нулю коэффициентами*, например 1 и $e^{2\pi i \alpha_1}$. Таким образом, решение U действительно нельзя получить из одной функции U_2, в него обязательно должна также входить функция U_1.

Наше целое трансцендентное U *не* будет, следовательно, при сделанных предположениях и стремящемся к бесконечности r ограниченным. Не проводя пока *полного исследования*, т. е. не приводя доказательства того, что примененный способ дает *все* линейно независимые решения, мы можем высказать следующее положение:

Для отрицательных E, не удовлетворяющих условию (15), *рассматриваемая вариационная задача не имеет решения.*

Нам остается теперь рассмотреть лишь дискретную совокупность отрицательных значений E, для которых *выполняется условие* (15). Оба значения, α_1 и α_2, будут при этом целочисленными. Из двух путей интегрирования, приводивших нас ранее к фундаментальной системе U_1, U_2, первый должен быть, несомненно, изменен, чтобы не получить равного нулю результата. Дело в том, что величина $\alpha_1 - 1$, безусловно, положительна, так что точка c_1 не является ни точкой разветвления, ни полюсом подынтегрального выражения, которое в этой точке имеет обычный нуль. Точка c_2 тоже может стать регулярной, если $\alpha_2 - 1$ будет отрицательной. В *каждом* из этих случаев, однако, можно без труда подобрать два подходящих пути L и даже провести интегрирование в замкнутой форме с помощью обычных функций, тем самым вполне определив поведение решений.

Пусть, в частности,

$$\frac{me^2}{K\sqrt{-2mE}} = l \qquad (l = 1, 2, 3, 4, \ldots). \tag{15'}$$

Тогда согласно (14″) имеют место равенства

$$\alpha_1 - 1 = l + n, \quad \alpha_2 - 1 = -l + n. \tag{14'''}$$

Рассмотрим раздельно случаи $l \leqslant n$ и $l > n$. Пусть

а) $l \leqslant n$. При этом обе точки, c_2 и c_1, теряют свой сингулярный характер, благодаря чему появляется возможность использовать их в качестве начального или конечного пункта пути интегрирования L без нарушения условия (13). Третьей, удовлетворяющей нашим требованиям, граничной точкой является отрицательная бесконечность. Формула (12) при любом из путей интегрирования между двумя из этих трех точек даст решение уравнения, причем среди этих решений только два будут линейно независимыми, как это можно легко проверить, вычислив соответствующие интегралы в замкнутой форме. В частности, *целое трансцендентное решение* может быть получено при интегрировании от c_1 и c_2. Без каких-либо вычислений ясно, что *этот* интеграл остается регулярным при $r = 0$. Я это подчеркиваю в связи с тем, что фактическое вычисление интеграла в данном случае только усложняет рассмотрение. Наоборот, для выяснения поведения интеграла при стремящихся к бесконечности значениях r удобно провести *интегрирование*. При этом оказывается, что *ограниченным* при $r \to \infty$ остается лишь тот из *двух* линейно независимых интегралов, который при $r = 0$ равен бесконечности.

Таким образом, при $l \leqslant n$ задача *не имеет* решения.

б) $l > n$. Тогда, согласно формуле (14‴), точка c_1 будет нулем, а точка c_2 — полюсом по меньшей мере первого порядка для подынтегрального выражения. Два независимых решения могут быть получены здесь следующим образом: в одном случае используется путь интегрирования, идущий из точки $z = -\infty$ к нулю для предосторожности с обходом полюса; другой путь оканчивается в полюсе. *Последний* путь приводит к целому трансцендентному решению, умноженному на r^n, значение которого мы выписываем, не приводя вычислений (напоминаем при этом.

что умножение U на r^n возвращает нас к функции χ):

$$\chi = f\left(r\frac{\sqrt{-2mE}}{K}\right), \quad f(x) = x^n e^{-x} \sum_{k=0}^{l-n-1} \frac{(-2x)^k}{k!} \binom{l+n}{l-n-1-k}. \tag{18}$$

Это решение является пригодным, поскольку оно остается ограниченным при всех действительных положительных значениях r. Благодаря тому, что оно экспоненциально исчезает в бесконечности, выполняется также условие (6). Объединим результаты, полученные для отрицательных значений E следующим образом:

При отрицательных E наша вариационная задача имеет решения тогда и только тогда, когда значение E удовлетворяет условию (15). *При этом целое число n, соответствующее номеру используемой в решении шаровой функции, должно принимать значения меньшие, чем l, что может быть всегда выполнено по крайней мере одним способом. Входящая в решение функция, зависящая от r, определяется при этом уравнением* (18).

