Viktor Trkal
K interpretaci vlnové mechaniky

Časopis pro pěstování matematiky a fysiky, Vol. 58 (1929), No. 1-2, 132--140

Persistent URL: http://dml.cz/dmlcz/108908

K interpretaci vlnové mechaniky.

V. Trkal.

1. Před nedávnem použil L. de Broglie[1]) poprvé dávno známé analogie mezi klasickou mechanikou a geometrickou optikou k popisu kvantových zjevů. Tato analogie dá se nejvýstižněji vyjádřiti asi takto:[2]) Podle zákonů klasické mechaniky pohybuje se hmotný bod m v silovém poli, charakterisovaném potenciální energií V právě, tak jako jednoduše periodický paprsek v nehomogenním dispergujícím isotropním tělese, jehož index lomu jest

$$N = \frac{2\pi c}{\omega h} \sqrt{2m\left(\frac{\omega h}{2\pi} - V\right)},$$

kde h jest konstanta, jejíž rozměr jest dimense součinu energie a času.

Právě jako pohyb hmotného bodu je určen počátečním směrem a energií E, jest šíření paprsku jemu odpovídajícího určeno tímtéž počátečním směrem a cyklickou frekvencí $\omega = \frac{2\pi E}{h}$.

Opticky nehomogenní těleso je charakterisováno tím, že index lomu N se mění od místa k místu určitým způsobem. Dispergující nehomogenní těleso se vyznačuje tím, že index lomu N závisí též na frekvenci ω. V isotropickém nehomogenním dispergujícím tělese jest index lomu N v určitém bodě a pro určitou frekvenci ve všech směrech stejný. Zákony šíření světelných vln v takovémto tělese jsou obecně velmi složité; podstatně se zjednodušují, omezíme-li se na geometrickou čili paprskovou optiku jako zvláštní případ vlnové optiky, charakterisovaný tím, že každá dosti malá část vlnoplochy může býti považována za rovinnou vlnu, která se samostatně šíří ve směru své normály fázovou rychlostí $u = \frac{c}{N}$, kde c značí rychlost světla ve vakuu a N index lomu tělesa na příslušné vybrané části původní vlnoplochy. Dosazením horní hodnoty za N do posledního vzorce obdržíme

---

[1]) L. de Broglie, Ann. de phys. (10) *3*, 22, 1925.

[2]) Viz na př. M. Planck, Einführung in die theoretische Optik. Leipzig (S. Hirzel) 1927, p. 178.

pro rychlost u vztah:

$$u = \frac{E}{\sqrt{2m(E-V)}} = \frac{E}{\sqrt{2m \cdot \frac{1}{2}mv^2}} = \frac{E}{mv}.$$

Frekvencí jednoduše periodického paprsku rozumíme frekvenci jednoduše periodické rovinné vlny paprsku příslušné.

Myšlenku de Broglieovu sledoval dále E. Schrödinger[3]) a hleděl rozšířiti zákony klasické mechaniky (za účelem co možno největšího přiblížení ke skutečnosti) v tom směru, že vycházeje z analogie mechaniky s optikou nahradil geometrickou optiku — odpovídající klasické (paprskové) mechanice — vlnovou optikou; tím vznikla vlnová mechanika, která obsahuje starou mechaniku jako speciální případ.

Veliký úspěch této myšlenky ukázal se zavedením vlnové rovnice

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial t^2} = \frac{c^2}{N^2} \Delta \psi = u^2 \Delta \psi$$

do nové mechaniky. Při tom ψ jest vlnová funkce a Δ značí Laplaceův symbol. Po dosazení do této rovnice za N dostane vlnová rovnice tvar:

$$\frac{8\pi^2 m}{\omega^2 h^2} \left(\frac{\omega h}{2\pi} - V \right) \frac{\partial^2 \psi}{\partial t^2} = \Delta \psi.$$

