

100 let Schrödingerových rovníc

Petr Dub

Ústav fyzikálního inženýrství a CEITEC VUT
Vysoké učení technické v Brně

100 LET SCHRÖDINGEROVÝCH ROVNIC

Alpbach
Tyrolsko



Vydejme se do poloviny 20. let 20. století, kdy se kvantová fyzika významně a rychle měnila. „Stará“ kvantová fyzika se vyčerpala a začala se rodit „nová“ kvantová fyzika – kvantová mechanika. Nejprve v podobě Heisenbergovy maticové mechaniky a krátce nato v podobě Schrödingerovy vlnové mechaniky. Její zrod budeme sledovat.

Nepůjde o detailní historické líčení událostí, ale především o výklad a analýzu fyzikálních myšlenek a originálních postupů tvůrců.

Seznámit se s původními pracemi fyziků, jejichž jména známe z učebnic, je přínosné nejen z hlediska historicko-kulturního, ale může přispět k hlubšímu pochopení výkladu v učebnicích. V nich se poznatky se předkládají už „hotové“, v uhlazené podobě namnoze velmi odlišné od původních prací, z nichž vyšly. Přestože některá východiska či postupy jsou v těchto původních pracích někdy nekonzistentní, divné, náhodné nebo i vadné, jejich studium je inspirativní.

Objevu předcházela dobrá znalost fyziky a originální nápad ...

Je dobré uvidět, že cesty nejsou přímočaré, jsou klikaté a některé také slepé.

Tvor lidský bloudí, pokud za čím spěje (Goethe, z prologu k Faustovi)

- * **12. 8. 1887** Vídeň
 - jedináček, „Lieblingskind“, nádherné dětství v dobře nejen materiálně zabezpečené rodině
 - matka byla dcera profesora chemie na univerzitě ve Vídni a Angličanky
 - do obecné školy nechodil, vychovával ho a vzdělával všestranně vzdělaný otec

- 1898 –1906** studuje na Akademickém gymnáziu ve Vídni (zajímala ho /po celý život/ literatura, filosofie, jazyky – klasické (latina, řečtina) a *angličtina, francouzština, španělština (těmi plynně hovořil)*)

- 1906** začal studovat na Vídeňské univerzitě poté, co Boltzmann spáchal sebevraždu

- 1910** promoval experimentální prací o vedení elektřiny na površích izolátorů ve vlhkém vzduchu

- 1911 –1914** asistent na experimentální fyzice (12 publikací) ve Vídni

- 1914** habilitace z fyziky na Vídeňské univerzitě

- 1914 –1918** důstojníkem ve válce ... později měl dostatek času na studium (věnoval se filosofii a fyzice, zejména obecné teorii relativity), napsal 8 prací

- 1920 –1921** profesor na univerzitách Jena, Stuttgart, Vratislav

- 1921 –...** řádný profesor teoretické fyziky na univerzitě v Curychu (nástupce P. Debye)

ERWIN RUDOLF JOSEF ALEXANDER SCHRÖDINGER

1921

řádný profesor teoretické fyziky na univerzitě v Curychu



ERWIN RUDOLF JOSEF ALEXANDER SCHRÖDINGER

1925

se seznamuje s de Broglieho disertací a hledá vlnovou rovnici



1921

řádný profesor teoretické fyziky na univerzitě v Curychu

1925

Schrödinger se seznamuje s de Broglieho disertací a hledá vlnovou rovnici

1926

Quantisierung als Eigenwertsproblem I

(27.1.1926) 16 stran, *Ann. Phys.*

$$\Delta\psi + \frac{2m}{\hbar^2} \left(E + \frac{e^2}{r} \right) \psi = 0 \quad E_n^H = -\frac{13,6 \text{ eV}}{n^2}$$

Quantisierung als Eigenwertsproblem II

(23. 2.1926) 39 stran , *Ann. Phys.*

fyzikální kostra teorie: vlnová mechanika, aplikace: oscilátor, rotátor

→ Quantisierung als Eigenwertsproblem III

(10. 5.1926) 54 stran , *Ann. Phys.*

rozvinutí teorie (Sturm-Liouville), stacionární teorie poruch, aplikace: Starkův jev

Quantisierung als Eigenwertsproblem IV

(21.6.1926), 30 stran , *Ann. Phys.*

$$i\hbar\dot{\Psi} = \hat{H}\Psi$$

a časově závislá teorie poruch, aplikace: interakce záření s atomem

Über das Verhältnis der Heisenberg-Born-Jordanschem Quantenrnechamik zu der meinem

(18.3.1926), 23 stran, *Ann. Phys.*

Erupce kreativity:

Schrödinger (38letý) v těchto pracích vybudoval novou teorii.
Během půl roku vzniklo přes 160 stran originální textu.

1925

Schrödinger se seznamuje s de Broglieho disertací a hledá vlnovou rovnici

1926

Quantisierung als Eigenwertsproblem I
(27.1.1926) 16 stran, *Ann. Phys.*

$$\Delta\psi + \frac{2m}{\hbar^2} (E - V)\psi = 0$$

Quantisierung als Eigenwertsproblem II
(23. 2.1926) 39 stran , *Ann. Phys.*

fyzikální kostr
oscilátor, rotát

→ Quantisierung als Eigenwertsproblem III
(10. 5.1926) 54 stran , *Ann. Phys.*

rozvinutí teor
teorie poruch

Quantisierung als Eigenwertsproblem IV
(21.6.1926), 30 stran , *Ann. Phys.*

$$i\hbar\dot{\Psi} = \hat{H}\Psi$$

Über das Verhältnis der Heisenberg-Born-Jordanschem Quant
(18.3.1926), 23 stran, *Ann. Phys.*

ANNALEN DER PHYSIK

GEGRÜNDET 1799 DURCH F. A. C. GREN
UND FORTGEFÜHRT DURCH L. W. GILBERT,
J. G. POGGENDORFF, G. u. E. WIEDEMANN,
P. DRUDE

VIERTE FOLGE

BAND 79
DER GANZEN REIHE 384. BAND

KURATORIUM:
M. PLANCK, E. WARBURG

UNTER MITWIRKUNG
DER DEUTSCHEN PHYSIKALISCHEN GESELLSCHAFT
HERAUSGEGEBEN VON

W. WIEN UND M. PLANCK

MIT ZEHN TAFELN



I 9 2 6

LEIPZIG · VERLAG VON JOHANN AMBROSIVS BARTH

1925

Schrödinger se seznamuje s de Broglieho disertací a hledá vlnovou rovnici

1926

Quantisierung als Eigenwertsproblem I

(27.1.1926) 16 stran, *Ann. Phys.*

$$\Delta\psi + \frac{2m}{\hbar^2} \left(E + \frac{e^2}{r} \right) \psi = 0 \quad E_n^H = -\frac{13,6 \text{ eV}}{n^2}$$

Quantisierung als Eigenwertsproblem II

(23. 2.1926) 39 stran , *Ann. Phys.*

fyzikální kostra teorie: vlnová mechanika, aplikace: oscilátor, rotátor

→ Quantisierung als Eigenwertsproblem III

(10. 5.1926) 54 stran , *Ann. Phys.*

rozvinutí teorie (Sturm-Liouville), stacionární teorie poruch, aplikace: Starkův jev

Quantisierung als Eigenwertsproblem IV

(21.6.1926), 30 stran , *Ann. Phys.*

$$i\hbar\dot{\Psi} = \hat{H}\Psi$$

a časově závislá teorie poruch, aplikace: interakce záření s atomem

Über das Verhältnis der Heisenberg-Born-Jordanschem Quantenrnechamik zu der meinem

(18.3.1926), 23 stran, *Ann. Phys.*

Die stetige Übergang von der Mikro- zur Makromechanik

(? 10.5.-21.6.1926), 3 strany , *Narurwissenschaften* (3.7.1926)

vlnový balík pro oscilátor

An undulatory theory of the mechanics of atoms and molecules

(3.9.1926) 22 stran, *Phys. Rev.*

1925

Schrödinger se seznamuje s de Broglieho disertací a hledá vlnovou rovnici

1926

Quantisierung als Eigenwertsproblem I

(27.1.1926) 16 stran, *Ann. Phys.*

(kvantová teorie atomu vodíku)

17.1.1926 došel do časopisu *Zeitschrift für Physik* rukopis článku, v němž W. Pauli vyřešil problém atomu vodíku Heisenbergovou (Bornovou, Jordanovou) maticovou mechanikou (z roku 1925).

(Tento článek představoval zlom v přijímání maticové mechaniky. V té době použitou matematiku totiž ovládalo jen málo fyziků a vzhledem ke složitosti teorie k ní většina fyziků měla nedůvěru.)

W. Pauli: *Z. Phys.* **36** (1926), 336-363.

$$\Delta\psi + \frac{2m}{\hbar^2} \left(E + \frac{e^2}{r} \right) \psi = 0 \quad E_n^H = -\frac{13,6 \text{ eV}}{n^2}$$

Über das Wasserstoffspektrum
vom Standpunkt der neuen Quantenmechanik.

Von W. Pauli jr. in Hamburg

(Eingegangen am 17. Januar 1926)

Es wird gezeigt, daß sich die Balmerterme eines A-Atoms aus der neuen Quantenmechanik richtig ergeben, wenn man die bisherigen Schwierigkeiten, die insbesondere im Falle der H-Spektren auftreten, in der neuen Theorie verschwinden. Auch die Intensitäten des Wasserstoffspektrums durch äußere elektrische und magnetische Felder aus dem Standpunkt der neuen Quantenmechanik ausdiskutiert. Die Relativitätskorrekturen sowie die Berechnung der Intensitäten (Intensitäten) bleibt jedoch zunächst noch vorbehalten.

§ 1. Die Grundlagen der neuen Quantenmechanik (nach Heisenberg¹⁾) eine Formulierung der Quantentheorie gegeben [worden], [die gegenüber der mehrfach periodischen Systeme einen großen Fortschritt darstellt]. Gemäß dieser Heisenbergschen Fassung der Quantenmechanik ist eine mechanisch-kinematische Veranschaulichung der Zustände der Elektronen in den stationären Zuständen des Atoms nicht möglich. Es werden außer den zeitlichen Mittelwerten der physikalischen Größen nur harmonische Partialschwingungen eingeleitet, die im Übergang zwischen zwei stationären Zuständen zugeordnet werden können. Der unmittelbare Zusammenhang mit den spontanen Emissionen des Systems stehen. Ist

ZEITSCHRIFT FÜR
PHYSIK

HERAUSGEGEBEN VON DER
DEUTSCHEN PHYSIKALISCHEN GESELLSCHAFT
ALS ERGÄNZUNG ZU IHREN „VERHANDLUNGEN“
UNTER DER REDAKTION VON

KARL SCHEEL

SECHSUNDZWANZIGSTER BAND

Heft 12 (Tiefdruck)
(Eingeleitet August 1926)

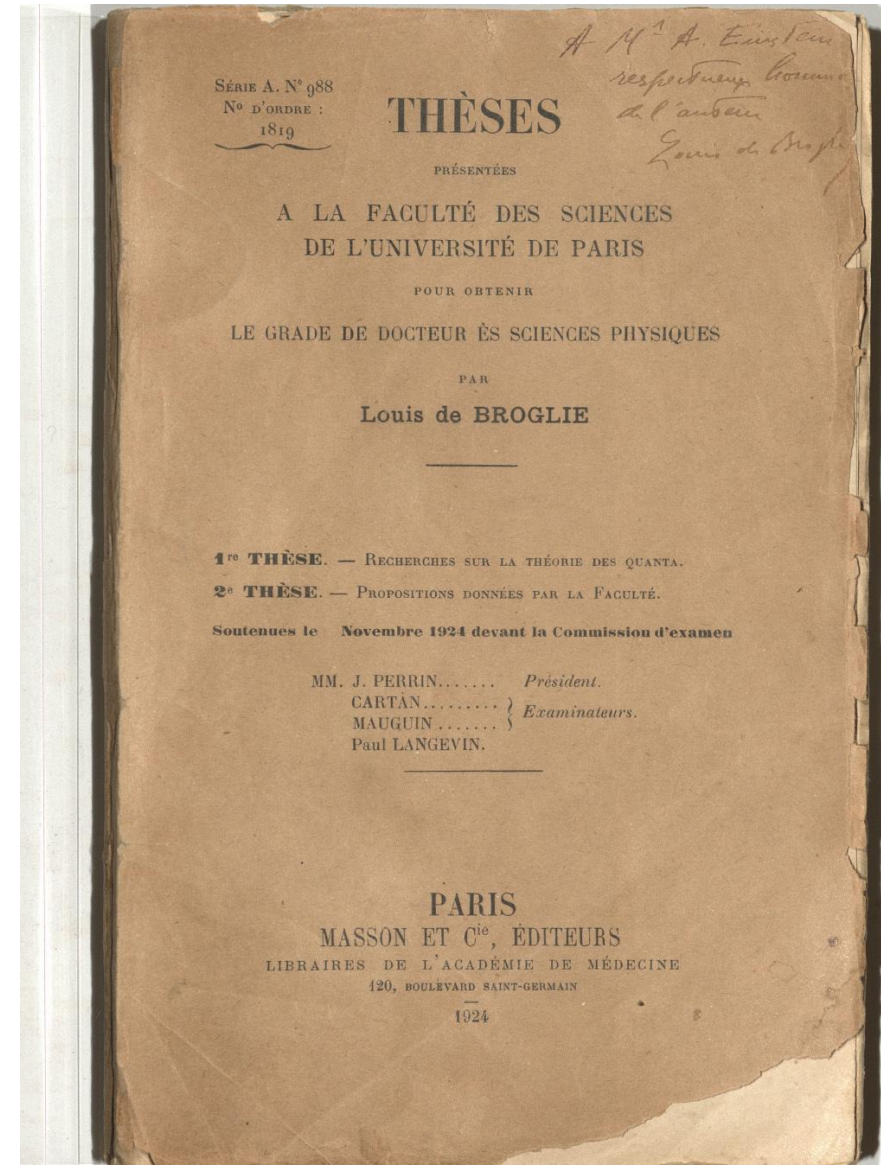
FRIEDR. VIEWEG & SOHN UND JULIUS SPRINGER
AKT.-GES. BRAUNSCHWEIG BERLIN

1926

SCHRÖDINGER SE SEZNAMUJE S DE BROGLIEHO TEORIÍ

1925 Schrödinger se seznamuje s de Broglieho disertací a hledá vlnovou rovnici

Čím se v letech 1923 a 1924 de Broglie zabýval a co uvedl ve své disertaci z roku 1924



1925 Schrödinger se seznamuje s de Broglieho disertací a hledá vlnovou rovnici

Čím se v letech 1923 a 1924 de Broglie zabýval a co uvedl ve své disertaci z roku 1924 ... publikované v roce 1925 ...
... která inspirovala Schrödingera

ANNALES
DE
PHYSIQUE

EXTRAIT

RECHERCHES SUR LA THÉORIE
DES QUANTA

Par M. Louis de BROGLIE

Annales de Physique — 10^e Série — Tome III — Janvier-Février 1925

MASSON & C^{ie}, ÉDITEURS
120, BOULEVARD ST-GERMAIN, PARIS (VI^e)

FREKVENCE

ENERGIE

1922

Dva Einsteinovy vztahy

$$hf = E \quad E = \frac{mc^2}{\sqrt{1 - \beta^2}}, \beta = v/c$$


Rozbor de Broglieho prací by zabral celou přednášku ...
Uvedeme jen hlavní výsledky ...

FREKVENCE $\longleftrightarrow$ ENERGIE

1922

Záření černého tělesa

Zhmotnění světla: „světelné atomy“

$$hf = \frac{m_{\text{fot}} c^2}{\sqrt{1 - (\tilde{c}/c)^2}} \quad m_{\text{fot}} \approx 10^{-50} \text{g} \quad \tilde{c}(f) \rightarrow c$$

1923

Objekt o hmotnosti m má klidovou (vnitřní) frekvenci

$$hf_0 = mc^2$$

Pokud se objekt se pohybuje rychlostí v vůči pozorovateli, pro pozorovatele frekvence je

$$hf = \frac{mc^2}{\sqrt{1 - \beta^2}}, \quad \beta = \frac{v}{c}$$

Pokud pozorovatel sleduje vnitřní periodický děj pohyblivého objektu, vidí jej zpomalený a připíše mu frekvenci

$$f_1 = f_0 \sqrt{1 - \beta^2}, \quad f = \frac{c}{T}$$

$$T_1 = T_0 / \sqrt{1 - \beta^2}$$

Frekvence

$$f = f_0 / \sqrt{1 - \beta^2} = mc^2 / h \sqrt{1 - \beta^2}, \beta = v/c$$

odpovídá **fiktivní** vlně, která doprovází objekt a šíří se **fázovou** rychlostí u .

Předpoklad: pokud v čase $t = 0$ souhlasí fáze **fiktivní** vlny s fází **vnitřního děje** objektu, bude se tato shoda fáze zachovávat. Tedy i tehdy, když se objekt za dobu τ posune rychlostí v do bodu x :

$$\sin 2\pi f(\tau - x/u) = \sin 2\pi f_1 \tau$$

$x = v\tau$

$f_1 = f_0 \sqrt{1 - \beta^2}$

}

$u = \frac{c^2}{v} > c$

Z ČEHO DE BROGLIE VYŠEL A K ČEMU DOŠEL

Frekvence

$$f = f_0 / \sqrt{1 - \beta^2} = mc^2 / h \sqrt{1 - \beta^2}, \beta = v/c$$

odpovídá fiktivní vlně, která doprovází objekt a šíří se fázovou rychlostí u .

Předpoklad: pokud v čase $t = 0$ souhlasí fáze fiktivní vlny s fází vnitřního děje objektu, bude se tato shoda fáze zachovávat. Tedy i tehdy, když se objekt za dobu τ posune rychlostí v do bodu x :

$$\sin 2\pi f(\tau - x/u) = \sin 2\pi f_1 \tau$$

$x = v\tau$ $f_1 = f_0 \sqrt{1 - \beta^2}$

}

$u = \frac{c^2}{v}$

Tento vztah (odvozený pro volnou částici) použil Schrödinger na elektron v atomu.

Z ČEHO DE BROGLIE VYŠEL A K ČEMU DOŠEL

Frekvence

$$f = f_0 / \sqrt{1 - \beta^2} = mc^2 / h \sqrt{1 - \beta^2}, \beta = v/c$$

odpovídá **fiktivní** vlně, která doprovází objekt a šíří se **fázovou** rychlostí u .

Předpoklad: pokud v čase $t = 0$ souhlasí fáze **fiktivní** vlny s fází **vnitřního děje** objektu, bude se tato shoda fáze zachovávat. Tedy i tehdy, když se objekt za dobu τ posune rychlostí v do bodu x :

$$\sin 2\pi f(\tau - x/u) = \sin 2\pi f_1 \tau$$

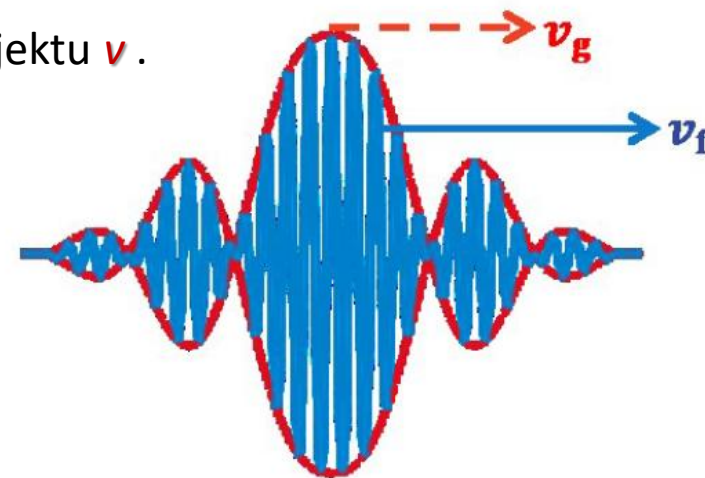
$x = v\tau$ $f_1 = f_0 \sqrt{1 - \beta^2}$

}

$u = \frac{c^2}{v}$

Tento vztah (odvozený pro volnou částici) použil Schrödinger na elektron v atomu.

Grupová rychlost **fiktivní** vlny $u_{gr} = \partial f / \partial (f/u)$ se rovná rychlosti objektu v .



Z ČEHO DE BROGLIE VYŠEL A K ČEMU DOŠEL

Frekvence

$$f = f_0 / \sqrt{1 - \beta^2} = mc^2 / h \sqrt{1 - \beta^2}, \beta = v/c$$

odpovídá **fiktivní** vlně, která doprovází objekt a šíří se **fázovou** rychlostí u .