Подсчет числа постоянных в шаровой функции показывает:

Найденное решение содержит при допустимых комбинациях (n, l) *ровно $2n+1$ произвольных постоянных; при заданном значении l число произвольных постоянных равно, таким образом, l^2.*

Мы тем самым в основном подтвердили выставленные в начале статьи утверждения о свойствах спектра собственных значений нашей вариационной задачи, но доказательство еще нельзя считать полным.

Нужно, во-первых, еще показать полноту *всей* использованной системы собственных функций. Этим вопросом в данной статье я заниматься не буду. Согласно другим исследованиям можно предположить, что мы не пропустили какого-либо собственного значения.

Во-вторых, следует здесь напомнить, что использованные для положительных значений E собственные функции не являются действительными решениями поставленной нами вначале проблемы, поскольку при $r \to \infty$ значение ψ стремится к нулю лишь, как $1/r$, а значение $\partial\psi/\partial r$ — как $1/r^2$. Поверхностный интеграл (6) будет поэтому в бесконечности иметь порядок $\delta\psi$. Если желательно строго получить непрерывный спектр, то при *постановке задачи* нужно добавить то условие, что значение $\delta\psi$ в бесконечности равно нулю или по крайней мере стремится к постоянной величине, не зависящей от направления, по которому происходит стремление к бесконечности; в последнем случае поверхностный интеграл (6) обратится в нуль из-за свойств, входящих в решение шаровых функций.

§ 2. Из условия (15) следует, что

$$-E_l = \frac{me^4}{2K^2 l}. \tag{19}$$

Таким образом, мы получаем известные уровни энергии Бора, соответствующие бальмеровским термам, если положим введенную по соображениях размерности величину

$$K = \frac{h}{2\pi} \tag{20}$$

Тогда будет иметь место соотношение

$$-E_l = \frac{2\pi^2 me}{h^2 l^2}. \tag{19'}$$

Здесь l является главным квантовым числом, $n+1$ аналогично азимутальному квантовому числу; при более подробном определении шаровых функций мы сможем расщепить это число на величины, сопоставленные «экваториальному» и соответственно «полярному» кванту. Эти величины характеризуют *здесь* систему узловых линий на сфере. «Радиальное квантовое число» $l - n - 1$ определяет в свою очередь число «узловых сфер», так как нетрудно убедиться, что функция $f(x)$ в (18) имеет ровно $l - n - 1$ положительных действительных корней. Положительные значения E соответствуют континууму гиперболических траекторий, которым можно, в известном смысле, сопоставить значение радиального квантового числа, равное ∞. С этим согласуется поведение решения при $E > 0$, которое, как мы видели, стремится к бесконечности, *непрерывно* осциллируя.

Представляет еще интерес, что область, внутри которой функция (18) заметно отличается от нуля, определяется *по порядку величины* большой осью соответствующего эллипса. Обратная величина множителя, который входит у нас в качестве коэффициента перед r в аргументе безразмерной функции f, имеет, очевидно, размерность длины, а ее значение равно

$$\frac{K}{\sqrt{-2mE}}=\frac{K^2l}{me^2}=\frac{h^2l}{4\pi^2me^2}=\frac{a_l}{l}, \tag{21}$$

где a_l — длина полуоси эллипса, соответствующего l-й траектории. (Равенство (21) следует из формулы (19) и известного соотношения $E_l = -e^2/2a_l$.) Выражение (21) определяет порядок величины искомой области при малых l и n, так как тогда можно принять, что корни $f(x)$ мало отличаются от единицы. Это не будет иметь место, когда коэффициенты полиномов становятся большими числами. Я не могу сейчас рассмотреть вопрос о значениях корней подробнее, но полагаю, что приведенное утверждение при этом достаточно хорошо подтвердится.

§ 3. Довольно естественно связывать функцию ψ с *некоторым колебательным процессом* в атоме, в котором реальность электронных траекторий в последнее время неоднократно подвергалась сомнению. Я сначала тоже хотел обосновать новое понимание квантовых правил, используя указанный сравнительно наглядный путь, но потом предпочел рассмотренный в статье чисто математический способ, так как он дает возможность лучше выяснить все существенные стороны вопроса. Существенным мне кажется, что квантовые правила не вводятся больше как загадочное «требование целочисленности», а определяются необходимостью ограниченности и однозначности некоторой определенной пространственной функции.