Za použití našeho předpokladu, že děj je časově jednoduše periodický, tedy

$$\psi = e^{i(\omega t - \varphi)},$$

kde φ je funkce posice, obdržíme vlnovou rovnici ve tvaru

$$\Delta \varphi + \frac{8\pi^2 m}{h^2} \left(\frac{\omega h}{2\pi} - V \right) \varphi = 0$$

anebo

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

V případě, že E není dostatečně veliké tak, aby i pro největší hodnoty V byl rozdíl $E - V$ kladný, existují jenom tenkráte konečné a spojité funkce φ, hovící poslední rovnici, když E nabývá jistých, zcela určitých hodnot E_1, E_2, E_3 . . . závisejících na konstantě h a podle povahy problému určitým způsobem též na číslech přirozené řady číselné 1, 2, 3 . . . Kdežto v případě geometrické optiky jest konstanta h nekonečně malá, má ve vlnové optice pevnou hodnotu $h = 6{\cdot}55 \,.\, 10^{-27}$ *ergsec.*

O geometrické optice víme totiž, že neplatí obecně, nýbrž jenom tehdy, když vlnová délka příslušná frekvenci (ω) paprsku jest malá vůči poloměru křivosti dráhy paprsku. Ze vztahu

---

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

$\omega = \frac{2\pi E}{h}$ vidíme, že pro nekonečně malou hodnotu h obdržíme nekonečně velikou hodnotu ω a tedy nekonečně malou hodnotu vlnové délky $\lambda = \frac{2\pi c}{N\omega}$, čímž jest vždy vyhověno podmínce, že vlnová délka je malá vůči poloměru křivosti paprsku (dráhy hmotného bodu).

Pro vlnovou délku λ, kterou jest uvažovanému pohybu hmotného bodu přiřaditi, obdržíme z hořejších vzorců výraz

$$\lambda = \frac{2\pi c}{N\omega} = \frac{h}{\sqrt{2m\,(E - V)}} = \frac{h}{mv},$$

kterýžto vztah zavedl již L. de Broglie[3a]).

Při rovnoměrném kruhovém pohybu elektronu hmoty m, náboje e, rychlosti v a poloměru r kolem jádra rovná se odstředivá síla přítažlivé síle jádra, tedy

$$\frac{mv^2}{r} = \frac{e^2}{r^2},$$

odkud

$$v = \frac{e}{\sqrt{mr}};$$

tedy příslušná vlnová délka jest

$$\lambda = \frac{h}{e}\sqrt{\frac{r}{m}},$$

takže pro poměr vlnové délky λ k poloměru křivosti r vychází

$$\frac{\lambda}{r} = \frac{h}{e\sqrt{mr}}.$$

Má-li tento poměr míti hodnotu ne příliš malou, musí čitatel a jmenovatel tohoto zlomku býti veličiny téhož řádu, t. j. h musí býti přibližně rovno $e\sqrt{mr}$. Položíme-li za r zkusmo malou hodnotu 10^{-7} *cm* (řádová velikost atomových rozměrů) a za m a e experimetální hodnoty, t. j. $m = 9{\cdot}02.10^{-28}\,g$ a $e = 4{\cdot}77.10^{-10}$ $(erg\,cm)^{\frac{1}{2}}$ v míře elektrostatické, obdržíme pro h přibližnou hodnotu $4{\cdot}5.10^{-27}$ *erg sec*; tento odhad řádové velikosti h velmi pěkně souhlasí s přesnou hodnotou výše uvedenou. — Z toho jest viděti, že při Bohrově modelu atomu jest třeba užívati optiky resp. mechaniky vlnové a nikoli geometrické (paprskové).

[3a]) L. de Broglie, Ann. de phys. (10) *3*, 22, 1925 anebo L. de Broglie, Untersuchungen zur Quantentheorie, Leipzig (Akadem. Verlagsges.) 1927, p. 76.