Předpoklad: pokud v čase $t = 0$ souhlasí fáze **fiktivní** vlny s fází **vnitřního děje** objektu, bude se tato shoda fáze zachovávat. Tedy i tehdy, když se objekt za dobu τ posune rychlostí v do bodu x :

$$\sin 2\pi f(\tau - x/u) = \sin 2\pi f_1 \tau$$

$x = v\tau$ $f_1 = f_0 \sqrt{1 - \beta^2}$

}

$u = \frac{c^2}{v}$

Tento vztah (odvozený pro volnou částici) použil Schrödinger na elektron v atomu.

Grupová rychlost **fiktivní** vlny $u_{gr} = \partial f / \partial (f/u)$ se rovná rychlosti objektu v .

Vlnová délka **fiktivní** vlny
(volné částice)

$$\lambda = \frac{u}{f} = \frac{c^2/v}{mc^2/h\sqrt{1-\beta^2}} = \frac{h}{mv/\sqrt{1-\beta^2}} = \frac{h}{p}$$

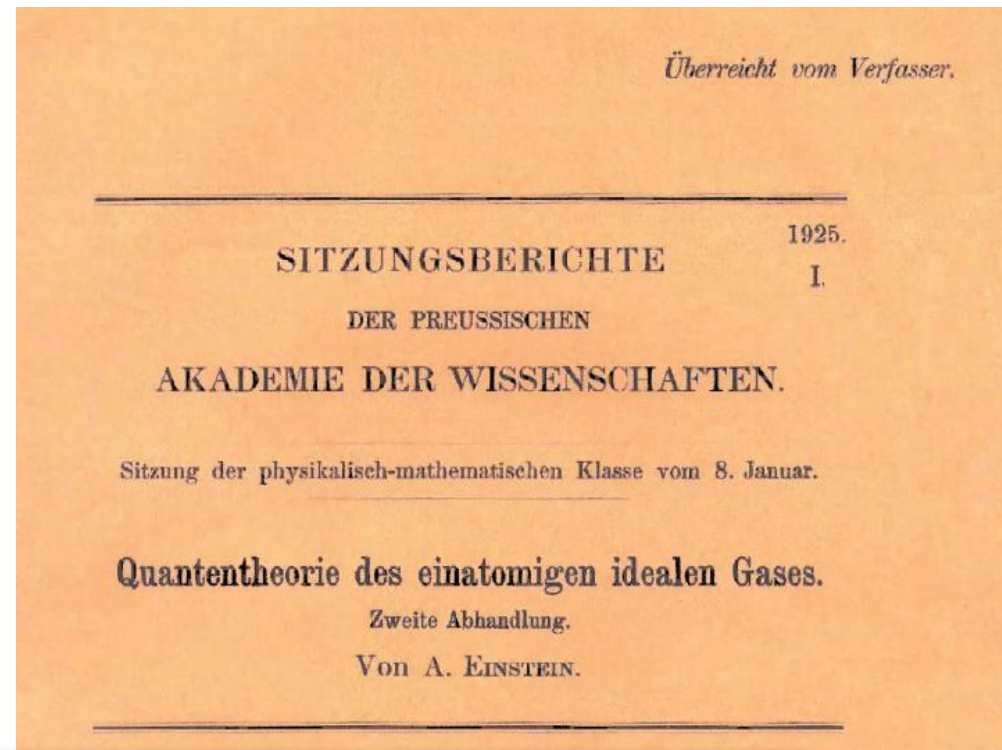
de Broglie si byl vědom nehotovosti své teorie, v závěru disertace uvádí:

„Úmyslně jsem ponechal poněkud neurčitou definici fázové vlny a periodického jevu, na nějž se dá fázová vlna převést podobně jako fázová vlna fotonu. Předloženou teorii lze tedy považovat spíše za formu, jejíž fyzikální obsah není zcela upřesněn, než za homogenní definitivně vybudovanou teorii.“

SCHRÖDINGER SE SEZNAMUJE S DE BROGLIEHO DISERTACÍ A HLEDÁ VLNOVOU ROVNICI

Schrödinger (universita v Curychu) pracoval ve statistické fyzice (vídeňská tradice), a tedy sledoval příslušné práce. Tak se seznámil s de Broglieho výsledky v Einsteinově článku „Quantentheorie des einatomigen idealen Gases“ z února 1925.

(Sledoval práce také o kvantové teorii, ale publikoval o ní jen 3 práce.)



Wie einem materiellen Teilchen bzw. einem System von materiellen Teilchen ein (skalares) Wellenfeld zugeordnet werden kann, hat Hr. E. DE BROGLIE in einer sehr beachtenswerten Schrift¹ dargetan. Einem materiellen Teilchen von der Masse m wird zunächst eine Frequenz ν zugeordnet gemäß der Gleichung

$$mc^2 = h\nu. \quad (35)$$

Einstein sehrál významnou roli při šíření povědomosti o de Broglieho teorii

Schrödinger (universita v Curychu) pracoval ve statistické fyzice (vídeňská tradice), a tedy sledoval příslušné práce. Tak se seznámil s de Broglieho výsledky v Einsteinově článku „Quantentheorie des einatomigen idealen Gases“ z února 1925.

De Broglieho myšlenky **Schrödingera** inspirovaly

- nejprve při práci na článku *K Einsteinově teorii plynů*, na němž začal pracovat v létě 1925 a v jehož úvodu uvádí: „To znamená nic jiného než vzít vážně de Broglieho–Einsteinovu undulační teorii pohybujících se částic, podle níž nejsou ničím jiným než jakýmsi „pěnovým hřebenem“ na vlnovém záření tvořícím základ světa.“
- následně na konci roku 1925 při hledání vlnové rovnice ...

Schrödinger (universita v Curychu) pracoval ve statistické fyzice (vídeňská tradice), a tedy sledoval příslušné práce. Tak se seznámil s de Broglieho výsledky v Einsteinově článku „Quantentheorie des einatomigen idealen Gases“ z února 1925.

Peter Debye (ETH v Curychu) věděl o de Broglieho disertaci.

Schrödinger s Debyem o de Broglieho teorii diskutují. (Přínos Debye pro práci ES se zmiňuje, ale sám Debye to nepotvrzuje.)

Debye pořádá v Curychu semináře na ETH pro ETH a univerzitu. Požádal Schrödingera o přednášku o de Broglieho teorii.



SCHRÖDINGER SE SEZNAMUJE S DE BROGLIEHO DISERTACÍ A HLEDÁ VLNOVOU ROVNICI

Listopad 1925 (ETH Curych)

Schrödinger na semináři referuje o de Broglieho disertaci. (Výklad byl skvělý, jako byly všechny Schrödingerovy přednášky. Byl vynikající přednášející.)



V této budově sídlil fyzikální ústav ETH (Eidgenössische Technische Hochschule), kde se konaly semináře.

Listopad 1925 (ETH Curych)

Schrödinger na semináři referuje o de Broglieho disertaci. (Výklad byl skvělý, jako byly všechny Schrödingerovy přednášky. Byl vynikající přednášející.)

Debye poznamenává: „Sie sprechen über Wellen, aber wo ist die Wellengleichung?“ (F. Bloch)

Physics Today (1976)

REMINISCENCES OF

Heisenberg and the early days of quantum mechanics

Recollections of the days, 50 years ago, when a handful of students in the “entirely useless” field of physics heard of a strange new mechanics invented by Maurice de Broglie, Werner Heisenberg and Erwin Schrödinger.

Felix Bloch

It is appropriate in this year, when we celebrate the 50th anniversary of quantum mechanics, and during which we have been saddened by the death of one of its leading founders, Werner Heisenberg, to reminisce about the formative years of the new mechanics. At the time when the foundations of physics were being replaced with totally new concepts I was a student of physics. I sat in the colloquium audience when Peter Debye made the suggestions to Erwin Schrödinger that started him on the study of de Broglie waves and the search for their wave equation. It was from Heisenberg, as his first doctorate student, that I caught the spirit of research, and that I received the encouragement to make my own contributions.

First inklings

Let me begin by going back to 1924, when I entered the Swiss Federal Institute of Technology in my home town of Zurich. I began as a student of engineering but after a year and good deal of soul searching I decided, against all good sense, to switch over to the “entirely useless” field of physics. The E. T. H., as it is known from its German name, was an institution of great international repute and in my newly chosen field of studies I had heard of such famous men as Peter Debye and Hermann Weyl. In fact, the first introductory course of physics I took was taught by Debye and, without knowing much about his scientific work, I realized from the high quality of his lectures at the Institute that here was a great master of his field.

There was a good deal less to be enthusiastic about in the other courses one

could take, and there was nothing like the complete menu that is presented to the students nowadays. Once in a while, a professor would offer a special course on a subject he just happened to be interested in, completely disregarding the tremendous gaps in our knowledge left by this system. Anyway, there was only a handful of us foolish enough to study physics and it was evidently not thought worthwhile to bother much about these “odd fellows.” The only thing we could do about it was to go to the library and read some books, although nobody would advise us which ones to choose.

Among the first I hit upon was Arnold Sommerfeld's *Atomic Structure and Spectral Lines*, which I found fascinating; the only trouble was that I could not understand most of it because I knew far too little of mechanics and electrodynamics. So at first I had to learn about these subjects from other books, to truly appreciate what Sommerfeld said; but then it conveyed the good feeling that everything about atoms was completely known and understood. The fact that one really could handle only periodic systems and only those that allowed a separation of variables did not seem a great cause for concern. Therefore, when I saw a paper in which somebody tried to squeeze the theory of the Compton Effect into that scheme, I was more impressed than discouraged by the complicated mathematics spent in the effort.

The news that the foundations of a new mechanics had already been laid by Maurice de Broglie and Heisenberg had hardly leaked to Zurich yet and certainly had not penetrated to our lower strata. The first inklings of such a thing came to me in early 1926; I had by then started to attend the physics colloquium regularly, although most of what I heard there was far above my head. The colloquium, run

with firm authority by Debye, might have had an audience of as much as a couple of dozen—on a good day.

Physics was also taught at the University of Zurich by a smaller and rather less illustrious faculty than that at the E. T. H. Theory there was in the hands of a certain Austrian of the name of Schrödinger, and the colloquium was alternately held at both institutions. I apologize to my friends who already have heard from me what I am going to tell you now. My account may not conform to the strictest standards of history, which accord validity only to written documents, nor will I be able to render the exact words I heard on those occasions, but I can vouchsafe that, in content, I shall report the truth and only the truth.

A wave equation is found

Once at the end of a colloquium I heard Debye saying something like: “Schrödinger, you are not working right now on very important problems anyway. Why don't you tell us some time about that thesis of de Broglie, which seems to have attracted some attention.”

So, in one of the next colloquia, Schrödinger gave a beautifully clear account of how de Broglie associated a wave with a particle and how he could obtain the quantization rules of Niels Bohr and Sommerfeld by demanding that an integer number of waves should be fitted along a stationary orbit. When he had finished, Debye casually remarked that he thought this way of talking was rather childish. As a student of Sommerfeld he had learned that, to deal properly with waves, one had to have a wave equation. It sounded quite trivial and did not seem to make a great impression, but Schrödinger evidently thought a bit more about the idea afterwards.

Just a few weeks later he gave another

Felix Bloch, winner (with E. M. Purcell) of the 1952 Nobel Prize in physics, is professor emeritus of physics at Stanford University.

Listopad 1925 (ETH Curych)

Schrödinger na semináři referuje o de Broglieho disertaci. (Výklad byl skvělý, jako byly všechny Schrödingerovy přednášky. Byl vynikající přednášející.)

Debye poznamenává: „Sie sprechen über Wellen, aber wo ist die Wellengleichung?“ (F. Bloch)

Schrödinger se dává do práce hledá vlnovou rovnici

Schrödinger se dává do práce hledá vlnovou rovnici (relativistickou, proč?)

- de Broglie při formulaci své teorie široce využíval relativistické argumenty, aby dospěl k popisu vln hmoty,
- Sommerfeld odvodil v rámci staré kvantové teorie relativistické korekce pro atom vodíku, které vysvětlovaly jemnou strukturu.

Schrödinger se dává do práce hledá vlnovou rovnici (relativistickou, proč?)

Pohled na několik klíčových týdnů, kdy se rodila vlnová rovnice, poskytnutí jeho

- nepublikované rukopisy
- zápisníky
- dopisy (zejména s W. Wienem)
- první publikovaná práce **tetralogie** *Kvantování jako problém vlastních hodnot*
- (ne vždy úplně spolehlivé) vzpomínky pamětníků

SCHRÖDINGER SE SEZNAMUJE S DE BROGLIEHO DISERTACÍ A HLEDÁ VLNOVOU ROVNICI

PRVNÍ (RELATIVISTICKÁ) SCHRÖDINGEROVA VLNOVÁ ROVNICE PRO ATOM VODÍKU (1925)

$$\Delta\psi = \frac{1}{u^2} \frac{\partial^2 \psi}{\partial t^2} \quad \psi \propto \exp(-i2\pi f t) \Rightarrow \Delta\psi = -\frac{4\pi^2 f^2}{u^2} \psi \quad \text{fázová rychlost}$$

de Broglie
vlná částice

$$u = \frac{c^2}{v} \equiv \frac{mc^2 / \sqrt{1 - \beta^2}}{mv / \sqrt{1 - \beta^2}} = \frac{\text{energie}}{\text{hybnost}} \Rightarrow u = \frac{hf}{?}$$

! Schrödinger:
úkol: zahrnout vliv pole

Elektron v atomu
vodíku má energii

a hybnost

$$hf = \frac{mc^2}{\sqrt{1 - \beta^2}} - \frac{e^2}{r}$$
$$\frac{m^2 c^4}{1 - \beta^2}$$

Schrödingerovo rozšíření
de Broglieho myšlenky
(pro vlnou částici)
na elektron v atomu

SCHRÖDINGER SE SEZNAMUJE S DE BROGLIEHO DISERTACÍ A HLEDÁ VLNOVOU ROVNICI

PRVNÍ (RELATIVISTICKÁ) SCHRÖDINGEROVA VLNOVÁ ROVNICE PRO ATOM VODÍKU (1925)

$$\Delta\psi = \frac{1}{u^2} \frac{\partial^2 \psi}{\partial t^2} \quad \psi \propto \exp(-i2\pi f t)$$

$$\Delta\psi = -\frac{4\pi^2 f^2}{u^2} \psi$$

de Broglie
vlná částice

$$u = \frac{c^2}{v} = \frac{mc^2 / \sqrt{1 - \beta^2}}{mv / \sqrt{1 - \beta^2}} = \frac{\text{energie}}{\text{hybnost}}$$

$\Rightarrow$

$$u = \frac{hf}{\sqrt{(hf + e^2/r)^2 - m^2 c^4} / c}$$

! Schrödinger:

úkol: zahrnout vliv pole

Elektron v atomu
vodíku má energii

$$hf = \frac{mc^2}{\sqrt{1 - \beta^2}} - \frac{e^2}{r}$$

a hybnost

$$p^2 c^2 + m^2 c^4 = \frac{m^2 c^4}{1 - \beta^2} \Rightarrow p(f, r) = \sqrt{(hf + e^2/r)^2 - m^2 c^4} / c$$

Schrödingerovo rozšíření
de Broglieho myšlenky
(pro vlnou částici)
na elektron v atomu

SCHRÖDINGER SE SEZNAMUJE S DE BROGLIEHO DISERTACÍ A HLEDÁ VLNOVOU ROVNICI

PRVNÍ (RELATIVISTICKÁ) SCHRÖDINGEROVA VLNOVÁ ROVNICE PRO **ATOM VODÍKU** (1925)

$$\Delta\psi = -\frac{4\pi^2 f^2}{u^2} \psi$$
$$u = \frac{hf}{\sqrt{(hf + e^2/r)^2 - m^2 c^4}/c}$$


$$\Delta\psi = -\frac{4\pi^2}{h^2 c^2} \left[\underbrace{\left(hf \right)}_E + \frac{e^2}{r} \right]^2 - m^2 c^4 \psi$$

Potenciální energie se do vlnové rovnice dostala prostřednictvím (fázové) rychlosti vlny

SCHRÖDINGER SE SEZNAMUJE S DE BROGLIEHO DISERTACÍ A HLEDÁ VLNOVOU ROVNICI

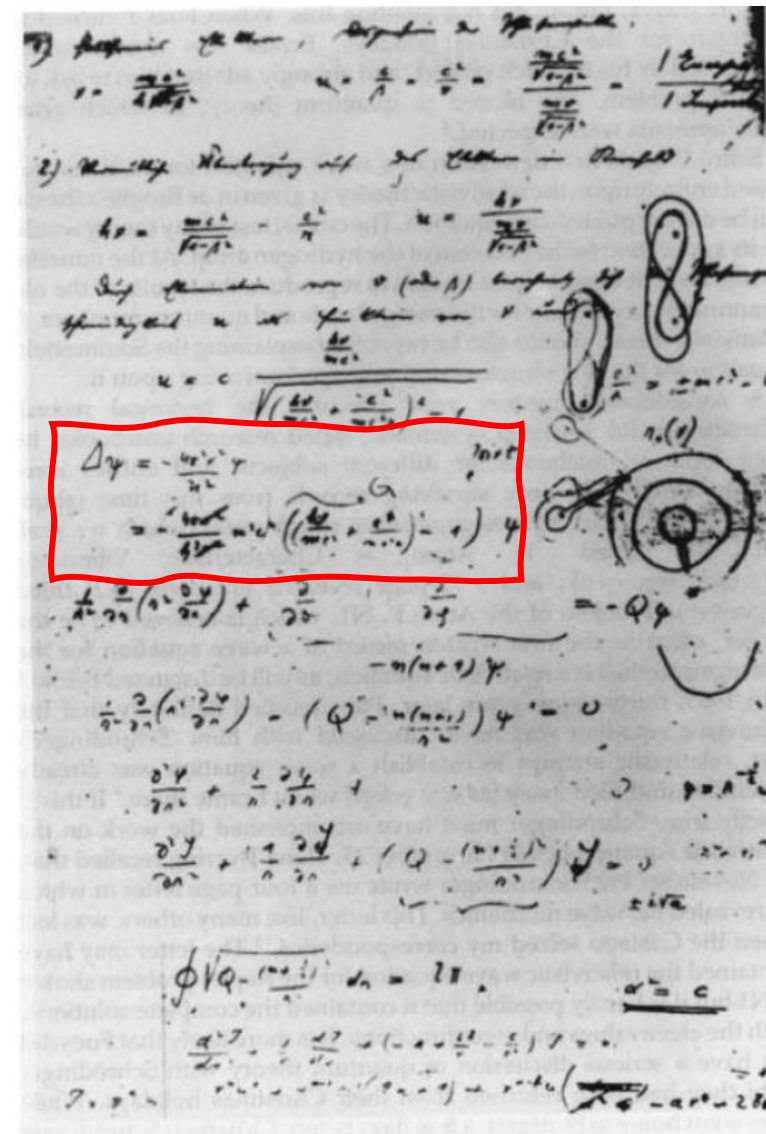
PRVNÍ (RELATIVISTICKÁ) SCHRÖDINGEROVA ROVNICE PRO ATOM VODÍKU (1925)

- V nerelativistické limitě řešení rovnice dávalo hodnoty získané Bohrem (1913).
- Řešení této rovnice nevysvětlovalo správně **jemnou strukturu** atomu vodíku. Hodnoty energie byly jiné než získané Sommerfeldem (1915), které souhlasily s experimentem.

+

-

$$\Delta\psi = -\frac{4\pi^2}{h^2c^2} \left[\underbrace{\left(hf + \frac{e^2}{r} \right)}_E - m^2c^4 \right] \psi$$



PRVNÍ (RELATIVISTICKÁ) SCHRÖDINGEROVA ROVNICE PRO ATOM VODÍKU (1925)

- V nerelativistické limitě řešení rovnice dávalo hodnoty získané Bohrem (1913). +
- Řešení této rovnice nevysvětlovalo správně **jemnou strukturu** atomu vodíku. Hodnoty energie byly jiné než získané Sommerfeldem (1915), které souhlasily s experimentem. -
- **Schrödinger** byl zklamaný ... svou relativistickou rovnici nepublikoval (je dochováno 4stánkové memorandum) ... hledání rovnice na čas přerušuje.

$$\Delta\psi = -\frac{4\pi^2}{h^2c^2} \left[\underbrace{\left(hf\right)}_E + \frac{e^2}{r} \right]^2 - m^2c^4 \psi$$

PRVNÍ (RELATIVISTICKÁ) SCHRÖDINGEROVA ROVNICE PRO ATOM VODÍKU (1925)

- **Schrödinger** byl zklamaný ... svou relativistickou rovnicí nepublikoval (je dochováno 4stánkové memorandum) ... hledání rovnice na čas přerušuje.

$$\Delta\psi = -\frac{4\pi^2}{h^2c^2} \left[\underbrace{\left(hf\right)}_E + \frac{e^2}{r} \right]^2 - m^2c^4 \psi$$

Poznámka:

$$(-\hbar^2c^2\Delta + m^2c^4)\psi = \left(E + \frac{e^2}{r}\right)^2 \psi$$

PRVNÍ (RELATIVISTICKÁ) SCHRÖDINGEROVA ROVNICE PRO ATOM VODÍKU (1925)

- **Schrödinger** byl zklamaný ... svou relativistickou rovnicí nepublikoval (je dochováno 4stánkové memorandum) ... hledání rovnice na čas přerušuje.