Я не считаю возможным, до тех пор пока не будут успешно рассчитаны новым способом более сложные задачи, подробнее рассматривать истолкование введенного колебательного процесса. Не исключена возможность, что подобные расчеты приведут к простому совпадению с выводами обычной квантовой теории. Например, при рассмотрении по приведенному способу релятивистской задачи Кеплера, если действовать по указанным вначале правилам, получается замечательный результат: *полуцелые квантовые числа* (радиальное и азимутальное).

Все же может быть позволено несколько замечаний об истолковании приведенных положений. Прежде всего нельзя не упомянуть, что основным исходным толчком, приведшим к появлению приведенных здесь рассуждений, была диссертация де Бройля *), содержащая много глубоких идей, а также размышлений о пространственном распределении «фазовых волн», которым, как показано де Бройлем, всякий раз соответствует периодическое или квазипериодическое движение электрона, если только эти волны укладываются на траектории *целое число* раз. Главное отличие от теории де Бройля, в которой говорится о прямолинейно распространяющейся волне, заключается здесь в том, что мы рассматриваем, если

*) L. de Broglie, Ann. de Phys. 3, 22 (1925); Thèse, Paris, 1924.

использовать волновую трактовку, стоячие собственные колебания. Я недавно показал *), что, рассматривая подобные стоячие собственные колебания и пользуясь законом де Бройля дисперсии фазовых волн, можно обосновать теорию газов Эйнштейна. Предыдущее изложение является в свою очередь как бы обобщением рассуждений, приведенных в связи с упомянутой газовой моделью.

Если связывать одну из функций (18) после умножения на шаровую функцию n-го порядка с некоторым собственным колебанием, то тогда величина E должна быть как-то связана с *частотой* этого процесса. Обычно в подобных случаях колебательных процессов *параметр* (чаще всего обозначаемый через λ) пропорционален *квадрату* частоты. Но в нашем случае подобный подход привел бы для *отрицательных* значений E к *мнимым* значениям частоты и, кроме того, интуитивные соображения квантового теоретика говорят, что здесь должна иметь место пропорциональность значения E самой частоте, а не ее квадрату.

Противоречие разрешается следующим образом. Для параметра E вариационного соотношения (5) предварительно не установлен какой-либо *нулевой уровень*, в особенности потому, что искомая функция ψ содержит множителем, кроме функции, куда входит E, еще функцию от r, к которой при изменении нулевого уровня прибавляется аддитивная постоянная. Следовательно, «теоретик колебательных процессов» должен ожидать, что квадрату частоты будет пропорционально не само E, а величина, измененная по сравнению с E на некоторую постоянную. Пусть эта постоянная *очень велика* по сравнению с величинами всех имеющихся отрицательных значений E (которые, как следует из формулы (15), конечны). Тогда соответствующие частоты будут *действительными* и их относительно малые изменения действительно окажутся приближенно пропорциональными E. Но именно этого и требует «интуиция» квантового теоретика, поскольку нулевой уровень *энергии* не является фиксированным **).

Данное истолкование, по которому частота колебания определяется с помощью соотношения

$$\nu = C'\sqrt{C+E} = C'\sqrt{C} + \frac{C'}{2\sqrt{C}}E + \ldots, \tag{22}$$

где постоянная C много больше всех значений E, имеет еще то значительное преимущество, что *позволяет разъяснить боровское условие для частот*. Соответственно этому условию *частота излучения* пропорциональна разности энергий, т. е., согласно (22), пропорциональна разности между собственными частотами ν гипотетического колебательного процесса. Следовательно, хотя все собственные частоты много больше частот излучения, эти две величины тесно связаны друг с другом, причем последняя из них является как бы глубоким «разностным тоном» собственного колебания, протекающего со значительно большей частотой. То, что при переходе энергии от одного собственного колебания к другому появляется *нечто* (по моей трактовке, световая волна) с *частотой*, равной *разности* частот собственных колебаний, достаточно понятно; нужно лишь предположить, что световая волна первоначально связана с биениями, появляющимися всегда при подобных переходах в любой точке пространства, и что частота света определяется числом максимумов, через которые проходит наш колебательный процесс за секунду.

---

*) Phys. Zs. (находится в печати) (**27**, 95 (1926).— *Ред.*).