Vlnová rovnice

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

dá se, jak též Schrödinger[4]) ukázal, odvoditi ryze formální cestou z jistého variačního principu. Tento postup jsem stručně reprodukoval a několika příklady osvětlil v článku[5]): »Poznámky k Schrödingerově vlnové mechanice.« Naproti tomu v těchto řádcích jest stručně podán myšlenkový postup, sloužící k odvození vlnové rovnice z fysikálních představ.

2. V dalším hodlám se pokusiti o příspěvek k interpretaci vlnové mechaniky aspoň v tomto jednoduchém případě.

Budeme se zabývati takovýmto stavem plynu, sestávajícího ze samých atomů vodíku: Všechny atomy až na jeden jsou »nevzbuzeny«, kdežto tento poslední jest »vzbuzen«, t. j. jeho elektron nalézá se v dostatečné vzdálenosti od jádra. Elektrické pole jádra tohoto »vzbuzeného« atomu můžeme v blízkém okolí dostatečně vzdáleného elektronu pokládati s velkou přibližností za homogenní. Působením tohoto (skoro) homogenního pole bude se elektron blížiti jádru po dráze parabolické (po případě přímočaré), pokud na něj nenarazí některý z atomů plynu, s nimiž budeme nakládati podobně jako v kinetické teorii plynů, takže nejbližším úkolem jest vyšetřiti vliv nárazů jednotlivých atomů na náš elektron.[6]) Úloha jádra »vzbuzeného« atomu jest čistě pasivní: má jedině za účel vytvořiti elektrické pole.

Nechť $f(s)$ značí pravděpodobnost, že náš elektron, pohybující se určitou rychlostí w, proběhne »volnou dráhu« (t. j. dráhu, během níž se nesrazí s žádným atomem) délky aspoň s. Pravděpodobnost, že elektron po proběhnutí této volné dráhy s srazí se na další trati ds s nějakým atomem plynu, jest $\frac{ds}{l}$, kde l jest střední volná dráha elektronu, pohybujícího se rychlostí w. Tudíž pravděpodobnost, že náš elektron urazí dráhu s, aniž se srazí s některým atomem plynu, jest

$$f(s)\left(1 - \frac{ds}{l}\right).$$

Tato pravděpodobnost však musí býti tatáž jako $f(s + ds)$, čili

$$f(s) = f'(s)\, ds.$$

Porovnáním obou výrazů najdeme

$$f'(s) = -\frac{f(s)}{l};$$

[4]) E. Schrödinger, Ann. d. Phys. *79*, 361—376, 1927 anebo výše citované »Abhandlungen zur Wellenmechanik«, p. 1, 2, 16.

[5]) V. Trkal, Časopis pro pěst. mat. a fys. *57*, 42, 1928.

[6]) G. Hertz, Verhandl. d. Dtsch. Phys. Ges., *19*, 272, 1917, A. D. Fokker, Physica, *5*, 334, 1925.

řešení této rovnice jest

$$f(s) = e^{-\frac{s}{l}},$$

kde integrační konstanta jest určena podmínkou

$$f(0) = 1.$$

Diferencováním tohoto výrazu najdeme pravděpodobnost, že elektron, pohybující se rychlostí w, urazí volnou dráhu, jejíž délka leží v intervalu mezi s a $s + ds$, totiž:[7])

$$e^{-\frac{s}{l}} \cdot \frac{ds}{l}.$$

V okamžiku, kdy začíná elektron svou volnou dráhu, nahraďme skutečné pole výše uvedeným homogenním polem o zrychlení γ[8]), s jehož směrem svírá rychlost v na počátku své volné dráhy úhel ϑ. Za krátkou dobu pádu τ urazí elektron dráhu, jejíž velikost jest v prvém přiblížení

$$s = v\,\tau$$

a v dalším přiblížení

$$s = v\,\tau + \tfrac{1}{2}\,(\gamma \cos \vartheta)\,\tau^2.$$

Tudíž pravděpodobnost, že elektron letící rychlostí

$$w = \frac{ds}{d\tau} = v + (\gamma \cos \vartheta)\,\tau$$

urazí volnou dráhu, jejíž trvání leží v časovém intervalu mezi τ a $\tau + d\,\tau$ jest