Poznámka:

Tuto relativistickou Schrödingerovu rovnici pro částici se spinem nula později nezávisle odvodili Klein, Gordon, Fok ...

$$(-\hbar^2 c^2 \Delta + m^2 c^4) \psi = \left(E + \frac{e^2}{r} \right)^2 \psi$$

Spin elektronu je $\frac{1}{2}$.
První sdělení o tom bylo na přelomu roku 1925 a 1926.

PRVNÍ (RELATIVISTICKÁ) SCHRÖDINGEROVA ROVNICE PRO ATOM VODÍKU (1925)

- **Schrödinger** byl zklamaný ... svou relativistickou rovnicí nepublikoval (je dochováno 4stánkové memorandum) ... hledání rovnice na čas přerušuje

a místo toho dokončuje tři publikace
(2 ze statistické fyziky a 1 z teorii barev)

SCHRÖDINGER SE SEZNAMUJE S DE BROGLIEHO DISERTACÍ A HLEDÁ VLNOVOU ROVNICI

Vyšel opět
z této rovnice

$$\Delta\psi = -\frac{4\pi^2 f^2}{u^2} \psi$$

a určil fázovou rychlost (fiktivní) vlny
 u pro nerelativistickou aproximaci

- **Schrödinger** byl zklamaný ... svou relativistickou rovnicí nepublikoval (je dochováno 4stánkové memorandum) ... hledání rovnice na čas přerušuje.
- A pak začal znovu ... zgruntu nerelativisticky ...

a šlo to rychle ... provedl jen „malou“ úpravu (týkající se rychlosti u) v předchozím postupu, který ho přivedl k relativistické rovnici

Pracoval během vánočních prázdnin
v roce 1925 ve Villa Frisia v Arose.



A jak postupoval víme z jeho
pracovních zápisníků

NALÉZÁ
ZÍSKÁVÁ
VYTVÁŘÍ
FORMULUJE
...

„Odkud jsme to vzali? Odnikud. Nedá se to odvodit z ničeho, co známe. Zrodilo se to v Schrödingerově mysli, vzniklo z jeho zápasu o pochopení experimentálních pozorování skutečného světa.“

Where did we get that [Schrödinger's equation] from? Nowhere. It is not possible to derive from anything you know. It came out of the mind of Schrödinger, invented in his struggle to find an understanding of the experimental observation of the real world.

R. Feynman

Začátek jako u relativistické rovnice

$$\Delta\psi = -\frac{4\pi^2 f^2}{u^2} \psi$$

de Broglie
vlná částice

$$u = \frac{c^2}{v} = \frac{mc^2 / \sqrt{1 - \beta^2}}{mv / \sqrt{1 - \beta^2}} = \frac{\text{energie}}{\text{hybnost}}$$

! Schrödinger:
úkol: zahrnout vliv pole

Elektron v atomu
vodíku má energii

$$hf = \frac{mc^2}{\sqrt{1 - \beta^2}} - \frac{e^2}{r}$$

SCHRÖDINGER „ODVOZUJE“ NERELATIVISTICKOU VLNOVOU ROVNICI (POPRVÉ)

$$\Delta\psi = -\frac{4\pi^2 f^2}{u^2} \psi$$

de Broglie
vlná částice

$$u = \frac{c^2}{v} = \frac{mc^2 / \sqrt{1 - \beta^2}}{mv / \sqrt{1 - \beta^2}} = \frac{\text{energie}}{\text{hybnost}}$$

$$\Rightarrow u = \frac{hf}{\sqrt{2m(hf - mc^2 + e^2/r)}}$$

! Schrödinger:
úkol: zahrnout vliv pole

Elektron v atomu
vodíku má energii

$$hf = \frac{mc^2}{\sqrt{1 - \beta^2}} - \frac{e^2}{r} \approx mc^2 + \frac{p^2}{2m} - \frac{e^2}{r}$$

nerelativistická
aproximace

$$p(f, r) = \sqrt{2m(hf - mc^2 + e^2/r)}$$

a hybnost

SCHRÖDINGER „ODVOZUJE“ NERELATIVISTICKOU VLNOVOU ROVNICI (POPRVÉ)

Původní relativistický výsledek

$$\Rightarrow u = \frac{hf}{\sqrt{(hf + e^2/r)^2 - m^2c^4}}/c$$

$$\Delta\psi = -\frac{4\pi^2 f^2}{u^2} \psi$$

$$u = \frac{hf}{\sqrt{2m(hf - mc^2 + e^2/r)}}$$

SCHRÖDINGER „ODVOZUJE“ NERELATIVISTICKOU VLNOVOU ROVNICI (POPRVÉ)

$$\Delta\psi = -\frac{4\pi^2 f^2}{u^2} \psi$$

$$u = \frac{hf}{\sqrt{2m(hf - mc^2 + e^2/r)}}$$

$$\Delta\psi = -\frac{4\pi^2}{h^2} 2m \left[\underbrace{hf - mc^2}_E - \underbrace{\left(-\frac{e^2}{r}\right)}_V \right] \psi$$

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V \right) \psi = E\psi$$

stacionární SchR

problém vlastních hodnot

$$\mathbf{A}\bar{\mathbf{v}} = \alpha\bar{\mathbf{v}}$$

SCHRÖDINGER „ODVOZUJE“ NERELATIVISTICKOU VLNOVOU ROVNICI (POPRVÉ)

$$\Delta\psi = -\frac{4\pi^2 f^2}{u^2} \psi$$

$$u = \frac{hf}{\sqrt{2m(hf - mc^2 + e^2/r)}}$$

$$\Delta\psi = -\frac{4\pi^2}{h^2} 2m \left[\underbrace{hf - mc^2}_E - \underbrace{\left(-\frac{e^2}{r}\right)}_V \right] \psi \Rightarrow E_n = -\frac{2\pi^2 m e^4}{h^2} \frac{1}{n^2}$$

Bohr

Seminář po 8. lednu 1926

Schrödinger : „Mein Kollege Debye meinte, man sollte eine Wellengleichung haben; nun ich habe eine gefunden!“ (F. Bloch)

27. ledna 1926 byl do redakce *Annalen der Physik* doručen první článek ze Schrödingerovy tetralogie o vlnové mechanice se zcela odlišným „odvozením“ vlnové rovnice.

Ann. Phys. 1926
První práce z tetralogie o
vlnové mechanice
(27. leden 1926)

3. *Quantisierung als Eigenwertproblem;*
von E. Schrödinger.

(Erste Mitteilung.)

§ 1. In dieser Mitteilung möchte ich zunächst an dem einfachsten Fall des (nichtrelativistischen und ungestörten) Wasserstoffatoms zeigen, daß die übliche Quantisierungsvorschrift sich durch eine andere Forderung ersetzen läßt, in der kein Wort von „ganzen Zahlen“ mehr vorkommt. Vielmehr ergibt sich die Ganzzahligkeit auf dieselbe natürliche Art, wie etwa die Ganzzahligkeit der *Knotenzahl* einer schwingenden Saite. Die neue Auffassung ist verallgemeinerungsfähig und rührt, wie ich glaube, sehr tief an das wahre Wesen der Quantenvorschriften.

„V tomto sdělení bych chtěl nejprve na nejjednodušším případě (...) atomu vodíku ukázat, že obvyklý předpis pro kvantování lze nahradit jiným požadavkem, v němž se již vůbec nemluví o „celých číslech“. Celočíselnost se naopak objeví stejným přirozeným způsobem, jako například celočíselný počet uzlů kmitající struny. Toto nové pojetí se dá zobecnit a – jak se domnívám – sahá velmi hluboko k pravé podstatě předpisů jak kvantovat.“

Ve této **první** části tetralogie o vlnové mechanice **Schrödinger** neužívá de Broglieho vztahy, ale vychází z Hamiltonovy-Jacobiho formulace klasické mechaniky a formuluje **variační úlohu**. (Inspirace Hamiltonovými pracemi o šíření světla a analogii mezi geometrickou a vlnovou optikou.)

Hamiltonova-Jacobiho rovnice

$$H(q, \partial S / \partial q) = E, \quad \partial S / \partial q = p$$

Elektron o hmotnosti m v poli
 $V(\mathbf{r}) = -e^2/r$ (atom vodíku)

$$\frac{1}{2m} \left[\left(\frac{\partial S}{\partial x} \right)^2 + \left(\frac{\partial S}{\partial y} \right)^2 + \left(\frac{\partial S}{\partial z} \right)^2 \right] + V = E$$

1

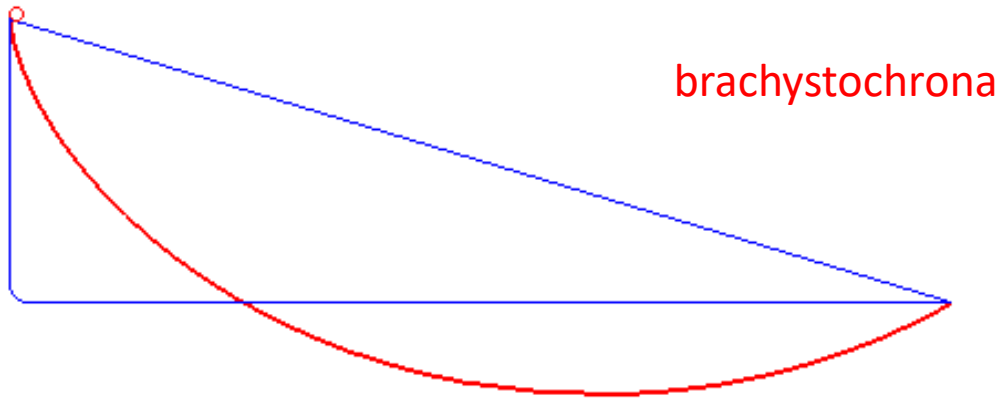
Zavedena nová funkce ψ
(bez zdůvodnění)

$$S = K \ln \psi$$

$$\frac{K^2}{2m} \left[\left(\frac{\partial \psi}{\partial x} \right)^2 + \left(\frac{\partial \psi}{\partial y} \right)^2 + \left(\frac{\partial \psi}{\partial z} \right)^2 \right] + (V - E)\psi^2 = 0$$

Tuto nelineární diferenciální rovnici nutno nahradit lineární!

Pro vlny platí princip superpozice:
lineární diferenciální rovnice



brachystochrona

2

Variační úloha

(„variační princip
vládne všem dějům
v přírodě“)

Role Debye?!

$$\delta J[\psi] = \delta \int_{\Omega} dq \, F(\psi, \partial\psi/\partial q) = 0$$

Integrál
z kvadratické formy

$F(\psi, \partial\psi/\partial q)$

nabývá extrém.

$$\frac{K^2}{2m} \left[\left(\frac{\partial\psi}{\partial x} \right)^2 + \left(\frac{\partial\psi}{\partial y} \right)^2 + \left(\frac{\partial\psi}{\partial z} \right)^2 \right] + (V - E)\psi^2 = 0$$

Pro vlny platí princip superpozice:
lineární diferenciální rovnice

Tuto nelineární diferenciální rovnici nutno nahradit lineární!

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

Variační úloha
 („variační princip
 vládne všem dějům
 v přírodě“)
 Role Debye?!

$$\delta J[\psi] = \delta \int_{\Omega} dq \, F(\psi, \partial \psi / \partial q) = 0$$

Integrál
z kvadratické formy

$F(\psi, \partial \psi / \partial q)$ nabývá extrém.

$$\frac{K^2}{2m} \left[\left(\frac{\partial \psi}{\partial x} \right)^2 + \left(\frac{\partial \psi}{\partial y} \right)^2 + \left(\frac{\partial \psi}{\partial z} \right)^2 \right] + (V - E) \psi^2 = 0$$

Pro vlny platí princip superpozice:
 lineární diferenciální rovnice

Tuto nelineární diferenciální rovnici nutno nahradit lineární!

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

$$\frac{1}{2} \delta J[\psi] = \underbrace{\iint_{\partial \Omega} dS \delta \psi \frac{\partial \psi}{\partial n}}_{0 \text{ pro } \Omega \rightarrow \infty} - \iiint_{\Omega} dx dy dz \delta \psi \underbrace{\left[\Delta \psi + \frac{2m}{K^2} \left(E + \frac{e^2}{r} \right) \psi \right]}_0 = 0$$

Eulerova–Lagrangeova rovnice

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

$$\Rightarrow E_n = -\frac{me^4}{2K^2} \frac{1}{n^2}$$

diskrétní spektrum
okrajová podmínka
 $\psi = 0$ pro $r \rightarrow \infty$

Bohrův výsledek, pokud

$$K = h/2\pi$$

Ann. Phys. 1926

 (došlo 27. ledna,
Vyšlo v březnu)

3. Quantisierung als Eigenwertproblem; von E. Schrödinger.

(Erste Mitteilung.)

§ 1. In dieser Mitteilung möchte ich zunächst an dem einfachsten Fall des (nichtrelativistischen und ungestörten) Wasserstoffatoms zeigen, daß die übliche Quantisierungsvorschrift sich durch eine andere Forderung ersetzen läßt, in der kein Wort von „ganzen Zahlen“ mehr vorkommt. Vielmehr ergibt sich die Ganzzahligkeit auf dieselbe natürliche Art, wie etwa die Ganzzahligkeit der Knotenzahl einer schwingenden Saite. Die neue Auffassung ist verallgemeinerungsfähig und rührt, wie ich glaube, sehr tief an das wahre Wesen der Quantenvorschriften.

Die übliche Form der letzteren knüpft an die Hamiltonsche partielle Differentialgleichung an:

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

Es wird von dieser Gleichung eine Lösung gesucht, welche sich darstellt als Summe von Funktionen je einer einzigen der unabhängigen Variablen q .

Wir führen nun für S eine neue unbekannte ψ ein derart, daß ψ als ein Produkt von eingriffigen Funktionen der einzelnen Koordinaten erscheinen würde. D.h. wir setzen

$$(2) \quad S = K \lg \psi.$$

Die Konstante K muß aus dimensionellen Gründen eingeführt werden, sie hat die Dimension einer Wirkung. Damit erhält man

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

Wir suchen nun nicht eine Lösung der Gleichung (1'), sondern wir stellen folgende Forderung. Gleichung (1') läßt sich bei Vernachlässigung der Massenveränderlichkeit stets, bei Berücksichtigung derselben wenigstens dann, wenn es sich um das Einlektronenproblem handelt, auf die Gestalt bringen: quadratische

362

E. Schrödinger.

Form von ψ und seinen ersten Ableitungen $= 0$. Wir suchen solche reelle im ganzen Konfigurationsraum eindeutige endliche und zweimal stetig differenzierbare Funktionen ψ , welche das über den ganzen Konfigurationsraum erstreckte Integral der eben genannten quadratischen Form¹⁾ zu einem Extremum machen. Durch dieses Variationsproblem ersetzen wir die Quantenbedingungen.

Wir werden für H zunächst die Hamiltonsche Funktion der Keplerbewegung nehmen und zeigen, daß die aufgestellte Forderung für alle positiven, aber nur für eine diskrete Schar von negativen E -Werten erfüllbar ist. D. h. das genannte Variationsproblem hat ein diskretes und ein kontinuierliches Eigenwertspektrum. Das diskrete Spektrum entspricht den Balmerischen Termen, das kontinuierliche den Energien der Hyperbelbahnen. Damit numerische Übereinstimmung bestehe, muß K den Wert $h/2\pi$ erhalten.

Da für die Aufstellung der Variationsgleichungen die Koordinatenwahl belanglos ist, wählen wir rechtwinkelige kartesische. Dann lautet (1') in unserem Fall (e, m sind Ladung und Masse des Elektrons):

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

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

Und unser Variationsproblem lautet

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

das Integral erstreckt über den ganzen Raum. Man findet daraus in gewohnter Weise

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

Es muß also erstens

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

¹⁾ Es geht mir nicht, daß diese Formulierung nicht ganz eindeutig ist.

Komentáře

- **Schrödinger** nepovažoval prvotní odvození vlnové rovnice za dostatečně zdůvodněné, a proto hledal „důstojné“ fyzikální východisko... a jím byl **variační princip**, který vládne a vládne fyzice.
- Odvození, uvedené na **prvních dvou stranách** článku, se může zdát podivně formální a přímo záhadné, bez komentářů a intuitivních úvah.
- Zvolený přístup se **Schrödingerovi** však jevil jako zcela přirozený ... Od studentských let totiž dobře znal souvislost mezi diferenciálními rovnicemi pro kmity kontinua a variačními principy ...
- „Zdůvodněním“ jeho přístupu byla **rovnice** pro vlastní hodnoty energie a její úspěšná aplikace na atom vodíku (tomu se věnuje **9** stránek ze 16stránkového článku).

Komentáře

- Teprve v závěru článku Schrödinger se vrací k fyzice: „Je ovšem velmi nasnadě vztáhnout funkci ψ na určitý kmitavý děj^{*)} v atomu, jemuž by bylo možno přisoudit vyšší míru reality než dnes často zpochybňovaným elektronovým drahám. Původně jsem měl v úmyslu novou formulaci kvantové podmínky založit právě na tomto názornějším výkladu, nakonec jsem však dal přednost výše uvedené neutrální matematické formě, protože nechává podstatu věci vystoupit zřetelněji do popředí.“

^{*)} O jaký kmitavý děj se nezmiňuje a úvahu o významu vlnové funkce uvádí až na konci tetralogie.

Komentáře

Čili:

- Schrödinger „Kvantování je nahrazeno variačním principem.“

(Variační princip se fyzikům, nejen tehdy, líbil. Tato práce hned vzbudila velkou pozornost. 2. dubna 1926 Max Planck píše: „Čtu Váš článek se vzrušením. ... Kochám se krásou, která se odhaluje před mýma očima.“ Zato reakce v Göttingen byla zpočátku výrazně negativní.)

- Z něj vyplynula diferenciální rovnice, jejímž řešením je vlnová funkce ψ , která splňuje okrajové podmínky a musí být všude jednoznačná, konečná a spojitě diferencovatelná až do druhého řádu.

(Diferenciální rovnice se fyzikům líbily – na rozdíl od matic, které vystupovaly v Heisenbergově teorii. Schrödingerův přístup byl proto srozumitelný a „efektivnější“. Ukázalo to srovnání výpočtu spektra atomu vodíku provedené Schrödingerem a Paulim, který užil maticovou mechaniku.)

- Kvantové podmínky staré kvantové teorie byly tak nahrazeny omezeními na vlastnosti vlnové funkce.

Komentáře

- Článek působí dojmem „velkorysosti“ ... v žáru inspirace si Schrödinger uvědomoval, že zůstává mnoho otevřených otázek, které je třeba promyslet. Přesto byl hnáný potřebou svůj objev publikovat i v nepříliš uhlazené podobě. ... Oceňoval význam de Broglieovy práce: „Především chci uvést, že k těmto úvahám mne přivedly především podnětné práce pana de Broglie.“ a dodává: „Hlavní rozdíl spočívá v tom, že de Broglie myslí na postupné vlny, zatímco my, pokud svým formulím podložíme představu kmitání, dospíváme ke stojatým vlastním kmitům.“
- Srozumitelné a názorné fyzikální argumenty vybudoval až v dalším dalším článku, jehož rukopis byl do *Annalen der Physik* doručen již 23. února 1926.
- Odvození z první práce už dále nikde neuvádí. Zato odvození z druhé práce, provázané s intuitivními úvahami, vstoupilo do učebnic.

Ve **druhé** části své tetralogie o vlnové mechanice Schrödinger vychází z Hamiltonovy myšlenky (z roku 1834) o analogii mezi mechanikou a optikou a formuluje ucelenou teorii **vlnové mechaniky**.