) По этому поводу см. второе сообщение Шрёдингера [Quantisierung als Eigenwertproblem (Zweite Mitteilung), Ann. d. Phys. (Lpz.) **79 (Hf. 6), 489 (1926)], где он дает более правильное освещение вопроса. (*Прим. Л. С. Полака.*)

Может возникнуть мнение, что приведенные выводы основываются на соотношении (22) в его *приближенном* виде (после разложения корня), благодаря чему само условие частот Бора становится, очевидно, также приближенным. Однако это заключение является ошибочным и будет полностью опровергнуто, если развить *релятивистскую* теорию, использование которой необходимо для глубокого понимания вопроса. Очевидно, что большая аддитивная постоянная C тесно связана с энергией покоя электрона mc^2. В релятивистской теории не потребуется также *вторичного* и *независимого* введения постоянной h (которая была уже введена в формуле (20)) в условие частот. Однако свободное от оговорок релятивистское рассмотрение, к сожалению, встречает пока определенные трудности, затронутые выше.

Не требует особых разъяснений то обстоятельство, что представление, по которому при квантовом переходе энергия переходит из одной колебательной формы в другую, значительно более удовлетворительно, чем представление о перескакивающем электроне. Изменение формы колебания всегда может происходить непрерывно в пространстве и времени, оно вполне может длиться время, равное определяемому экспериментально времени процесса излучения (ср. опыты с каналовыми лучами В. Вина), так что собственные частоты и соответственно частота биения изменятся, если на сравнительно короткое время излучающий атом окажется в электрическом поле. Соответствующий экспериментальный факт приводил до сих пор, как известно, к большим теоретическим трудностям; это видно, например, из обсуждения в работе Бора, Крамерса и Слэйтера.

Несмотря на все достигнутые успехи, нельзя все же забывать, что представление, по которому при отсутствии излучения атом находится в состоянии *некоторого* колебания с собственной частотой, все еще очень грубо отражает *фактически существующий* колебательный процесс. Как известно, макроскопическая система ведет себя в данном случае совершенно другим образом, излучая все время смесь частот собственных колебаний. Однако не следует поспешно обращать особое внимание на этот факт, так как и в случае отдельного атома не исключена возможность существования совокупности собственных колебаний, причем частоты только этих колебаний совпадают с частотами, к испусканию которых атом способен при *определенных условиях.* Кроме того, допущение возможности одновременного действительного излучения одним и тем же атомом целого ряда определенных спектральных линий не противоречит опыту. Таким образом, вполне можно считать, что лишь в нормальном состоянии (и приближенно в «метастабильных состояниях») атом колеблется с *одной* частотой и именно по этой причине *не* излучает, так как не появляется никаких биений. *Возбуждение* состоит в дополнительном появлении еще одной или нескольких частот, благодаря чему возникают затем биения, вызывающие испускание света.

Можно во всяком случае принять, что собственные колебания с одним и тем же значением частоты возбуждаются одновременно. Кратные собственные значения соответствуют на языке существующей теории случаям *вырождения.* Квантование вырожденной системы связано с произвольным распределением энергии по колебаниям с *одинаковыми* собственными значениями.

Добавление при корректуре 28/II 1926 г. В случае классической механики консервативной системы можно сформулировать нашу вариационную задачу изящнее, чем это было здесь сделано, без непосредственной связи с уравнением Гамильтона, следующим образом. Пусть $T(q, p)$ — кинетическая энергия, зависящая от координат и импульсов, V — потенциальная энергия, $d\tau$ —«рационально измеренный» элемент объема конфигурационного пространства, т. е. произведение dq_1, dq_2, . . ., dq_n, умноженное еще на квадратный корень из дискриминанта квадратичной формы $T(q, p)$ (ср. Г и б б с, Статистическая механика). Тогда значение функции ψ должно придавать «интегралу Гамильтона»

$$\int d\tau \left\{ K^2 T \left(q, \frac{\partial \psi}{\partial q} \right) + \psi^2 V \right\} \tag{23}$$

стационарное значение при дополнительном *нормирующем* условии

$$\int \psi^2 \, d\tau = 1. \tag{24}$$

Собственные значения этой вариационной проблемы, являющиеся, как известно, также *стационарными значениями* интеграла (23), и дают, согласно нашим предположениям, *квантовые уровни энергии.*

Относительно формулы (14″) следует еще заметить, что величина α_2 в основном совпадает с известным выражением Зоммерфельда $(-B/\sqrt{A}) + \sqrt{C}$ (ср.: Atombau und Spektrallinien, 4. Aufl., 1924, S. 775).

Цюрих,
Физический институт университета