$$e^{-\frac{v\tau + \frac{1}{2}\gamma\tau^2 \cos\vartheta}{l}} \cdot \frac{v + \gamma\tau \cos \vartheta}{l}\, d\tau =$$

$$= e^{-\frac{v\tau}{l}} \cdot e^{-\frac{\gamma\tau^2}{2l}\cos\vartheta} \cdot \frac{v}{l}\left(1 + \frac{\gamma\tau}{v}\cos\vartheta\right) d\tau.$$

Za předpokladu, že $\gamma\tau << v$, lze tento výraz zjednodušiti na tvar

$$\frac{v}{l} \cdot e^{-\frac{v\tau}{l}}\left(1 - \frac{\gamma\tau^2}{2l}\cos\vartheta + \frac{\gamma\tau}{v}\cos\vartheta\right) d\tau.$$

Za čas τ posune se elektron k jádru ve směru pole o délku

$$(v \cos \vartheta)\,\tau + \tfrac{1}{2}\,\gamma\tau^2.$$

Vykoná-li elektron volnou dráhu, jejíž trvání leží v časovém intervalu mezi $\tau + d\tau$ a jejíž počáteční směr svíral se směrem pole úhel ϑ, posune se k jádru ve směru pole o délku

---

[7]) J. H. Jeans, The Dynamical Theory of Gases, 3th ed., Cambridge (University Press) 1921, p. 257.

[8]) Směrem pole γ rozumíme v dalším směr záporné intensity elektrického pole vzbuzeného jádrem.

$$\frac{v}{l}e^{-\frac{v\tau}{l}}\left(1-\frac{\gamma\tau^2}{2l}\cos\vartheta+\frac{\gamma\tau}{v}\cos\vartheta\right)(v\tau\cos\vartheta+\tfrac{1}{2}\gamma\tau^2)\,d\tau.$$

Proběhne-li tudíž elektron volnou dráhu, jejíž směr na počátku svíral se směrem pole úhel ϑ, posune se k jádru ve směru pole průměrně o délku

$$\int_0^\infty \frac{v}{l}\left(1-\frac{\gamma\tau^2}{2l}\cos\vartheta+\frac{\gamma\tau}{v}\cos\vartheta\right)(v\tau\cos\vartheta+\tfrac{1}{2}\gamma\tau^2)\,e^{-\frac{v\tau}{l}}\,d\tau.$$

Avšak počáteční směr ϑ volné dráhy může býti různý; učiníme-li předpoklad, že jsou přípustné jenom hodnoty ϑ plynoucí z t. zv. prostorového kvantování (podobně jako na př. v teorii magnetismu[9]), t. j. že

$$\cos\vartheta=\pm\frac{n_1}{n};\qquad (n_1=1,2,\ldots n),$$

a že jsou všechny stejně pravděpodobné, pak obdržíme střední posunutí elektronu k jádru v případě, že elektron proběhne volnou dráhu, vypočteme-li z předcházejícího integrálu střední hodnotu, t. j., píšeme-li tam místo $\cos^k\vartheta$

$$\overline{\cos^k\vartheta}=\frac{1}{n}\sum_{n_1=1}^{n}\left\{\left(+\frac{n_1}{n}\right)^k+\left(-\frac{n_1}{n}\right)^k\right\},\quad (k=1,2),\quad \text{t. j.}$$

$\cos\vartheta$ nahradíme výrazem $\overline{\cos\vartheta}=0$

$\cos^2\vartheta$ nahradíme výrazem $\overline{\cos^2\vartheta}=\frac{1}{3}\frac{(n+1)(2n+1)}{2n^2}$.

Pro veliké n se blíží poslední výraz hodnotě $\frac{1}{3}$, což odpovídá případu, že vůbec všechny směry ϑ jsou přípustné a stejně pravděpodobné.