V úvodu připomíná své předchozí sdělení:

„Než přistoupíme k rozboru problému vlastních hodnot pro další speciální systémy, pokusme se více objasnit obecnou souvislost, která existuje mezi Hamiltonovou–Jacobiho diferenciální rovnicí popisující mechanický problém a „příbuznou“ vlnovou rovnicí [odvozenou v první části]. Tuto souvislost jsme dosud jen stručně popsali z hlediska její vnější analytické struktury pomocí vztahu $[S = K \ln \psi]$, který je sám o sobě nesrozumitelný, a rovněž pomocí stejně nesrozumitelného přechodu od jistého výrazu, který je roven nule, k požadavku, aby integrál tohoto výrazu byl stacionární.“

1926.

№ 6.

ANNALEN DER PHYSIK.

VIERTE FOLGE. BAND 79.

1. *Quantisierung als Eigenwertproblem;* *von E. Schrödinger.*

(Zweite Mitteilung.)¹⁾

§ 1. Die Hamiltonsche Analogie zwischen Mechanik und Optik.

Bevor wir daran gehen, das Eigenwertproblem der Quantentheorie für weitere spezielle Systeme zu behandeln, wollen wir den *allgemeinen* Zusammenhang näher beleuchten, welcher zwischen der Hamiltonschen partiellen Differentialgleichung (H.P.) eines mechanischen Problems und der „zugehörigen“ *Wellengleichung*, d. i. im Falle des Keplerproblems der Gleichung (5) der ersten Mitteilung, besteht. Wir hatten diesen Zusammenhang vorläufig nur kurz seiner äußeren analytischen Struktur nach beschrieben durch die an sich unverständliche Transformation (2) und den ebenso unverständlichen Übergang von der *Nullsetzung* eines Ausdrucks zu der Forderung, daß das *Raumintegral* des nämlichen Ausdruckes *stationär* sein soll.²⁾

- Druhá **Schrödingerova** práce je obsáhlá.
- V prvních dvou paragrafech na 25 stranách buduje na základě analogie mezi mechanikou a optikou vlnovou mechaniku.
- Tato část ukazuje, jak Schrödinger důkladně problematiku promýšlí a pozorně diskutuje všechny možné souvislosti. Nejde o strohý odborný text, ale o literární dílo (**dokumentováno ukázkami dlouhých citací**).
- Poslední část je věnována aplikacím. Jsou řešeny problémy harmonického oscilátoru a rotátoru.
- Začneme listováním v prvních dvou paragrafech článku a zastavíme u některých stěžejních momentů zásadních podstatných pro formulaci vlnové mechaniky.
- Náš výklad přesně nesleduje velmi obsáhlý **Schrödingerův** postup, zachovává však jeho podstatné rysy.

Východiskem **Schrödingerových** úvah je opět **Hamiltonova–Jacobiho** teorie, z níž plyne

$$\begin{array}{ccc} \vec{p} = \vec{\nabla} S & & E = -\frac{\partial S}{\partial t} \\ \updownarrow \text{Hamilton} & & \updownarrow \\ \vec{k} = \vec{\nabla} \phi & & \omega = -\frac{\partial \phi}{\partial t} \end{array}$$

$$k = \frac{2\pi}{\lambda}, \omega = 2\pi f$$

Pro **vlnu** tvaru

$$\exp(i\phi), \phi(\vec{r}, t) = \vec{k} \cdot \vec{r} - \omega t$$

- **akce** $S(\vec{r}, t)$ je analogií **fáze vlny** $\phi(\vec{r}, t)$
- plochy konstantní **akce** částice jsou analogií ploch konstantní fáze ve **vlně**
- **vlnový** vektor $\mathbf{k}$ je analogií **hybnosti** částice $\mathbf{p}$ a úhlová **frekvence** ω je analogií celkové **energie** částice E .

Východiskem **Schrödingerových** úvah je opět Hamiltonova–Jacobiho teorie, z níž plyne

$$\begin{array}{ccc} \vec{p} = \vec{\nabla} S & & E = -\frac{\partial S}{\partial t} \\ \updownarrow & \text{Hamilton} & \updownarrow \\ \vec{k} = \vec{\nabla} \phi & & \omega = -\frac{\partial \phi}{\partial t} \end{array}$$

$$k = \frac{2\pi}{\lambda}, \omega = 2\pi f$$

Pro **vlnu** tvaru

$$\exp(i\phi), \phi(\vec{r}, t) = \vec{k} \cdot \vec{r} - \omega t$$

Pro rychlost **vlny** nebo ploch konstantní **akce** částice v případě, že se (nerelativistická) částice pohybuje v konzervativním silovém poli s potenciální energií $V(x, y, z)$, tedy platí

$$\rightarrow u = f\lambda = \frac{\omega}{k} = \frac{|\partial \phi / \partial t|}{|\vec{\nabla} \phi|}$$

optika

Východiskem **Schrödingerových** úvah je opět Hamiltonova–Jacobiho teorie, z níž plyne

$$\begin{array}{ccc}
 \vec{p} = \vec{\nabla} S & & E = -\frac{\partial S}{\partial t} \\
 \updownarrow & \text{Hamilton} & \updownarrow \\
 \vec{k} = \vec{\nabla} \phi & & \omega = -\frac{\partial \phi}{\partial t}
 \end{array}$$

Pro **vlnu** tvaru

$$\exp(i\phi), \phi(\vec{r}, t) = \vec{k} \cdot \vec{r} - \omega t$$

Pro rychlost **vlny** nebo ploch konstantní **akce** částice v případě, že se (nerelativistická) částice pohybuje v konzervativním silovém poli s potenciální energií $V(x, y, z)$, tedy platí

$$u = f\lambda = \frac{\omega}{k} = \frac{|\partial \phi / \partial t|}{|\vec{\nabla} \phi|} = \frac{|\partial S / \partial t|}{|\vec{\nabla} S|}$$

$\phi \xrightarrow{\text{H}} S$

Východiskem **Schrödingerových** úvah je opět Hamiltonova–Jacobiho teorie, z níž plyne

$$\begin{array}{ccc}
 \vec{p} = \vec{\nabla} S & & E = -\frac{\partial S}{\partial t} \\
 \updownarrow \text{Hamilton} & & \updownarrow \\
 \vec{k} = \vec{\nabla} \phi & & \omega = -\frac{\partial \phi}{\partial t}
 \end{array}$$

Pro **vlnu** tvaru

$$\exp(i\phi), \phi(\vec{r}, t) = \vec{k} \cdot \vec{r} - \omega t$$

Pro rychlost **vlny** nebo ploch konstantní **akce** částice v případě, že se (nerelativistická) částice pohybuje v konzervativním silovém poli s potenciální energií $V(x, y, z)$, tedy platí

$$u = f\lambda = \frac{\omega}{k} = \frac{|\partial \phi / \partial t|}{|\vec{\nabla} \phi|} = \frac{|\partial S / \partial t|}{|\vec{\nabla} S|} = \frac{E}{p} = \frac{E}{\sqrt{2m(E - V)}}$$

rychlost „vln
hmoty“

Vystupuje **zde** také
potenciální energie

$$u = f\lambda = \frac{\omega}{k} = \frac{|\partial\phi/\partial t|}{|\vec{\nabla}\phi|} = \frac{|\partial S/\partial t|}{|\vec{\nabla}S|} = \frac{E}{p} = \frac{E}{\sqrt{2m(E - V)}}$$

Odvozený vztah pro u odpovídá výrazu, který Schrödinger získal aplikací de Broglieho výsledků na případ **nerelativistické částice v silovém poli**.

$$u = f\lambda = \frac{\omega}{k} = \frac{|\partial\phi/\partial t|}{|\vec{\nabla}\phi|} = \frac{|\partial S/\partial t|}{|\vec{\nabla}S|} = \frac{E}{p} = \frac{E}{\sqrt{2m(E - V)}}$$

Odvozený vztah pro u je klíčový pro rozvinutí vlnové mechaniky
a odvození vlnové rovnice

$$v = \sqrt{\frac{2(E - V)}{m}}$$

$$u = f\lambda = \frac{\omega}{k} = \frac{|\partial\phi/\partial t|}{|\vec{\nabla}\phi|} = \frac{|\partial S/\partial t|}{|\vec{\nabla}S|} = \frac{E}{p} = \frac{E}{\sqrt{2m(E - V)}} = \frac{E}{m\sqrt{\frac{2m(E - V)}{m}}}$$

§1 Hamiltonova analogie mezi mechanikou a optikou Schrödinger uzavírá takto

„...dnes již víme, že naše klasická mechanika selhává při velmi malých rozměrech dráhy a při velmi velkých zakřiveních. Možná je toto selhání v přísné analogii se selháním geometrické optiky, tj. „optiky nekonečně malých vlnových délek“, které se projeví, jakmile překážky nebo otvory již nejsou velké ve srovnání se skutečnou, konečnou vlnovou délkou. Možná je naše klasická mechanika úplnou analogií geometrické optiky a jako taková je nesprávná a není v souladu se skutečností; selhává všude tam, kde poloměry křivosti a rozměry dráhy již nejsou velké ve srovnání s určitou vlnovou délkou, které je v konfiguračním prostoru přiřazen skutečný význam. Pak se stává otázkou hledání „vlnové“ mechaniky a nejbližší cesta k tomu je patrně vlnově-teoretické rozpracování Hamiltonova obrazu.“

§2 „Geometrická“ a „vlnová“ mechanika

frekvence $f = \frac{E}{h}$

vlnová délka $\lambda = \frac{u}{f} = \frac{h}{E} \frac{E}{\sqrt{2m(E - V)}} = \frac{h}{\sqrt{2m(E - V)}} = \frac{h}{\sqrt{2m(hf - V)}}$

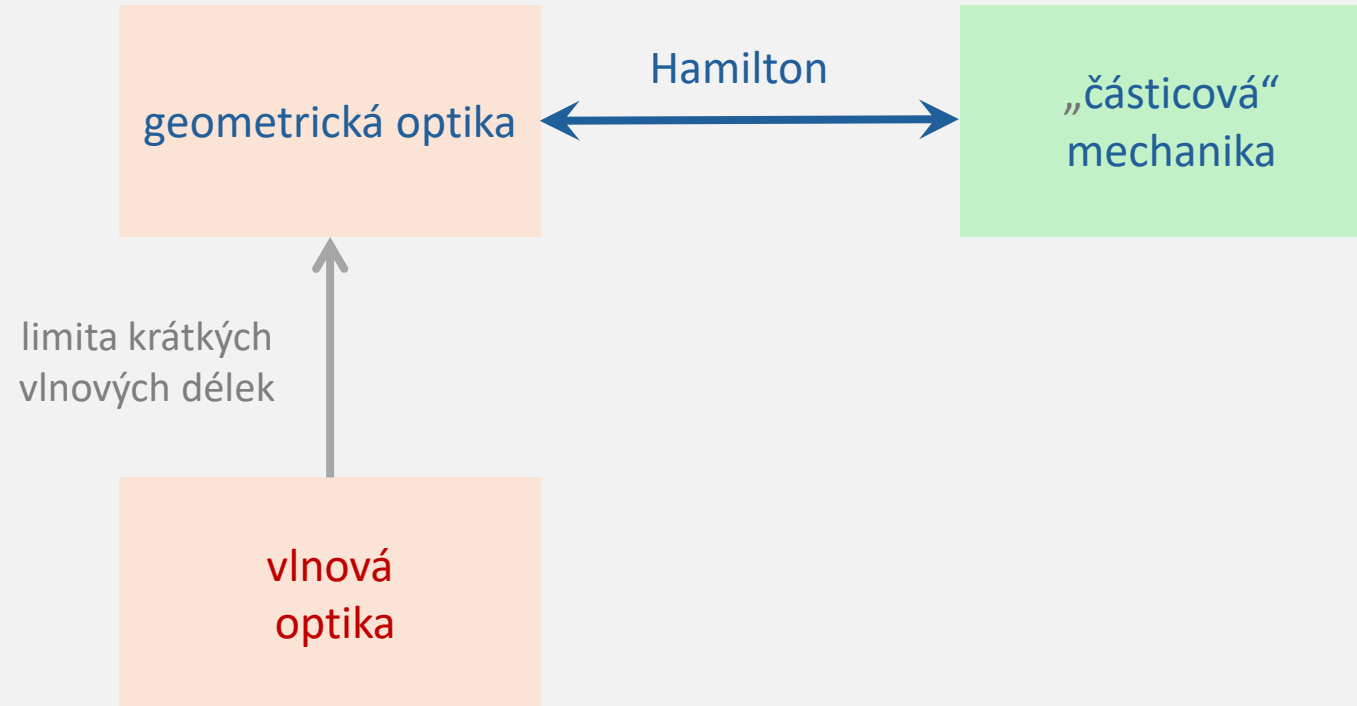
p

grupová rychlost $v_{\text{gr}} = \frac{1}{\frac{\partial(1/\lambda)}{\partial f}} = \sqrt{\frac{2m(E - V)}{m}} = v$ rychlost částice

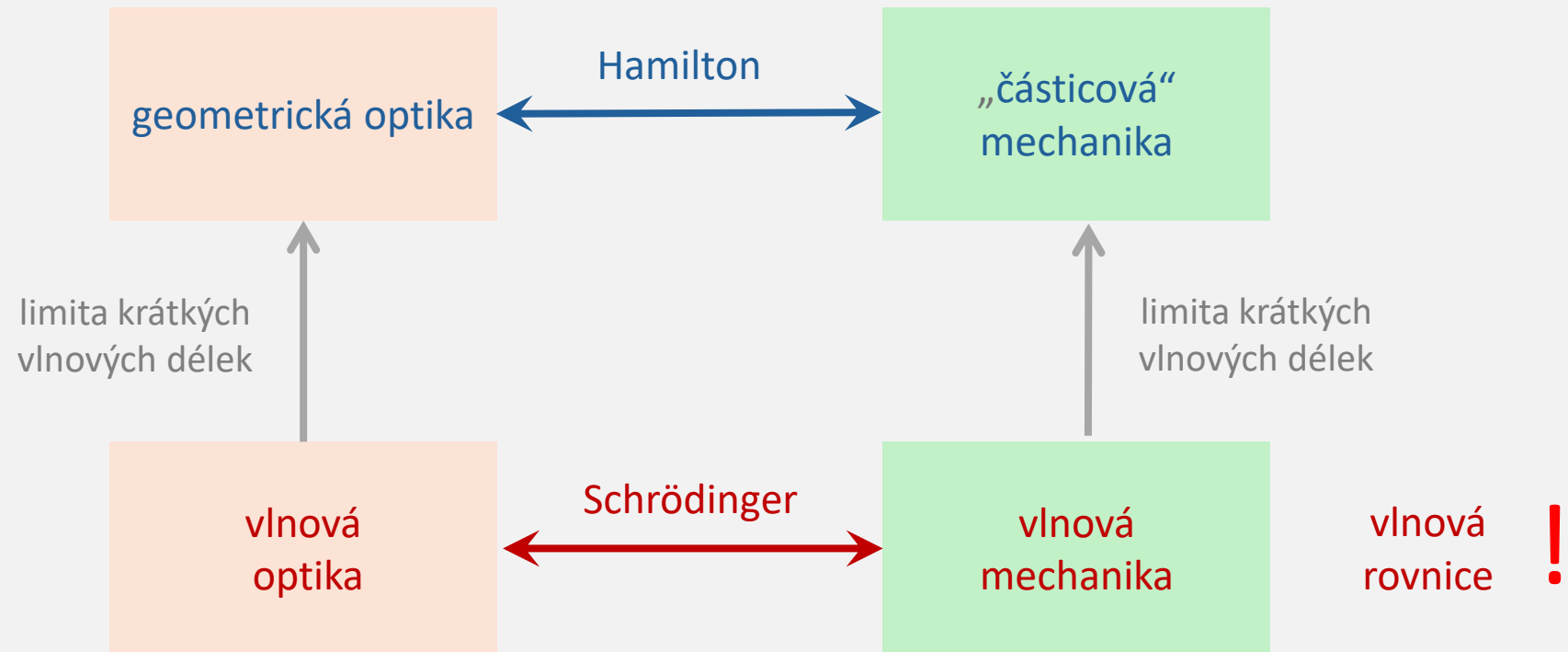
Schrödinger uvádí: „Nacházíme zde opět teorém, který pan de Broglie ve svých krásných pracích, jimž vděčím za podnět k této práci, odvodil pro fázové vlny [volného] elektronu, a to s podstatným přihlédnutím k teorii relativity.“

Hamiltonova analogie mezi mechanikou a optikou

Hamiltonova analogie mezi mechanikou a optikou a její Schrödingerovo rozšíření



Hamiltonova analogie mezi mechanikou a optikou a její Schrödingerovo rozšíření



Studies in History and Philosophy of Modern Physics 40 (2009) 338–351



Contents lists available at ScienceDirect

Studies in History and Philosophy of Modern Physics

journal homepage: www.elsevier.com/locate/shpsb



The classical roots of wave mechanics: Schrödinger's transformations of the optical-mechanical analogy

Christian Joas, Christoph Lehner*

Max Planck Institute for the History of Science, Boltzmannstr. 22, 14195 Berlin, Germany

Dříve, než přistoupí k formulaci vlnové rovnice, Schrödinger píše:

„To, co nyní kategoricky vyslovuji jako domněnku, je následující:

Skutečný mechanický proces je vhodně reprezentován vlnovými ději v konfiguračním prostoru, nikoli pohybem „obrazových“ bodů reprezentujících systém v tomto prostoru. Zkoumání pohybu těchto bodů, které je předmětem klasické mechaniky, představuje pouze přibližný způsob popisu a má právě takové oprávnění, jaké má geometrická čili „paprsková“ optika ve srovnání se skutečným optickým dějem. Makroskopický mechanický proces bude znázorněn jako vlnový signál výše popsaného druhu, který lze s dostatečnou přesností považovat za bodový ve srovnání s geometrickou strukturou dráhy. Viděli jsme, že pro takový signál či skupinu vln platí přesně tytéž pohybové zákony, jaké klasická mechanika stanovuje pro pohyb „obrazového“ bodu. Tento způsob výkladu však ztrácí veškerý smysl tam, kde struktura dráhy již není velmi velká ve srovnání s vlnovými délkami, anebo je s nimi dokonce srovnatelná. Pak musíme postupovat přísně podle vlnové teorie, tj. chceme-li si utvořit představu o mnohosti možných procesů, musíme vycházet z vlnové rovnice a nikoli ze základních rovnic mechaniky. Tyto rovnice jsou totiž při objasňování mikrostruktury mechanických procesů právě tak bezmocné, jako je geometrická optika při vysvětlování jevů difrakce.“

Schrödinger v této chvíli přemítá:

„Jak nyní máme postupovat při vlnové reprezentaci mechaniky v těch případech, kde je to nutné? Místo základních rovnic mechaniky musíme vyjít z vlnové rovnice (...) Jediné, co máme pro určení rovnice, je rychlost vlny u jako funkce energie/frekvence; na základě toho vlnová rovnice zjevně není určena jednoznačně. Není nijak jisté, že musí být právě druhého řádu. Pouze snaha o jednoduchost vede k tomu, že to nejprve zkusíme tímto způsobem.“

$$\Delta\psi = -\frac{4\pi^2 f^2}{u^2} \psi$$

$$u = \frac{E}{\sqrt{2m[E - V(\vec{r})]}}$$

musíme vycházet z vlnové rovnice

$$\Delta\psi + \frac{8\pi^2 m}{h^2} [E - V(\vec{r})]\psi = 0$$

Potenciální energie se
do vlnové rovnice dostala
prostřednictvím (fázové)
rychlosti vlny.

$$\Delta\psi = -\frac{4\pi^2 f^2}{u^2} \psi$$

$$u = \frac{E}{\sqrt{2m[E - V(\vec{r})]}}$$

Vyplývá z analogie mezi
mechanikou a optikou

STEJNÉ RYSY ODVOZENÍ
JAKO Z VÁNOC 1925

$$u = \frac{c^2}{v}$$

de Broglie
relativistická volná
částice

... a poprvé funkci ψ nazývá vlnovou

$$\Delta\psi + \frac{8\pi^2m}{h^2} [E - V(\vec{r})]\psi = 0$$

... a poznamenává

$$\Delta\psi + \frac{8\pi^2m}{h^2} [E - V(\vec{r})]\psi = 0$$

„Nechci zde přejít mlčením fakt, že v současnosti ze strany Heisenberga, Borna, Jordana a několika dalších vynikajících badatelů probíhá pokus odstranit problémy kvantové teorie, který již vykazuje tak pozoruhodné úspěchy, že je těžké pochybovat o tom, že obsahuje alespoň část pravdy. Hlavní záměr Heisenbergova pokusu je velmi blízký tomu, co zde předkládáme (...). Co se týče metody, je natolik odlišný, že se mi zatím nepodařilo najít spojovací článek.