A tak pro střední posunutí elektronu k jádru v případě, že elektron proběhne volnou dráhu, vychází hodnota

$$\gamma'\frac{l^2}{v^2}=\gamma(1-\overline{\cos^2\vartheta})\frac{l^2}{v^2}=\frac{2}{3}\frac{(n-1)(4n+1)}{4n^2}\gamma\frac{l^2}{v^2},$$

kterýžto výraz pro veliké n se blíží hodnotě $\frac{2}{3}\gamma\frac{l^2}{v^2}$.

Poněvadž úhrnný počet volných drah za časovou jednotku jest v/l, bude střední posunutí elektronu k jádru ve směru pole za časovou jednotku dáno hodnotou

$$u=\frac{\gamma' l}{v}=(1-\overline{\cos^2\vartheta})\frac{\gamma l}{v}=\frac{2}{3}\frac{(n-1)(4n+1)}{4n^2}\cdot\frac{\gamma l}{v}.$$

[9]) W. Gerlach, Magnetismus u. Atombau, článek v »Ergebnisse der exakten Naturwissenschaften«, Bd. 2, 1923, Berlin (J. Springer), p. 137.

Tuto veličinu nazveme střední postupnou rychlostí pohybu elektronu směrem k jádru.

Je tomu právě tak, jako kdyby elektron začínal svou volnou dráhu ve směru kolmém ke směru pole ($\cos\vartheta = 0$) a pohyboval se v homogenním elektrickém poli, jehož zrychlení jest

$$\gamma' = \gamma\,(1 - \overline{\cos^2\vartheta}) = \frac{2}{3}\,\frac{(n-1)(4n+1)}{4n^2}\,\gamma,$$

kde n jest celé číslo od 2 výše.

Střední postupnou rychlost elektronu lze psáti též ve tvaru:

$$u = \frac{m\gamma' l}{mv},$$

kde m jest hmota elektronu. Jmenovatel mv tohoto zlomku jest hybnost elektronu, čitatel $m\gamma' l$ jest práce, kterou vykoná elektron působením pole, udělujícího zrychlení γ', spadne-li ve směru pole o délku l. Věci se mají tak, jako by elektron konal samé volné dráhy stejné střední velikosti l (v rozličných směrech), a tu největší práce, kterou při proběhnutí střední volné dráhy může elektron vykonati, jest právě $m\gamma' l$, což jest tedy jeho úhrnná energie E při proběhnutí střední volné dráhy.

Užijeme-li analogie s geometrickou optikou v tom smyslu, jak to bylo vyloženo v odstavci 1, je možno vyložiti postup elektronu k jádru rychlostí u jako jednoduše periodický paprsek, šířící se fázovou rychlostí $u = \frac{c}{N}$ v nehomogenním, dispergujícím, isotropním tělese, jehož index lomu jest

$$N = \frac{c}{u} = c\,\frac{mv}{m\gamma' l} = \frac{c\sqrt{2m\,.\,\frac{1}{2}mv^2}}{E} = \frac{c\sqrt{2m\,(E-V)}}{E} = \frac{c\sqrt{2m\,(E-V)}}{h\nu},$$

kde V jest potenciální energie elektronu a $\nu = \frac{E}{h}$ jest frekvence jednoduše periodického paprsku.

Užijeme-li analogie s vlnovou optikou, nahradíme paprsek, šířící se rychlostí u vlnou, jejíž normála splývá s paprskem a jež šíří se rychlostí u podle zákona vyjádřeného vlnovou rovnicí

$$\frac{\partial^2\psi}{\partial t^2} = u^2\Delta\psi = \frac{c^2}{N^2}\,\Delta\psi,$$

kde ψ je vlnová funkce. Po dosazení za N

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

obdržíme rovnici

$$\frac{2m}{h^2\nu^2}\,(E-V)\,\frac{\partial^2\psi}{\partial t^2} = \Delta\psi.$$

Položíme-li $\psi = e^{i(2\pi\nu t - \varphi)}$, kde φ nezávisí na čase t, obdržíme známý tvar Schrödingerovy rovnice

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

3. Předešlé úvahy ukazují, že elektron příslušný k jádru vodíkového atomu působením nárazů okolních atomů plynových »postupuje« k jádru průměrnou rychlostí $u = \frac{m\gamma' l}{mv}$, kde m znamená hmotu elektronu, v jeho okamžiku rychlost, l střední volnou dráhu a γ' zrychlení přímo úměrné zrychlení pole, v němž se pohybuje. Dále $m\gamma' l$ lze pokládati za úhrnnou energii elektronu. Podle známé analogie s geometrickou optikou lze skutečný pohyb elektronu rychlostí v považovati za (fiktivní) paprsek šířící se rychlostí u, tudíž »postup« elektronu rychlostí u (k jádru) lze identifikovati s oním (fiktivním) paprskem šířícím se rychlostí u. Nahradíme-li geometrickou optiku vlnovou optikou, bude třeba zavésti místo paprsku, šířícího se rychlostí u, vlnu, šířící se toutéž rychlostí u, jejíž normálou jest onen paprsek.

Účelem předcházejících řádků bylo poukázati na možnost vyložiti paprsek resp. vlnu, která se mechanickému pohybu ve vlnové mechanice přiřazuje, poněkud názorněji než se dosud dálo.

Ostatně pojem názornosti nějaké fysikální teorie jest velice problematický, jak o tom svědčí velmi pěkný článek: Über die »Anschaulichkeit« physikalischer Theorien, který uveřejnil prof. pražské něm. university Ph. Frank v týdeníku »Die Naturwissenschaften«, 16, 121—128, 1928.

*

Au sujet de l'interprétation de la mécanique ondulatoire.

(Extrait de l'article précédent.)

Considérons l'état suivant d'un gaz consistant d'atomes d'hydrogène: Tous les atomes, sauf un, sont „non excités", un seul est „excité", c. à. d., son électron se trouve à une distance suffisante du noyau. On peut considérer le champ électrique de cet atome „excité", au voisinage d'un électron suffisamment éloigné, avec une grande approximation comme homogène. Sous l'action de ce champ (presque) homogène, l'électron se déplacera vers le noyau le long d'une parabole (ou même une droite), tant qu'il ne se heurtera pas contre un des atomes du gaz (ceux-ci seront traités comme dans la théorie cinétique des gaz), de sorte que le problème, qui se présente tout d'abord, est celui d'évaluer l'influence des chocs individuels des atomes sur l'électron considéré. Le rôle du noyau de l'atome „excité" est purement passif: le seul but du noyau est celui d'exciter le champ électrique. On trouve ensuite, par une considération semblable à celle faite par G. Hertz et A. D. Fokker, que la vitesse moyenne de translation de l'électron, se rapprochant du noyau, est donnée (par suite des chocs avec les autres atomes) par la formule

$$u = \frac{E}{mv}$$

où E est l'énergie totale, m la masse et v la vraie vitesse instantanée de l'électron.

Si l'on rapproche ce résultat des idées physiques de la mécanique ondulatoire de Schrödinger, on peut interpréter cette progression moyenne de l'électron vers le noyau au point de vue de l'optique géométrique comme un rayon se propageant avec la vitesse u, ou bien, au point de vue de l'optique ondulatoire, comme une onde se propageant avec la vitesse u et dont le mécanisme est décrit par l'équation des ondes

$$\ddot{\psi} = u^2 \Delta \psi$$

laquelle, pour $u = \frac{E}{mv} = \frac{h\nu}{mv}$, $\psi = e^{i(2\pi\nu t - \varphi)}$, $mv = \sqrt{2m(E - V)}$, se change en l'équation de Schrödinger

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

Ici, ν est la fréquence de cette onde, E l'énergie totale, V son énergie potentielle et h le quantum universel d'action.