Upřímně doufám, že tyto dva přístupy nepůjdou proti sobě, nýbrž – právě kvůli mimořádné odlišnosti východisek a metod – se budou vzájemně doplňovat, přičemž jeden pomůže tam, kde druhý selhává.

... a dodává

$$\Delta\psi + \frac{8\pi^2m}{h^2} [E - V(\vec{r})]\psi = 0$$

Síla Heisenbergova programu je v tom, že naznačuje, jak určit intenzity spektrálních čar, což je otázka, jíž jsme se zde dosud vůbec nevěnovali.

Předností zde předkládaného pokusu – smím-li si o něm dovolit vyslovit soud – je fyzikální pohled, který propojuje oblast makroskopických dějů s mikroskopickými a vysvětluje, proč je třeba k nim přistupovat odlišnými způsoby.

Vzniká otázka:

Byla vlnová mechanika reformulací maticové mechaniky.

Nikoli, Schrödinger znal maticovou mechaniku, ale kráčel nezávisle svou vlastní, originální cestou.

... a užívá ji k řešení problémů

$$\Delta\psi + \frac{8\pi^2m}{h^2} [E - V(\vec{r})]\psi = 0$$

- harmonický oscilátor $E_n = \frac{1}{2} \left(n + \frac{1}{2} \right) hf$ $n = 0, 1, 2, \dots$
- rotátor $E_l = \frac{l(l+1)h^2}{8\pi^2 I} = \frac{L^2}{2I}$ $l = 0, 1, 2, \dots$

... a vede intenzivní komunikaci

$$\Delta\psi + \frac{8\pi^2m}{h^2} [E - V(\vec{r})]\psi = 0$$

se Sommerfeldem, který ho pozve k přednáškám do Mnichova, a později s Planckem, který ho pozve do Berlína k přednáškám (a pobytu v jeho domě) ...

a dalšími fyziky: Willy Wien (redaktor Ann. Phys.), Lorentz, Pauli, Born ...

Dopisy – které mají vysokou literární úroveň – v nichž se podrobně diskutují fyzikální problémy, významně přispěly k chápání nové kvantové teorie i k formulaci článků.

Návštěvy v Berlíně /16.7.1926/ a potom v Mnichově /23.7.1926/, kde se setkává s Heisenbergem), se uskutečnily až po dokončení poslední, čtvrté části Schrödingerovy tetralogie, v níž „odvozuje“ časovou vlnovou rovnici.

Po druhém sdělení **Schrödinger** přerušuje práci na tetralogii Kvantování jako problém vlastních hodnot a ukazuje, že jeho vlnová a Heisenbergova maticová mechanika jsou ekvivalentní.

734

*3. Über das Verhältnis der Heisenberg-Born-Jordanschen Quantenmechanik zu der meinen;
von Erwin Schrödinger.*

§ 1. Einleitung und Inhaltsübersicht.

Bei der außerordentlichen Verschiedenheit der Ausgangspunkte und Vorstellungskreise der Heisenbergschen Quantenmechanik¹⁾ einerseits und der neulich hier in ihren Grundzügen dargelegten und als „undulatorische“ oder „physikalische“ Mechanik bezeichneten Theorie²⁾ andererseits, ist es recht seltsam, daß diese beiden neuen Quantentheorien hinsichtlich der bisher bekannt gewordenen speziellen Ergebnisse *miteinander* auch dort übereinstimmen, wo sie von der alten Quantentheorie abweichen. Ich nenne vor allem die eigentümliche „Halbzahligkeit“ beim Oszillator und beim Rotator. Das ist wirklich sehr merkwürdig, denn Ausgangspunkt, Vorstellungen, Methode, der ganze mathematische Apparat scheinen in der Tat grundverschieden. Vor allem aber scheint das Abgehen von der klassischen Mechanik in den beiden Theorien geradezu in diametral entgegengesetzter Richtung zu erfolgen. Bei Heisenberg werden die klassischen kontinuierlichen Variablen durch Systeme diskreter Zahlengrößen (Matrizen) ersetzt, die, von einem ganzzahligen Indexpaar abhängig, durch *algebraische* Gleichungen bestimmt werden. Die Autoren selbst bezeichnen

1) W. Heisenberg, Ztschr. f. Phys. 33. S. 879. 1925; M. Born und P. Jordan, ebendort 34. S. 858. 1925 u. 35. S. 557. 1926 (letzteres *mit* Heisenberg). Ich erlaube mir im folgenden der Kürze halber die drei Autornamen im allgemeinen durch den Heisenbergs zu ersetzen und zitiere die zwei letztgenannten Abhandlungen mit „Quantenmechanik I u. II“. Interessante Beiträge zu der Theorie auch von P. Dirac, Proc. Roy. Soc. London 109. S. 642. 1925 u. ebendort 110. S. 561. 1926.

2) E. Schrödinger, Ann. d. Phys. 79. S. 361 (1. Mitteilung); 79. S. 489. 1926 (2. Mitteilung). Diese Mitteilungsreihe wird, ganz unabhängig von der vorliegenden Note, welche nur das Verbindungsglied herstellen soll, fortgesetzt werden.

Článek začíná takto: „Při mimořádné odlišnosti výchozích předpokladů a přístupů [obou teorií] je poměrně podivuhodné, že tyto dvě nové kvantové teorie se shodují v dosud známých speciálních výsledcích i tam, kde se odchyľují od staré kvantové teorie. (...) To je opravdu velmi pozoruhodné, neboť výchozí předpoklady, představy, metoda, celý matematický aparát se zdají být skutečně zásadně odlišné.

Především se však zdá, že odklon od klasické mechaniky v obou teoriích probíhá téměř diametrálně opačným směrem. U Heisenberga jsou klasické spojité proměnné nahrazeny systémy diskrétních číselných veličin (maticemi), které jsou (...) určeny algebraickými rovnicemi. Autoři sami označují tuto teorii za ‚pravou diskontinuální teorii‘.

Vlnová mechanika naopak představuje krok od klasické mechaniky směrem ke kontinuální teorii (...).

V následujícím textu má být nyní odhalena velmi intimní vnitřní souvislost mezi Heisenbergovou kvantovou mechanikou a mou vlnovou mechanikou. Z formálně matematického hlediska by ji bylo možno považovat za **identitu obou teorií.**“

V této práci Schrödinger

- zavádí lineární diferenciální operátory

$$p \rightarrow K \frac{\partial}{\partial q}, K = \frac{h}{2\pi i}$$

a vytváří operátorový formalismus nahrazující göttingenské maticové schéma

- operátoru $\hat{F}$ přiřazuje matici, jejíž maticové prvky definuje integrálem

$$F^{kl} = \int u_1(x) \hat{F} u_2(x) dx$$

přičemž zavedl úplný ortogonální systém funkcí $\{u_n(u)\}$

Courant-Hilbert: *Methoden der mathematischen Physik* (1924).

V této práci **Schrödinger**

- zavádí lineární diferenciální operátory

$$p \rightarrow K \frac{\partial}{\partial q}, K$$

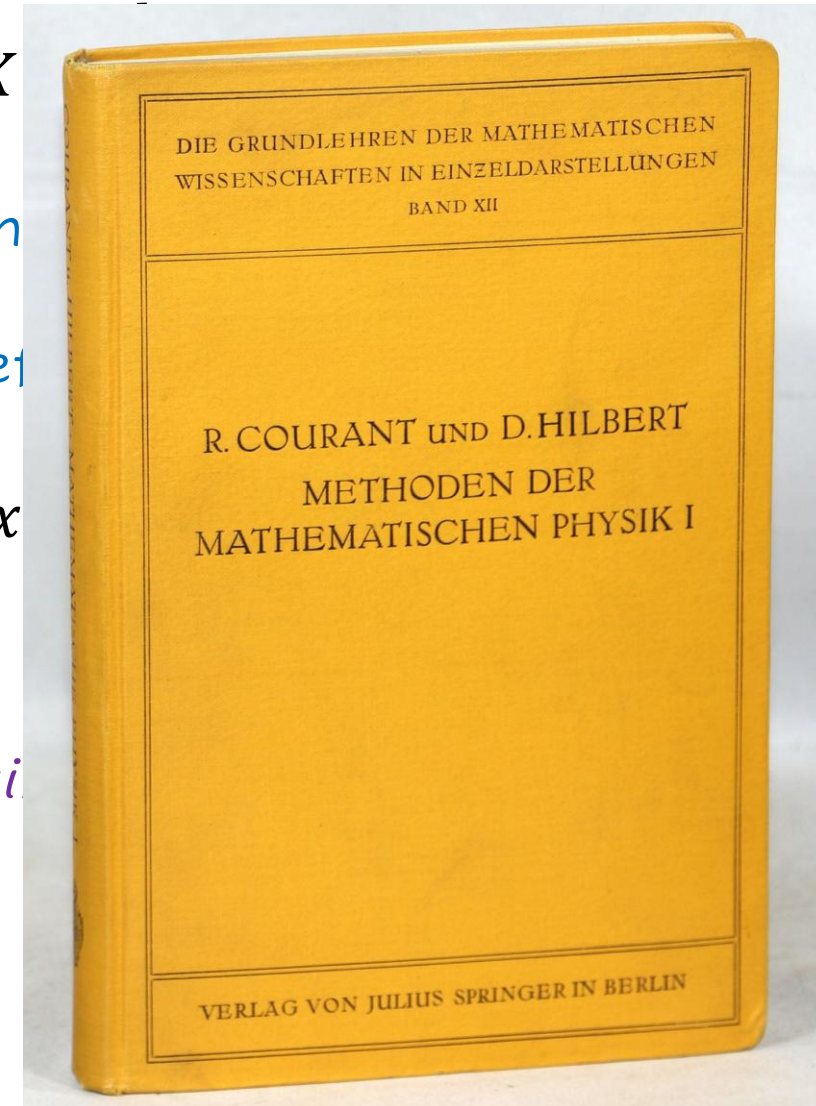
a vytváří operátorový formalismus nahrazující göttin

- operátoru $\hat{F}$ přiřazuje matici, jejíž maticové prvky def

$$F^{kl} = \int u_1(x$$

přičemž zavedl úplný ortogonální systém funkcí $\{u_n(u)\}$

Courant-Hilbert: *Methoden der mathematischen Physik*



V této práci Schrödinger

- zavádí lineární diferenciální operátory

$$p \rightarrow K \frac{\partial}{\partial q}, K = \frac{h}{2\pi i}$$

a vytváří operátorový formalismus nahrazující göttingenské maticové schéma

- operátoru $\hat{F}$ přiřazuje matici, jejíž maticové prvky definuje integrálem

$$F^{kl} = \int u_1(x) \hat{F} u_2(x) dx$$

přičemž zavedl úplný ortogonální systém funkcí $\{u_n(u)\}$

- po podrobných výpočtech prokázal, že řešení celé soustavy maticových rovnic Heisenberga, Borna a Jordana lze převést na přirozenou okrajovou úlohu lineární parciální diferenciální rovnice

- Pro většinu fyziků byl **Schrödingerův** přístup, pracující s diferenciálními operátory, přijatelnější než algebraická teorie **Heisenberga**, Borna a Jordana.
- Výhody **Schrödingerovy** teorie oceňoval **P. Dirac**.
- **Schrödinger** přijímal **Heisenbergovu** maticovou mechaniku zdrženlivě a stejně tak **Heisenberg** přijímal **Schrödingerovu** vlnovou mechaniku zdrženlivě.

Schrödinger : „Jeho [Heisenbergovu] teorii jsem ovšem znal, ale odrazovaly mě metody velmi abstraktní algebry, které se mi zdály obtížné, i nedostatek názornosti, který na mne působil až odpudivě.“

Heisenberg : „Děkuji za tvou [Pauliho] skvělou knihu (...), její četba byla skutečným odpočinkem po **Schrödingerových** mnichovských přednáškách. Jakkoli je **Schrödinger** osobně milý, jeho fyzika mi připadá podivná ...“

... a v její třetí části buduje stacionární poruchovou teorii a užívá ji na Starkův jev.

1926

№ 13

ANNALEN DER PHYSIK

VIERTE FOLGE BAND 80

1. *Quantisierung als Eigenwertproblem;*
von E. Schrödinger

(Dritte¹⁾ Mitteilung: Störungstheorie, mit Anwendung auf den Starkeffekt der Balmerlinien.)

Einleitung. Inhaltsübersicht

Wie schon am Ende der letzten Mitteilung²⁾ angegeben, läßt sich das praktisch zugängliche Anwendungsgebiet der Eigenwerttheorie schon mittels verhältnismäßig elementarer Methoden ziemlich bedeutend über das Gebiet der „direkt lösbaren“ Probleme hinaus erweitern, indem man sich überlegt, daß sich die Eigenwerte und Eigenfunktionen auch für *solche* Randwertprobleme leicht näherungsweise angeben lassen, die einem direkt lösbaren Problem hinreichend benachbart sind. Wir wollen das, in Analogie zur Mechanik, die *Störungstheorie* für das Eigenwertproblem nennen. Sie beruht auf der wichtigen *Stetigkeitseigenschaft* der Eigenwerte und Eigenfunktionen³⁾, wobei für uns hauptsächlich die *stetige* Abhängigkeit von den *Koeffizienten* der Differentialgleichung, weniger diejenige von der Ausdehnung des Grundgebietes und von den Randbedingungen in Betracht kommt, da ja in unserem Falle das Grundgebiet („ganzer q -Raum“) und die Randbedingungen („Endlichbleiben“) im allgemeinen beim ungestörten und beim gestörten Problem übereinstimmen werden.

Die Methode ist im wesentlichen schon von Lord Rayleigh benützt worden, der in der „Theory of sound“ (2. Aufl. Bd. I, S. 115—118. London 1894) die Schwingungen einer Saite mit *kleinen Unhomogenitäten* untersucht.⁴⁾ Hier liegt der besonders einfache Fall vor, daß die Differentialgleichung des ungestörten Problems *konstante* Koeffizienten hat und nur die Störungs-

1) Vgl. Ann. d. Phys. 79. S. 361, 489. 1926; ferner auch ebendort S. 734.

2) a. a. O. S. 526.

3) „Courant-Hilbert“ Kap. VI. § 2, 4. S. 337.

4) Courant-Hilbert, Kap. V, § 5, 2. S. 241.

V úvodu **čtvrté** části své tetralogie

1926

№ 18

ANNALEN DER PHYSIK

VIERTE FOLGE. BAND 81

1. *Quantisierung als Eigenwertproblem;* *von E. Schrödinger*

(Vierte Mitteilung¹⁾)

Inhaltsübersicht: § 1. Elimination des Energieparameters aus der Schwingungsgleichung. Die eigentliche Wellengleichung. Nichtkonservative Systeme. — § 2. Ausdehnung der Störungstheorie auf Störungen, welche explizite die Zeit enthalten. Dispersionstheorie. — § 3. Ergänzungen zu § 2: Angeregte Atome, entartete Systeme, Streckenspektrum. — § 4. Erörterung des Resonanzfalles. — § 5. Verallgemeinerung für eine beliebige Störung. — § 6. Relativistisch-magnetische Verallgemeinerung der Grundgleichungen. — § 7. Über die physikalische Bedeutung des Feldskalars.

§ 1. Elimination des Energieparameters aus der Schwingungsgleichung. Die eigentliche Wellengleichung. Nichtkonservative Systeme

Die Wellengleichung (18) bzw. (18'') von S. 510 der zweiten Mitteilung

$$(1) \quad \Delta \psi - \frac{2(E - V)}{E^2} \frac{\partial^2 \psi}{\partial t^2} = 0$$

bzw.

$$(1') \quad \Delta \psi + \frac{8\pi^2}{h^2} (E - V) \psi = 0,$$

welche das *Fundament* der in dieser Abhandlungsreihe versuchten Neubegründung der Mechanik bildet, leidet an dem Übelstand, daß sie das Veränderungsgesetz für den „mechanischen Feldskalar“ ψ nicht *einheitlich* und nicht *allgemein* ausspricht. Gleichung (1) enthält nämlich den Energie- oder Frequenzparameter E und ist, wie a. a. O. ausdrücklich betont, mit einem *bestimmten* E -Wert gültig für Vorgänge, welche

1) Vgl. Ann. d. Phys. 79. S. 361. 489; 80. S. 437. 1926; ferner über den Zusammenhang mit der Heisenbergschen Theorie: ebendort 79. S. 734.

V úvodu **čtvrté** části své tetralogie o vlnové mechanice Schrödinger uvádí:

$$\Delta\psi + \frac{8\pi^2m}{h^2} [E - V(\vec{r})]\psi = 0$$

„Dosud jsme vždy předpokládali, že **potenciální energie nezávisí explicitně na čase**. Existuje však potřeba rozšířit teorii na **nekonzervativní systémy**, protože jen tímto způsobem lze studovat chování systému pod vlivem světelné vlny.“

Rovnice byla získána za
předpokladu, že

$$\psi \propto \exp\left(\pm i \frac{2\pi E}{h} t\right)$$

$$\Delta\psi + \frac{8\pi^2 m}{h^2} [E - V(\vec{r})]\psi = 0$$

$$\dot{\psi} = \pm i \frac{2\pi E}{h} \psi \Rightarrow E\psi = \mp i \frac{h}{2\pi} \dot{\psi}$$

$$\psi \propto \exp\left(\pm i \frac{2\pi E}{h} t\right)$$

$$\Delta\psi + \frac{8\pi^2 m}{h^2} [E - V(\vec{r})]\psi = 0$$

$$\dot{\psi} = \pm i \frac{2\pi E}{h} \psi \Rightarrow E\psi = \mp i \frac{h}{2\pi} \dot{\psi}$$

Úplná, časová ...

$$\Delta\psi \mp i \frac{4\pi m}{h} \dot{\psi} - \frac{8\pi^2 m}{h^2} V\psi = 0$$

$\psi(\vec{r}, t)$



V nezávisí na čase

Schrödinger uvádí:

„Můžeme se prozatímně odvážit jít ještě o krok dále a pokusit se tuto rovnici použít také v případě, kdy potenciální energie V explicitně obsahuje čas. Vůbec není zřejmé, že jde o správné zobecnění (...). Úspěch však náš postup ospravedlní.“

I stalo se. Schrödinger úspěšně vyřešil problém interakce světla s atomem (dostal mj. Heisenbergovu-Kramersovu formuli).

$$\Delta\psi \mp i\frac{4\pi m}{h}\dot{\psi} - \frac{8\pi^2 m}{h^2}V\psi = 0 \quad \psi(\vec{r}, t)$$



V může záviset na čase

$$\Delta\psi + \mathbf{i} \frac{4\pi m}{h} \dot{\psi} - \frac{8\pi^2 m}{h^2} V\psi = 0$$

$\psi(\vec{r}, t)$ je komplexní

SCHRÖDINGER ZPOČÁTKU NEPŘIJÍMAL KOMPLEXNÍ VLNOVOU FUNKCI ...

Komplexní vlnová funkce **Schrödingera** vskutku trápila. Poslední odstavec poslední práce **tetralogie** je věnován tomuto jeho trápení.

„Určitá obtíž je dosud spojena s používáním *komplexní vlnové funkce*. Kdyby byla v zásadě nevyhnutelná a nikoli pouhou výpočetní zjednodušující pomůckou, znamenalo by to, že v zásadě existují *dvě vlnové funkce*, které teprve společně poskytují informaci o stavu systému.

...

$$\Delta\psi \mp i\frac{4\pi m}{h}\dot{\psi} - \frac{8\pi^2 m}{h^2}V\psi = 0$$

SCHRÖDINGER ZPOČÁTKU NEPŘIJÍMAL KOMPLEXNÍ VLNOVOU FUNKCI ...
A NAKONEC SE S NÍ TROCHU SMÍŘIL.

Výběr znaménka před i .

$$\left(-\frac{h^2}{8\pi^2 m} \Delta + V \right) \psi = -i \frac{h}{2\pi} \dot{\psi} \quad (1928)$$

$$\left(-\frac{h^2}{8\pi^2 m} \Delta + V \right) \psi = +i \frac{h}{2\pi} \dot{\psi}$$

$$\Delta \psi \mp i \frac{4\pi m}{h} \dot{\psi} - \frac{8\pi^2 m}{h^2} V \psi = 0$$

Výběr znaménka před i .

$$\left(-\frac{h^2}{8\pi^2 m} \Delta + V \right) \psi = -i \frac{h}{2\pi} \dot{\psi}$$

$$\left(-\frac{h^2}{8\pi^2 m} \Delta + V \right) \psi = +i \frac{h}{2\pi} \dot{\psi}$$

(1928)

$$\Delta \psi \mp i \frac{4\pi m}{h} \dot{\psi} - \frac{8\pi^2 m}{h^2} V \psi = 0$$

E. Schrödinger: Vier Vorlesungen über Wellenmechanik. Julius Springer 1928

$$\Delta \psi - \frac{4\pi m i}{h} \dot{\psi} - \frac{8\pi^2 m}{h^2} V \psi = 0. \quad (22)$$

E. U. Condon, P. M. Morse: Quantum Mechanics. McGraw-Hill 1929

$$\Delta \Psi - \frac{8\pi^2 \mu}{h^2} V \Psi + \frac{4\pi i \mu}{h} \frac{\partial \Psi}{\partial t} = 0. \quad (8.1)$$

J. Frenkel: Einführung in die Wellenmechanik. Julius Springer 1929

$$\left. \begin{aligned} \frac{4\pi i m}{h} \frac{\partial \psi}{\partial t} + \Delta \psi - \frac{8\pi^2 m}{h^2} V \psi &= 0 \\ -\frac{4\pi i m}{h} \frac{\partial \psi^*}{\partial t} + \Delta \psi^* - \frac{8\pi^2 m}{h^2} V \psi^* &= 0 \end{aligned} \right\}$$

A. Sommerfeld: Atombau und Spektrallinien. Wellenmechanischer Ergänzungsband. Friedr. Vieweg & Sohn 1929

$$(13) \quad -\frac{h^2}{8\pi^2 m} \Delta u + V u = \frac{h}{2\pi i} \frac{\partial u}{\partial t}.$$

P. A. M. Dirac: The Principles of Quantum Mechanics. Clarendon Press 1930

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = H\psi. \quad (43)$$

Schrödingerova rovnice od Schrödingera k Diracovi

$$\left(-\frac{h^2}{8\pi^2 m} \Delta + V \right) \psi = -i \frac{h}{2\pi} \dot{\psi}$$

$$\left(-\frac{h^2}{8\pi^2 m} \Delta + V \right) \psi = +i \frac{h}{2\pi} \dot{\psi}$$

Jak výstižně uvádí E. Wigner, byla to právě tato druhá (úplná, časová) vlnová rovnice, která nakonec prohloubila a zobecnila základy nové atomové teorie nad rámec toho, čeho již dosáhl Heisenberg a jeho spolupracovníci a co Schrödinger svou první (nerelativistickou stacionární) vlnovou rovnicí pouze potvrdil.

100 LET SCHRÖDINGEROVÝCH ROVNIC

RELATIVISTICKÁ A NERELATIVISTICKÁ

NERELATIVISTICKÁ (NEČASOVÁ) NA TŘIKRÁT/NA DVAKRÁT

ÚPLNÁ ČILI ČASOVÁ ROVNICE

Vlnová mechanika nevzešla ze Schrödingerovy předem dané představy vlnového popisu atomu; naopak, zjevně úspěšná vlnová rovnice si vyžádala rozvinutí takového popisu.

100 LET SCHRÖDINGEROVÝCH ROVNIC

Jak je to v učebnicích

NEČASOVÁ ROVNICE

$$\hat{H}\psi(\vec{r}) = E\psi(\vec{r})$$

$$\Psi(\vec{r}, t) = f(t)\psi(\vec{r}) \quad V(\vec{r})$$

ČASOVÁ ROVNICE

$$i\hbar\dot{\Psi}(\vec{r}, t) = \hat{H}\Psi(\vec{r}, t)$$



Schrödinger svou tetralogii končí paragrafem

O FYZIKÁLNÍM VÝZNAMU POLNÍHO SKALÁRU.

„Výraz $\psi\psi^*$ je jakousi váhovou funkcí v konfiguračním prostoru systému. Vlnově mechanická konfigurace systému je superpozicí mnoha – přísně vzato všech – kinematicky možných bodově mechanických konfigurací. Přitom každá bodově mechanická konfigurace přispívá ke skutečné vlnově mechanické konfiguraci s jistou vahou; tato váha je právě dána výrazem $\psi\psi^*$. Má-li někdo zálibu v paradoxech, může říci, že se systém nachází jakoby ve všech kinematicky myslitelných polohách současně, avšak ne ve všech „stejně výrazně.“

Aby toto své tvrzení o $\psi\psi^*$ podpořil, odvozuje rovnici kontinuity:

$$\frac{\partial(\psi\psi^*)}{\partial t} = -\nabla \cdot \left[-i \frac{he}{4\pi m} (\psi^* \nabla \psi - \psi \nabla \psi^*) \right]$$

Ze **Schrödingerových** prací a dopisů vyplývá:

- funkci ψ spojuje s jistým kmitavým dějem v atomu
- vlnové funkci ψ přiřazuje fyzikální význam jako světelné vlně – tj. elektron je rozprostřená vlna v prostoru
- později už neinterpretuje ψ , ale $\psi\psi^*$ (zcela jiný význam než Born!)
- Požadavek/přání, že matematický formalismus by měl reprezentovat skutečné fyzikální procesy v prostoru a čase, nikoli být jen pravidly pro výpočty

Schrödingerova epistemologická pozice – snaha zachovat spojitý a názorný obraz fyzikální reality („Anschaulichkeit“), který byl charakteristický pro klasickou teorii polí

Schrödinger připouští, že „čistě realistická interpretace naráží na obtíže“, ale stále ji považuje za filosoficky žádoucí.

nebyl jasný

AI

*Gar Manches rechnet Erwin schon
Mit seiner Wellenfunktion.
Nur wissen möcht' man gerne wohl,
Was man sich dabei vorstell'n soll.*

W. Hückel (1926)

Vlny přes listy,
počty padají jako déšť',
smysl se schoval.



Schrödinger, Pauli, von Neumann dokázali, že vlnová a maticová mechanika jsou dvě podoby téže teorie. Jejich interpretace se však diametrálně lišily. ... K tomu se vyjádřil Max Born během léta 1926 v článku Kvantová mechanika srážkových procesů (*Zeitschrift für Physik*):

Schrödinger, Pauli, von Neumann dokázali, že jsou dvě podoby téže teorie. Jejich interpretace K tomu se vyjádřil **Max Born** během léta 1926 v srážkových procesů (*Zeitschrift für Physik*):

Quantenmechanik der Stoßvorgänge¹⁾.

Von **Max Born** in Göttingen.

(Eingegangen am 21. Juli 1926.)

Die Schrödingersche Form der Quantenmechanik erlaubt in natürlicher Weise die Häufigkeit eines Zustandes zu definieren mit Hilfe der Intensität der zugeordneten Eigenschwingung. Diese Auffassung führt zu einer Theorie der Stoßvorgänge, bei der die Übergangswahrscheinlichkeiten durch das asymptotische Verhalten aperiodischer Lösungen bestimmt werden.

Einleitung. Die Stoßvorgänge haben nicht nur die überzeugendsten experimentellen Beweise für die Grundannahmen der Quantentheorie geliefert, sondern scheinen auch geeignet, Aufklärung zu geben über die physikalische Bedeutung der formalen Gesetze der sogenannten „Quantenmechanik“. Diese liefert zwar, wie es scheint, stets die richtigen Termwerte der stationären Zustände und die richtigen Amplituden der bei den Übergängen ausgestrahlten Schwingungen, aber über die physikalische Interpretation der Formeln sind die Meinungen geteilt. Die von Heisenberg begründete, von ihm gemeinsam mit Jordan und dem Verfasser dieser Mitteilung entwickelte Matrizenform der Quantenmechanik²⁾ geht von dem Gedanken aus, daß eine exakte Darstellung der Vorgänge in Raum und Zeit überhaupt unmöglich ist, und begnügt sich daher mit der Aufstellung von Relationen zwischen beobachtbaren Größen, die nur im klassischen Grenzfall als Eigenschaften von Bewegungen gedeutet werden können. Schrödinger³⁾ auf der anderen Seite scheint den Wellen, die er nach de Broglies Vorgang als die Träger der atomaren Prozesse ansieht, eine Realität von derselben Art zuzuschreiben, wie sie Lichtwellen besitzen; er versucht „Wellengruppen aufzubauen, welche in allen Richtungen relativ kleine Abmessungen“ haben und die offenbar die bewegte Korpuskel direkt darstellen sollen.

Keine dieser beiden Auffassungen scheint mir befriedigend. Ich möchte versuchen, hier eine dritte Interpretation zu geben und ihre Brauchbarkeit an den Stoßvorgängen zu erproben. Dabei knüpfe ich an

¹⁾ Hierzu eine vorläufige Mitteilung, ZS. f. Phys. **37**, 863, 1926.

²⁾ W. Heisenberg, ZS. f. Phys. **33**, 879, 1925; M. Born und P. Jordan, ebenda **34**, 858, 1925; M. Born, W. Heisenberg und P. Jordan, ebenda **35**, 557, 1926. Siehe auch P. A. M. Dirac, Proc. Roy. Soc. **109**, 642, 1925; **110**, 561, 1926.

³⁾ E. Schrödinger, Ann. d. Phys. **79**, 361, 489, 734, 1926. Vgl. besonders die zweite Mitteilung, S. 499. Ferner Naturw. **14**, 664, 1926.

Schrödinger, Pauli, von Neumann dokázali, že vlnová a maticová mechanika jsou dvě podoby téže teorie. Jejich interpretace se však diametrálně lišily. ... K tomu se vyjádřil **Max Born** během léta 1926 v článku *Kvantová mechanika srážkových procesů* (*Zeitschrift für Physik*):

„**Maticová** forma kvantové mechaniky, kterou založil W. Heisenberg a rozvinul spolu s P. Jordanem a autorem tohoto článku, vychází z myšlenky, že procesy v prostoru a čase vůbec nelze exaktně zobrazit a spokojí se s formulováním vztahů mezi pozorovatelnými veličinami, které lze interpretovat jako vlastnosti pohybů pouze v limitním klasickém případě. Na druhé straně E. Schrödinger, zdá se, připisuje vlnám stejnou realitu, jakou mají světelné vlny. Tyto vlny posuzuje podle postupu Louis de Broglie jako nositele atomárních procesů. Snaží se konstruovat vlnové balíky, které mají ve všech směrech malé rozměry a které mají zřejmě nepřímo zobrazit pohybující se částice.“

Ani jedno z obou pojetí se mi nezdá být uspokojivé. Pokusil bych se zde podat třetí interpretaci a vyzkoušet její použitelnost na srážkových procesech.

Při rozptylu se vlny šíří do všech směrů a je potřeba stanovit pravděpodobnost detekce nedělitelného elektronu v daném směru (to lze ověřit experimentem).

U vázaných stavů, kterým odpovídají vlastní kmity systému, se taková potřeba neobjevuje. (Vázanými stavy se zabýval Schrödinger.)

$$|\psi(x, y, z, t)|^2 dx dy dz = dP(x, y, z, t)$$

Schrödinger vnitřně nepřijal Kodaňskou interpretaci kvantové mechaniky (a vyhýbal se diskusí o ní)

- stále preferuje spojitost, názornost „*Anschaulichkeit*“ a realistický výklad jako filosoficky žádoucí směr, k němuž by se měla budoucí teorie, pokud možno, znovu přiblížit
- v oblasti kvantové mechaniky přestal pracovat (všichni jeho výsledky používali, ale vlastní školu kolem sebe – jako Heisenberg – nevytvořil)
- vracel se k ní sporadicky

1935 v článku *Die Gegenwärtige Situation in der Quantum Mechanik* (publikovaném v *Naturwissenschaften* po **EPR** práci)
vedl myšlenkový experiment známý jako Schrödingerova kočka
(*reductio ad absurdum*)

Schrödingerova teorie byla hotova.

Schrödinger přednáší v červenci

v Berlíně , kde jeho teorie přijata s nadšením

v Mnichově, kde zaznívaly výhrady (setkává se s Heisenbergem)

Počátkem září odesílá souhrnný článek *An undulatory theory of the mechanics of atoms and molecules* do *Physical Review*.

Schrödingerova teorie byla hotova.

Schrödinger přednáší v červenci

v **Berlíně**, kde jeho teorie přijata s nadšením

v **Mnichově**, kde zaznívaly výhrady (setkává se s Heisenbergem)

Počátkem září odesílá souhrnný článek *An undulatory theory of the mechanics of atoms and molecules* do *Physical Review*.

Od **1. do 9. října 1926** Schrödinger pobýval v Kodani u **Nielsa Bohra**.

Tato návštěva byla významná proto, že se zde diskutovaly i interpretační otázky.

Diskuse byly intenzivní a vyčerpaly Schrödingera tak, že onemocněl.

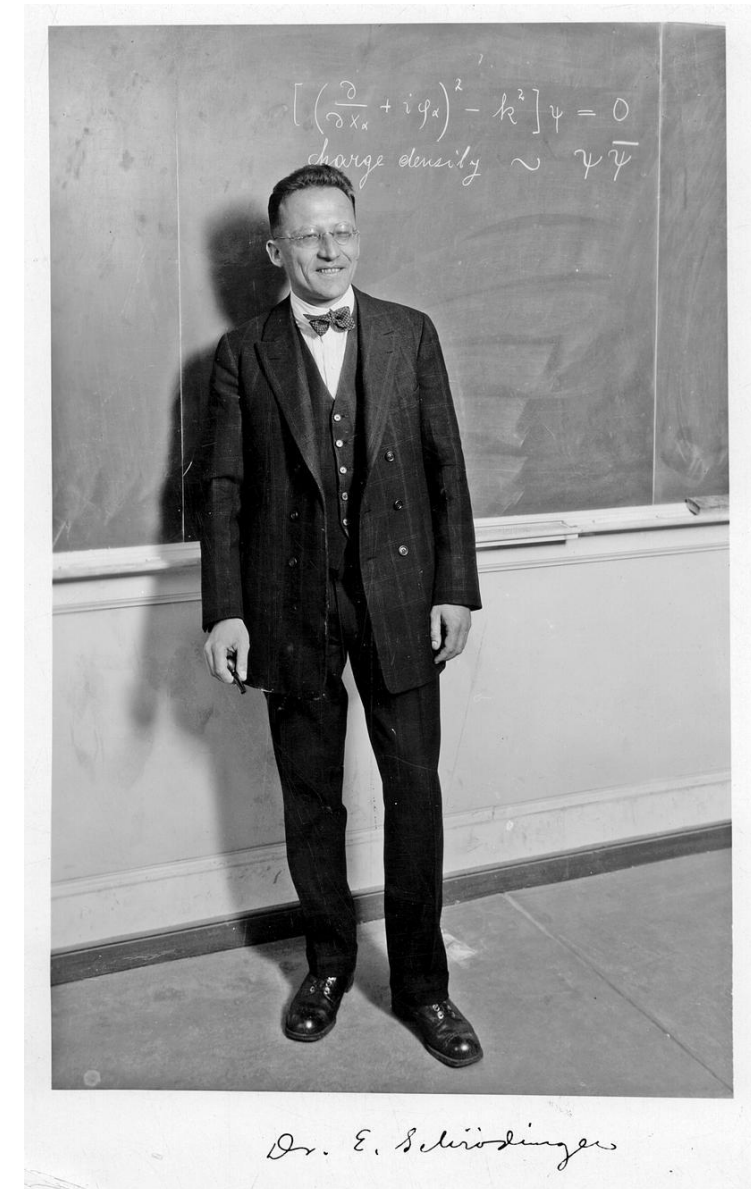


Od ledna do dubna 1927 **Schrödinger** přednášel v USA (přednesl několik desítek přednášek na řadě universit: University of Wisconsin, Chicago, CALTECH, ..., Harvard, Colombia, NY).

Erwin Schrödinger před tabulí v University of Wisconsin, prosinec 1926.

Na tabuli je relativistická vlnová rovnice.

Fotografie zachycuje Schrödingera stojícího před tabulí v době, kdy připravoval své přednášky, které začaly 2. ledna 1927.



Back of photograph: Professor E. Schrödinger, Dec 1926

Již v roce 1927 vyšlo souborné vydání **Schrödingerových** prací o vlnové mechanice. Druhé rozšířené vydání vyšlo v následujícím roce.

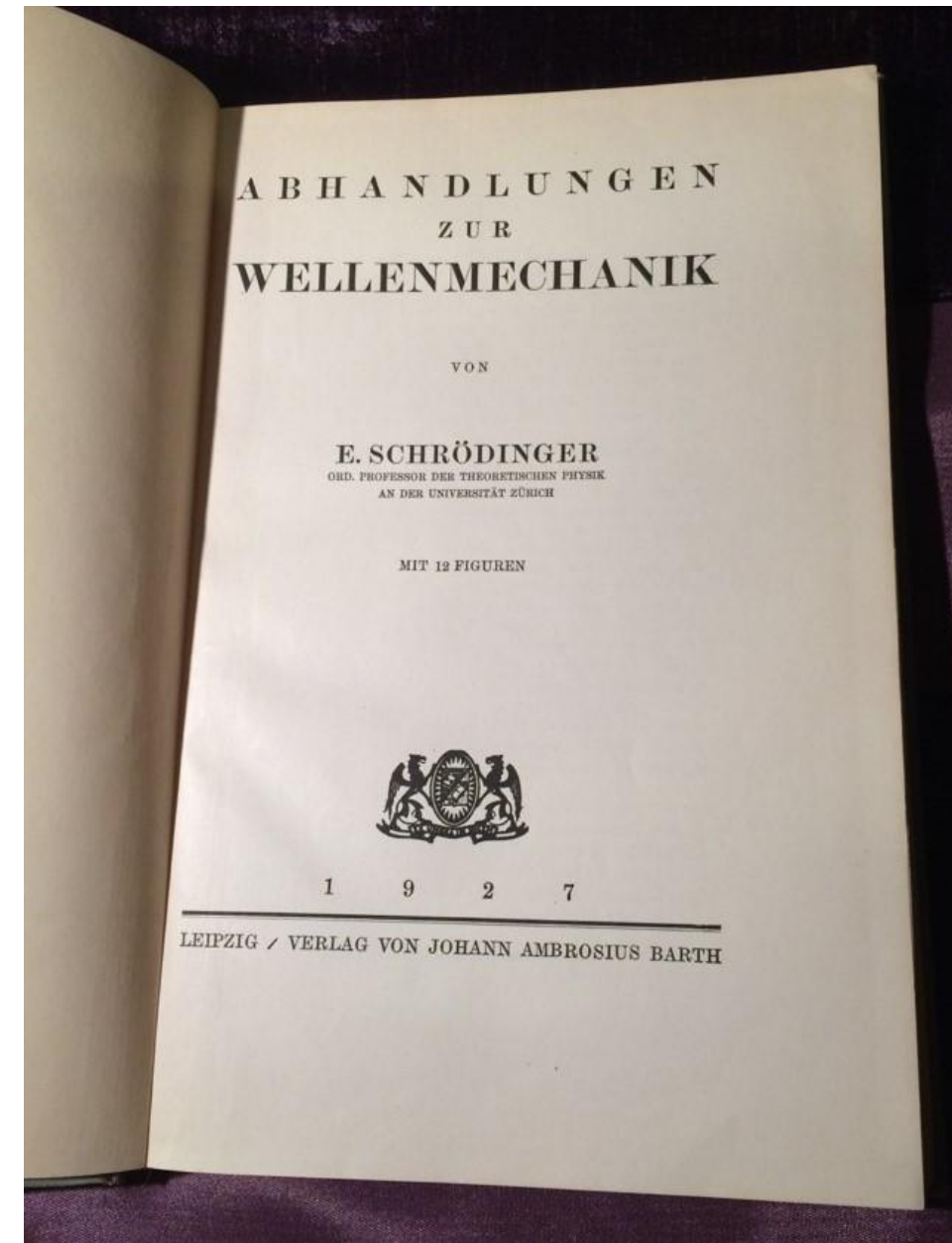
První anglické vydání vyšlo pod názvem *Collected Papers on Waves Mechanics* v roce 1928 a další v roce 1982.

Schrödinger se stává nástupcem M. Plancka na berlínské univerzitě (v té době předním centru světové fyziky – působili tam mj. A. Einstein, M. von Laue ...).

Schrödinger byl skvělý přednášející.

Vlastní fyzikální školu však nevytvořil

- byl vždy samotář, jen několik jeho prací mělo spoluautora,
- od kvantové teorie se odklonil.



Schrödinger se zařadil mezi prominentní fyziky a byl pozván jako klíčový účastník na pátou Solvayskou konferenci (Brusel, říjen 1927). (Účastnil se i předcházející, už tehdy byl považován za významného fyzika.) Setkání největších fyziků své doby roku 1927 významně ovlivnilo vývoj kvantové mechaniky.



17 z 19 účastníků dostalo Nobelovu cenu

Four Lectures on Wave Mechanics

Delivered at the Royal Institution, London, on
5th, 7th, 12th, and 14th March, 1928

BY

DR. ERWIN SCHRÖDINGER

Professor of Theoretical Physics in the
University of Berlin

1927 se stal nástupcem
Plancka v Berlíně

BLACKIE & SON LIMITED
LONDON AND GLASGOW
1928

- podávají jasný, srozumitelný a systematický výklad jeho teorie,
- ukazují její úspěchy (např. u atomu vodíku),
- naznačují
 - jeho odstup od Bornovy pravděpodobnostní interpretace,
 - jeho snahu
 - ✓ uchovat kontinuitu s klasickou fyzikou,
 - ✓ chápat kvantové děje jako skutečné vlnové procesy.

Four Lectures on Wave Mechanics

Delivered at the Royal Institution, London, on
5th, 7th, 12th, and 14th March, 1928

BY

DR. ERWIN SCHRÖDINGER

Professor of Theoretical Physics in the
University of Berlin

BLACKIE & SON LIMITED
LONDON AND GLASGOW
1928

Contents

FIRST LECTURE

	Page
1. Derivation of the fundamental idea of wave mechanics from Hamilton's analogy between ordinary mechanics and geometrical optics - - - -	1
2. Ordinary mechanics only an approximation, which no longer holds for very small systems - - -	6
3. Bohr's stationary energy-levels derived as the frequencies of proper vibrations of the waves - -	9

SECOND LECTURE

4. Rough description of the wave-systems in the hydrogen atom. Degeneracy. Perturbation - - -	14
5. The physical meaning of the wave function. Explanation of the selection rules and of the rules for the polarization of spectral lines - - -	16
6. Derivation of the wave equation (properly speaking) which contains the time - - -	22
7. An atom as perturbed by an alternating electric field -	23

THIRD LECTURE

8. Theory of secondary radiation and dispersion - -	27
9. Theory of resonance radiation, and of changes of the state of the atom produced by incident radiation whose frequency coincides, or nearly coincides, with a natural emission frequency - - -	31

vii

viii

CONTENTS

	Page
10. Extension of wave mechanics to systems other than a single mass-point - - - -	35
11. Examples: the oscillator, the rotator - - -	38

FOURTH LECTURE

12. Correction for motion of the nucleus in the hydrogen atom - - - -	43
13. Perturbation of an arbitrary system - - -	45
14. Interaction between two arbitrary systems - -	49
15. The physical meaning of the generalized ψ -function -	51

Four Lectures on Wave Mechanics

Delivered at the Royal Institution, London, on
5th, 7th, 12th, and 14th March, 1928

BY

DR. ERWIN SCHRÖDINGER

Professor of Theoretical Physics in the
University of Berlin

BLACKIE & SON LIMITED
LONDON AND GLASGOW
1928

Contents

FIRST LECTURE

	Page
1. Derivation of the fundamental idea of wave mechanics from Hamilton's analogy between ordinary mechanics and geometrical optics - - - -	1
2. Ordinary mechanics only an approximation, which no longer holds for very small systems - - - -	6
3. Bohr's stationary energy-levels derived as the frequencies of proper vibrations of the waves - - - -	9

SECOND LECTURE

4. Rough description of the wave-systems in the hydrogen atom. Degeneracy. Perturbation - - - -	14
5. The physical meaning of the wave function. Explanation of the selection rules and of the rules for the polarization of spectral lines - - - -	16
6. Derivation of the wave equation (properly speaking) which contains the time - - - -	22
7. An atom as perturbed by an alternating electric field - - - -	23

THIRD LECTURE

8. Theory of secondary radiation and dispersion - - - -	27
9. Theory of resonance radiation, and of changes of the state of the atom produced by incident radiation whose frequency coincides, or nearly coincides, with a natural emission frequency - - - -	31

vii

Four Lectures on Wave Mechanics

FIRST LECTURE

1. Derivation of the fundamental idea of wave mechanics from Hamilton's analogy between ordinary mechanics and geometrical optics.

When a *mass-point* m moves in a conservative field of force, described by the potential energy $V(x, y, z)$, then, if you let it start from a given point A with a given velocity, i.e. with a given energy E , you will be able to get it into another arbitrarily chosen point B by suitably "aiming", i.e. by letting it start in a quite definitely chosen *direction*. There is in general *one* definite dynamical orbit which leads from A to B with a given energy. This orbit possesses the property that



$$\delta \int_A^B 2T dt = 0, \quad \dots \quad (1)$$

and is defined by this property (Hamilton's principle in the form given to it by Maupertuis). Here T means the

Four Lectures on Wave Mechanics

Delivered at the Royal Institution, London, on
5th, 7th, 12th, and 14th March, 1928

BY

DR. ERWIN SCHRÖDINGER

Professor of Theoretical Physics in the
University of Berlin

BLACKIE & SON LIMITED
LONDON AND GLASGOW
1928

Contents

FIRST LECTURE

	Page
1. Derivation of the fundamental idea of wave mechanics from Hamilton's analogy between ordinary mechanics and geometrical optics - - - -	1
2. Ordinary mechanics only an approximation, which no longer holds for very small systems - - - -	6
3. Bohr's stationary energy-levels derived as the frequencies of proper vibrations of the waves - - - -	9

SECOND LECTURE

4. Rough description of the wave-systems in the hydrogen atom. Degeneracy. Perturbation - - - -	14
5. The physical meaning of the wave function. Explanation of the selection rules and of the rules for the polarization of spectral lines - - - -	16
6. Derivation of the wave equation (properly speaking) which contains the time - - - -	22
7. An atom as perturbed by an alternating electric field - - - -	23

THIRD LECTURE

8. Theory of secondary radiation and dispersion - - - -	27
9. Theory of resonance radiation, and of changes of the state of the atom produced by incident radiation whose frequency coincides, or nearly coincides, with a natural emission frequency - - - -	31

vii

Four Lectures on Wave Mechanics

FIRST LECTURE

1. Derivation of the fundamental idea of wave mechanics from Hamilton's analogy between ordinary mechanics and geometrical optics.

When a *mass-point* m moves in a conservative field of force, described by the potential energy $V(x, y, z)$, then, if you let it start from a given point A with a given velocity, i.e. with a given energy, you will be able to get it into another arbitrarily chosen point B by suitably choosing its initial velocity, i.e. by letting it start in a quite definitely chosen *direction*. There is in general *one* definite dynamical orbit which leads from A to B with a given energy. This orbit possesses the property that

$$\delta \int_A^B 2T dt = 0, \quad \dots \quad (1)$$

and is defined by this property (Hamilton's principle in the form given to it by Maupertuis). Here T means the

Variace „odvození“
vlnové rovnice
ve druhém článku.

Four Lectures on Wave Mechanics

Delivered at the Royal Institution, London, on
5th, 7th, 12th, and 14th March, 1928

BY

DR. ERWIN SCHRÖDINGER

Professor of Theoretical Physics in the
University of Berlin

BLACKIE & SON LIMITED
LONDON AND GLASGOW
1928

Contents

FIRST LECTURE

	Page
1. Derivation of the fundamental idea of wave mechanics from Hamilton's analogy between ordinary mechanics and geometrical optics - - - -	1
2. Ordinary mechanics only an approximation, which no longer holds for very small systems - - - -	6
3. Bohr's stationary energy-levels derived as the frequencies of proper vibrations of the waves - - - -	9

SECOND LECTURE

4. Rough description of the wave-systems in the hydrogen atom. Degeneracy. Perturbation - - - -	14
5. The physical meaning of the wave function. Explanation of the selection rules and of the rules for the polarization of spectral lines - - - -	16
6. Derivation of the wave equation (properly speaking) which contains the time - - - -	22
7. An atom as perturbed by an alternating electric field - - - -	23

THIRD LECTURE

8. Theory of secondary radiation and dispersion - - - -	27
9. Theory of resonance radiation, and of changes of the state of the atom produced by incident radiation whose frequency coincides, or nearly coincides, with a natural emission frequency - - - -	31

vii

Four Lectures on Wave Mechanics

FIRST LECTURE

1. Derivation of the fundamental idea of wave mechanics from Hamilton's analogy between ordinary mechanics and geometrical optics.

When a *mass-point* m moves in a conservative field of force, described by the potential energy $V(x, y, z)$, then, if you let it start from a given point A with a given velocity, i.e. with a given energy, you will be able to get it into another arbitrarily chosen point B by suitably adjusting, i.e. by letting it start in a quite definite condition. There is in general one definite dynamical orbit which leads from A to B . This orbit possesses the property that

O „odvození“
vlnové rovnice
v prvním článku
své tetralogie
se už nezmiňuje.

$$\delta \int_A^B 2T dt = 0, \quad \dots \quad (1)$$

and is defined by this property (Hamilton's principle in the form given to it by Maupertuis). Here T means the

XII/1926-III/1927

přednáškové turné v USA, kde se začala významně rozvíjet věda

1.10.1927

se stává nástupc

1933

odchází z Berlína

1933

Nobelova cena (s



XII/1926-III/1927	přednáškové turné v USA, kde se začala významně rozvíjet věda
1.10.1927	se stává nástupcem Plancka na berlínské univerzitě
1933	odchází z Berlína (a Německa), jeho jméno bylo škrtnuto z univerzitních seznamů
1933	Nobelova cena (spolu s P. Diracem)
1933-1936	Fellow of the Magdalen Colledge, Oxford

XII/1926-III/1927	přednáškové turné v USA, kde se začala významně rozvíjet věda
1.10.1927	se stává nástupcem Plancka na berlínské univerzitě
1933	odchází z Berlína (a Německa), jeho jméno bylo nacisty škrtnuto z univerzitních seznamů
1933	Nobelova cena (spolu s P. Diracem)
1933-1936	Fellow of the Magdalen Colledge, Oxford
X/1936–III/1938	místo do Edinburgu se vydal do Štýrského Hradce
IX/1938	utíká (s několika kufry) z Rakouska do Itálie, následuje opět Oxford a potom Gent

XII/1926-III/1927	přednáškové turné v USA, kde se začala významně rozvíjet věda
1.10.1927	se stává nástupcem Plancka na berlínské univerzitě
1933	odchází z Berlína (a Německa), jeho jméno bylo škrtnuto z u
1933	Nobelova cena (spolu s P. Diracem)
1933-1936	Fellow of the Magdalen Colledge, Oxford
X/1936–III/1938	místo do Edinburgu se vydal do Štýrského Hradce
IX/1938	utíká (s několika kufry) z Rakouska do Itálie, následuje opět C
X/1939-1956	Dublin Institute for Advanced Studies (píše knihu <i>Co je život?</i>)



XII/1926-III/1927	přednáškové turné v USA, kde se začala významně rozvíjet věda
1.10.1927	se stává nástupcem Plancka na berlínské univerzitě
1933	odchází z Berlína (a Německa), jeho jméno bylo škrtnuto z univerzitních seznamů
1933	Nobelova cena (spolu s P. Diracem)
1933-1936	Fellow of the Magdalen Colledge, Oxford
X/1936–III/1938	místo do Edinburgu se vydal do Štýrského Hradce
IX/1938	utíká (s několika kufry) z Rakouska do Itálie, následně do Spojeného království
X/1939-1956	Dublin Institute for Advanced Studies (píše knihu <i>Co je život?</i>)



„Ať už otcovo vzdělání a vysoká kulturnost byly pro jeho vědecké výsledky důležité či nikoliv, byly zcela určitě podstatné pro to, jak se jevil a jaký dojem činil jako lidská bytost,“ uvedla paní Ruth Braunizer.

XII/1926-III/1927	přednáškové turné v USA, kde se začala významně rozvíjet věda
1.10.1927	se stává nástupcem Plancka na berlínské univerzitě
1933	odchází z Berlína (a Německa), jeho jméno bylo škrtnuto z univerzitních seznamů
1933	Nobelova cena (spolu s P. Diracem)
1933-1936	Fellow of the Magdalen Colledge, Oxford
X/1936–III/1938	místo do Edinburgu se vydal do Štýrského Hradce
IX/1938	utíká (s několika kufry) z Rakouska do Itálie, následuje opět Oxford a potom Gent
X/1939-1956	Dublin Institute for Advanced Studies (píše knihu <i>Co je život?</i>)
III/1956	profesor (<i>ordinarius ad personam</i>) teoretické fyziky na univerzitě ve Vídni
+ 10. 1. 1961 Vídeň	pohřben v Alpbachu v Tyrolích

ERWIN RUDOLF JOSEF ALEXANDER SCHRÖDINGER

po roku 1926

- XII/1926-III/1927** přednáškové turné v USA, kde se začala význa
- 1.10.1927** se stává nástupcem Plancka na berlínské unive
- 1933** odchází z Berlína (a Německa), jeho jméno byl
- 1933** Nobelova cena (spolu s P. Diracem)
- 1933-1936** Fellow of the Magdalen Colledge, Oxford
- X/1936–III/1938** místo do Edinburgu se vydal do Štýrského Hra
- IX/1938** utíká (s několika kufry) z Rakouska do Itálie, ná
- X/1939-1956** Dublin Institute for Advanced Studies
(píše knihu *Co je život?*)
- III/1956** profesor (*ordinarius ad personam*) teoretické f
- + 10. 1. 1961 Vídeň** pohřben v Alpbachu v Tyrolích



Kvantová teorie se rodila od roku 1900

Od 1920 probíhala **výměna studentů**, především mezi Bornem, Bohrem, Sommerfeldem (*Knabenphysik*)

Kvantová mechanika se rodila v letech 1925 a 1926 (a moderně byla v úplnosti vyložena v roce 1930 v knize P. Diraca *Principles of Quantum Mechanics*)

Maticovou mechaniku rozvinula skupina fyziků (Heisenberg, Born, Jordan)

Vlnovou mechaniku vypracoval sám Schrödinger



Společné východisko

hamiltonovská mechanika

Maticovou mechaniku rozvinula skupina fyziků
(Heisenberg, Born, Jordan)

← **princip korespondence**

Vlnovou mechaniku vypracoval sám Schrödinger

← **opticko-mechanická analogie**

interpretace
kvantové mechaniky
Born, Heisenberg,
Bohr, EPR



formalismus
kvantové mechaniky
Heisenberg, Born, Jordan,
Schrödinger,
Dirac,
von Neumann

aplikace
kvantové mechaniky
Pauli, Sommerfeld, Bethe,
Heisenberg, Bloch,
Born-Oppenheimer,
Gamow,
Hund, Slater, Hartree, Fok,

...

„Schrödingerova brilantní práce byla bezpochyby jedním z nejvlivnějších příspěvků v dějinách vědy. Prohloubila naše porozumění atomovým jevům, poskytla vhodný základ pro matematické řešení problémů atomové fyziky, fyziky pevných látek a do určité míry také jaderné fyziky, a nakonec otevřela nové myšlenkové horizonty. Následný vývoj nerelativistické kvantové teorie byl totiž z nemalé části pouze rozpracováním a aplikací Schrödingerova díla.“

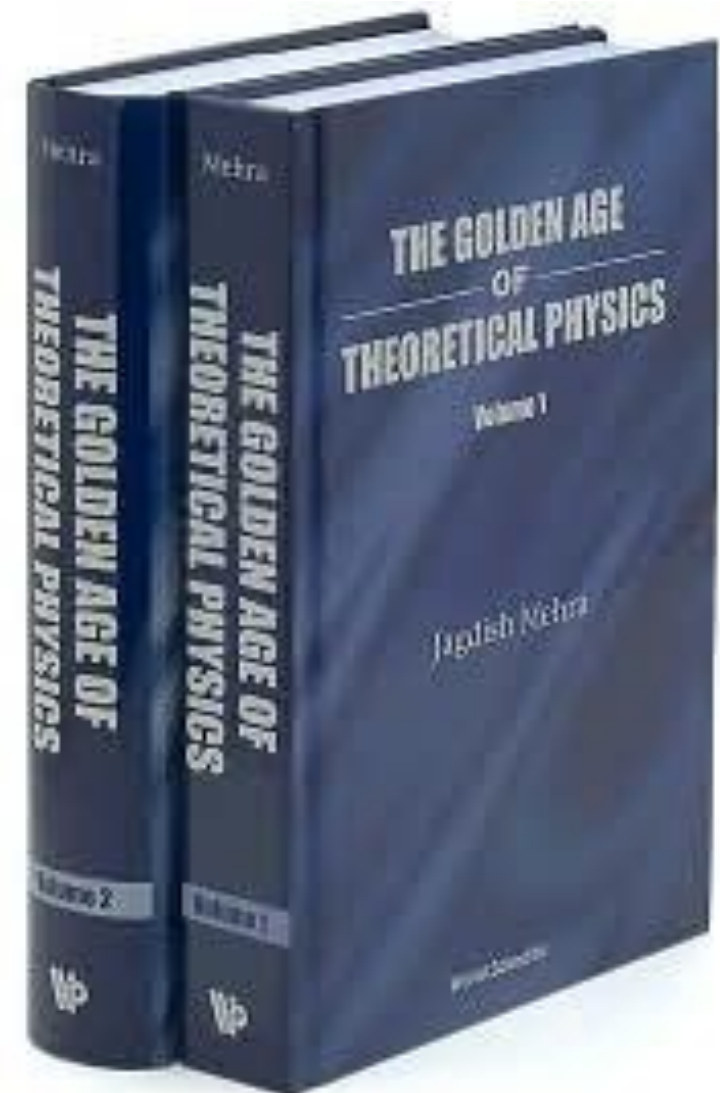
Max Jammer (1989)

The Conceptual Development of Quantum Mechanics

Kniha ***The Golden Age of Theoretical Physics*** od Jagdish Mehra je rozsáhlé dvousvazkové dílo poskytující syntetický historický pohled na období, v němž se rodila kvantová fyzika.

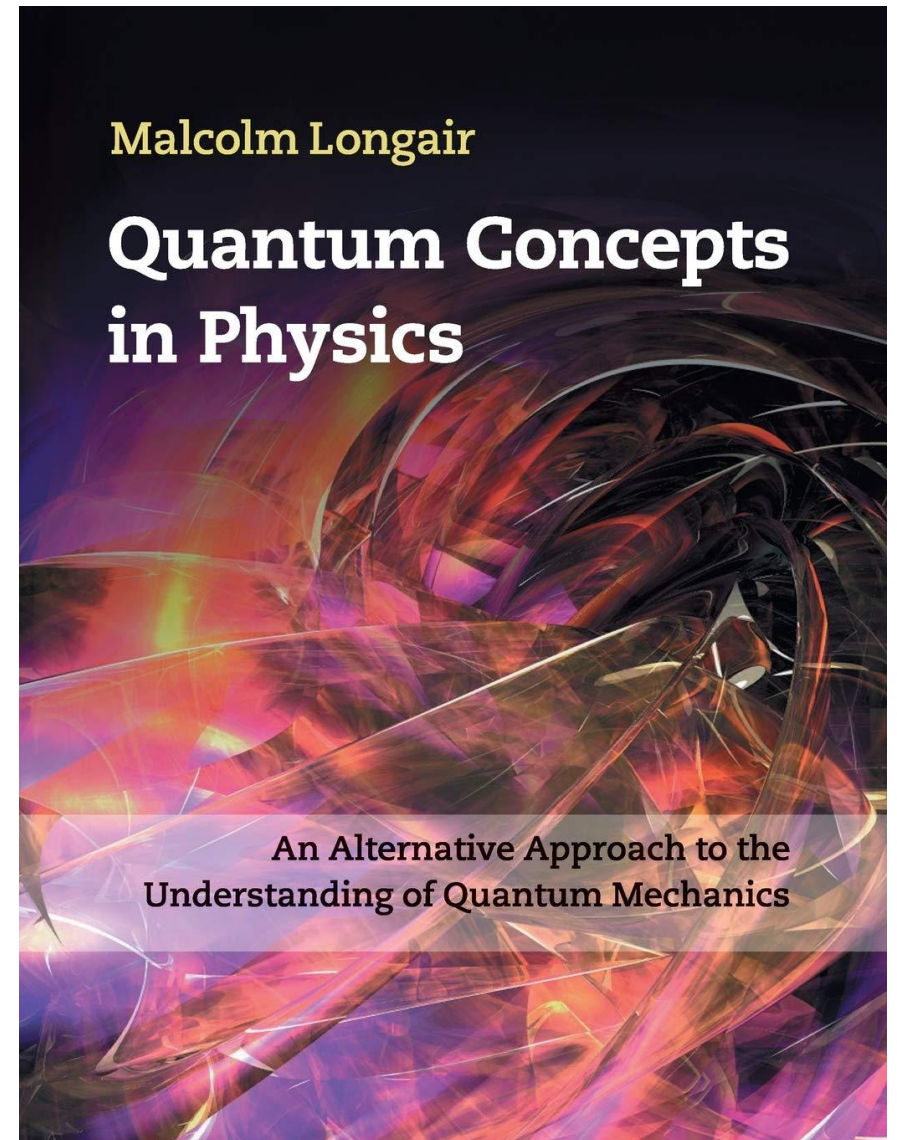
Autor v 37 esejích na základě archivních pramenů, korespondence a osobních svědectví rekonstruuje intelektuální prostředí 20. a 30. let.

Kniha plasticky líčí mimořádnou tvůrčí atmosféru této doby a sleduje interakce mezi hlavními protagonisty (Bohr, Dirac, Heisenberg, Schrödinger).



Kniha ***Quantum Concepts in Physics***, jejímž autorem je profesor teoretické fyziky Malcolm Longair (University of Cambridge), je netradičním průvodcem vývojem kvantové mechaniky. Nejde o klasickou učebnici, ale představuje historicko-konceptuální příběh, který ukazuje, jak se z rodící se staré kvantové teorie vyvinula plnohodnotná moderní kvantová mechanika.

Longair systematicky vysvětluje klíčové kroky vedoucí k její formulaci prostřednictvím myšlenkových postupů a experimentálních výsledků hlavních protagonistů – Plancka, Einsteina, Bohra, Heisenberga, Borna a Diraca – až po *Schrödingerovu vlnovou mechaniku* a její začlenění do širšího teoretického rámce.

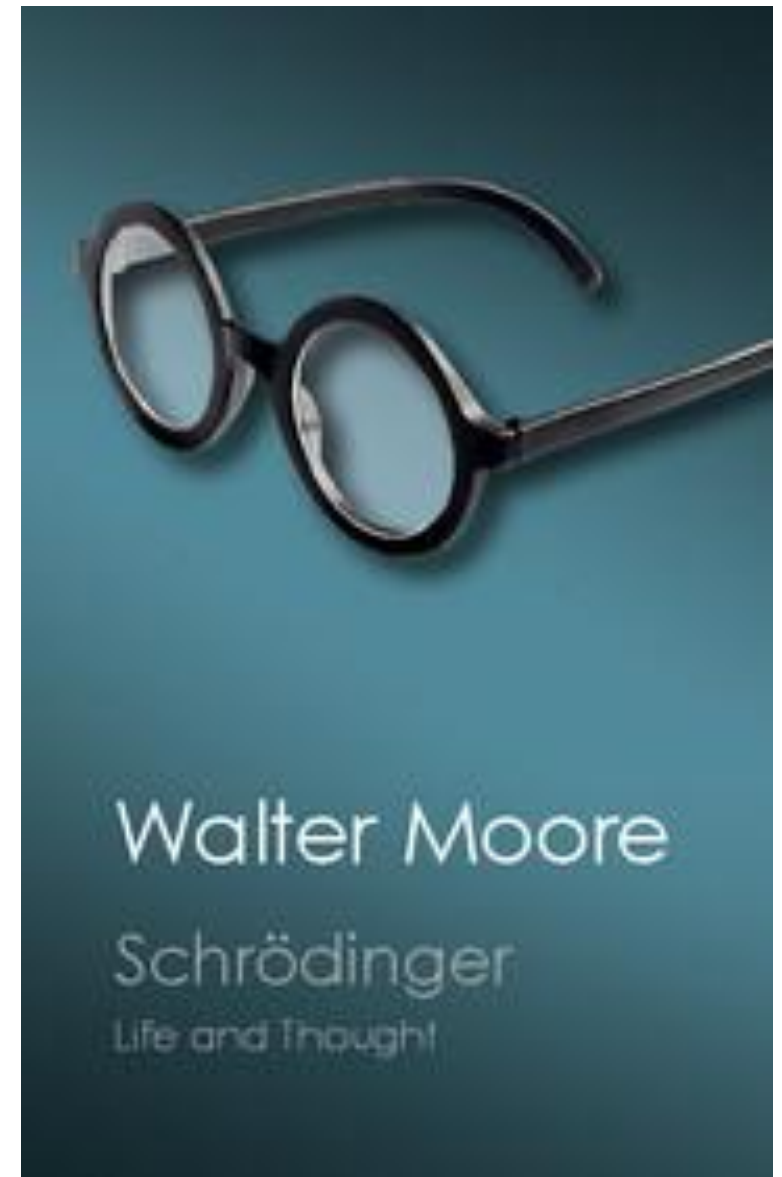


Mooreova kniha je nejrozsáhlejší vědecká biografie **Erwina Schrödingera**.

Na základě bohatého archivního materiálu, korespondence a osobních vzpomínek podává podrobný obraz jeho života i vědecké práce.

Zvláštní pozornost věnuje vzniku vlnové mechaniky v roce 1926 a intelektuálnímu prostředí, v němž se zrodila Schrödingerova rovnice.

Kniha zároveň ukazuje Schrödingera nejen jako fyzika, ale také jako myslitele se silnými filozofickými zájmy a výraznou intelektuální osobnost evropské vědy první poloviny 20. století.



Nová publikace, 2024...

Beletristický styl ... pěkně se čte,
zajímavé, i když jsou zde
nepřesnosti

Zařazeny jsou i události
společenské, politické, kulturní ...

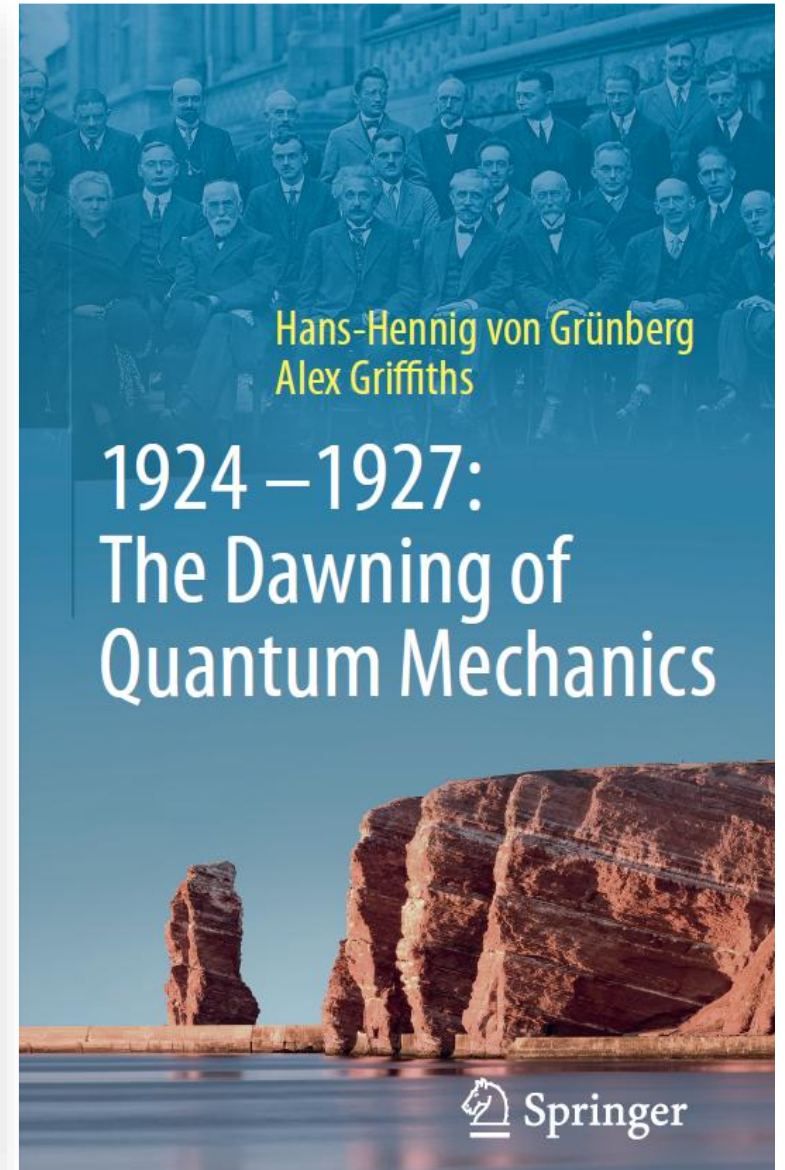
1925, Thesis: Matrix Mechanics 89

suggested that one should have a wave equation; Well, I found one." Unfortunately, the wave equation was not yet correct. For this, he would have to go on a skiing vacation to Arosa.

December 1925, Arosa

There in Arosa he sat at the turn of the year and pondered and tinkered and pondered some more and finally built his equation. Crafting or building—you can't call it anything else. The Schrödinger equation is a differential eq. A differential equation is a very special equation. You can solve a normal equation for the unknown and then get a number. But if you don't just want to relate numbers to one another, but rather whole functions, then you invoke a differential equation. The solution to a differential equation is not a number, but rather a whole function. Schrödinger now wants to deduce a solution in reverse, from known functions to the differential equation that is still unknown to him and the world, i.e., ultimately to construct it. To do this, he takes the electromagnetic prototype of a wave equation, which he specifically modifies so that the law of conservation of energy of a non-relativistic electron, the Planck relationship between energy and frequency, and the de Broglie relationship between momentum and wavelength can be accommodated in this equation. In the end, he has a wave equation that has de Broglie's matter waves as solutions.

Incidentally, he was not alone in Arosa, but with an "old girlfriend" from Vienna, while his wife stayed at home. Nobody knows who this friend was. Schrödinger's biographer explains very laboriously which of Schrödinger's many friends it certainly wasn't, only to then state:



Články ke 100. výročí narození E. Schrödingera

Československý časopis pro fyziku **37** (1987)

M. Brdička: **Panoramatický pohled na život a dílo Erwina Schrödingera**, pp. 470-484.

J. Komrska: **Erwin Schrödinger a jeho rovnice**, pp. 484-501.

J. Kvasnica: **Zrození Schrödingerovy rovnice**, pp. 501-504.

Pokroky matematiky, fyziky a astronomie **32** (1987)

R. Zajac, T. Obert: **Sto rokov od narodenia Erwina Schrödingera**, pp.177-190 a 241-251.

American Journal of Physics

P. A. Hanle (1979). **The Schrödinger-Einstein correspondence and the sources of wave mechanics**, **47**, pp. 644–648.

H. Kragh (1984). **Equation with the many fathers. The Klein–Gordon equation in 1926**, **52**, pp. 1024–1033.

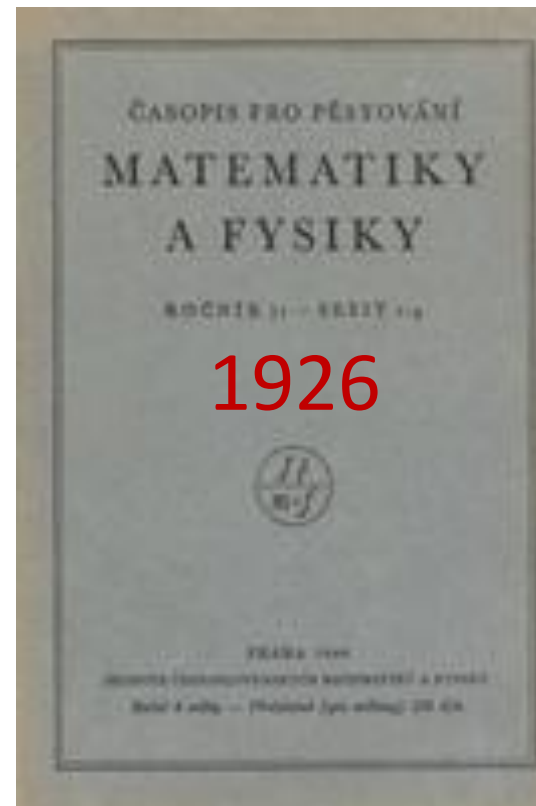
R. Karam (2020). **Schrödinger's original struggles with a complex wave function**, **88**, pp. 433–438.

N. Lima; R. Karam (2021). **Particle velocity = group velocity: A common assumption in the different theories of Louis de Broglie and Erwin Schrödinger**, **89**, pp. 521–528.

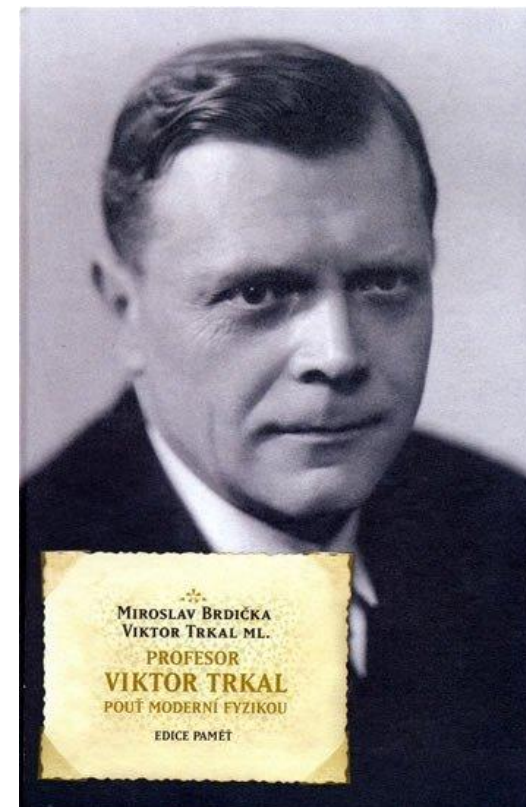
Zprávy, ve 4. čísle, s. 424

K těmto pracím o nové kvantové mechanice druží se po bok důležitá práce jiného směru, kterou uveřejnil *E. Schrödinger* (Zürich) pod názvem »Quantisierung als Eigenwertproblem«, I. Mitteilung (27. 1. 1926), Ann. d. Phys. 79, 361—376, 1926, II. Mitteilung (23. 2. 1926), Ann. d. Phys. 79, 490—527, 1926.

V 1. části autor ukazuje na příkladě atomu vodíku, že dosud obvyklý kvantový předpis (v *Bohr-Sommerteldově* teorii) dá se nahraditi jiným, v němž se nezavádějí uměle celá čísla. Ta se tu objevují způsobem tak přirozeným, jako na př. vychází v teorii struny celistvost čísla udávajícího počet uzlů kmitající struny. Ve 2. části metodu tu autor zobecňuje a podává další příklady (*Planckův* oscilátor, rotátor kolem osy v prostoru pevné, tuhý rotátor s volnou osou, dvouatomová molekula). Cíl obou metod: *Heisenberg-Born-Jordan-Diracovy* a *Schrödingerovy* jest tentýž, avšak metody jsou tak rozdílné, že se dosud nepodařilo najíti spojovací článek v řetězu obou teorií. Jest však velmi pravděpodobné, že obě tyto teorie se nebudou vzájemně potírat, nýbrž spíše doplňovati; tam, kde se lhává jedna, pomáhá druhá. To však rozhodnouti může teprve budoucnost.



1926



MIROSLAV BRDIČKA
VIKTOR TRKAL ML.

PROFESOR
VIKTOR TRKAL
POUŤ MODERNÍ FYZIKOU
EDICE PAMĚT

SCHRÖDINGEROVA ROVNICE U NÁS (1926)

ZPRÁVY.

v 1. čísle, s. 53

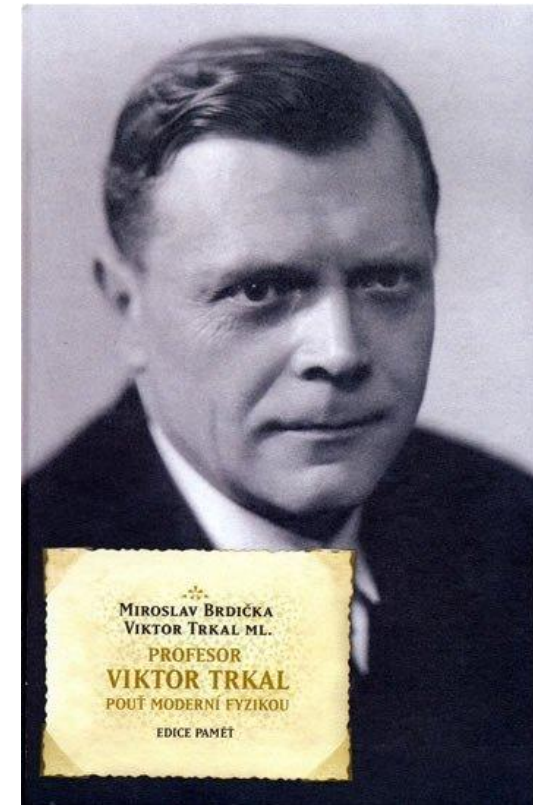
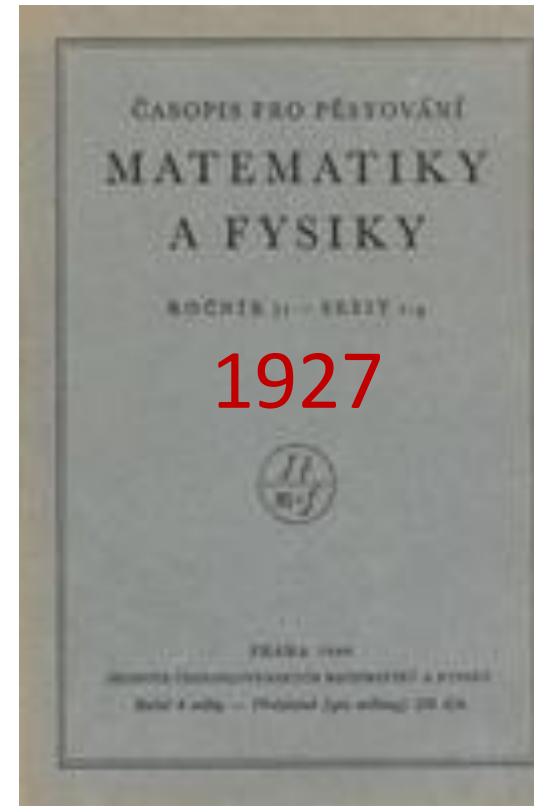
Nová epocha v teorii kvant. — Od posledního přehledu¹⁾ časopisecké literatury o nové kvantové teorii učiněny další důležité pokroky v této nové teorii. Ke konci minulého přehledu vyslovena byla naděje, že teorie Schrödingera a Heisenberg-Born-Jordan-Diracova si nebudou odporovati. Tato domněnka se plně ~~potvrdila~~ potvrdila, ba dokonce podařilo se samotnému Schrödingerovi ukázati, že se stanoviska formálně matematického jsou obě teorie identické; důkaz tohoto faktu jest obsažen v práci:

E. Schrödinger (Zürich) »Über das Verhältnis der Heisenberg-Born-Jordanschen Quantenmechanik zu der meinen« (18. 2. 1926), Ann. d. Phys. 79, 734—756, 1926. — Jest opravdu na podiv, že obě teorie na pohled tak rozdílné jsou formálně identické; vždyť východisko, představy, metoda a celý matematický aparát se zdají zcela odlišné. U Heisenberga klasické spojitě proměnné jsou nahrazeny maticemi, t. j. systémy nespojitých veličin, které závisejí na dvou celých číslech (jakožto indexech) a jsou určeny systémem nekonečně mnoha algebraických rovnic; je to pravá teorie »diskontinuítní«. Naproti tomu Schrödingera »undulační« čili »fysikální« mechanika se vyznačuje přechodem od klasické mechaniky ke »kontinuítní« teorii. Souhrn pohybových rovnic klasické mechaniky (jichž jest v problémech kvantové teorie konečný počet) a kvantových podmínek Schrödinger nahrazuje jedinou parciální rovnicí diferenciální, která plyne jako důsledek z jistého »účinnostního principu«. Popudem k teorii Schrödingera posloužila duchaplná doktorská disertace *L. de Broglie*, Ann. de Physique (10), 3, 22, 1925 (Thèses, Paris 1924) a krátké sice poznámky *A. Einsteinovy* v Berl. Ber., 1925, p. 9, za to však velmi důležité. Genetické souvislosti s teorií Heisenbergovou si Schrödinger nebyl původně vědom, třeba že práci Heisenbergovu znal; odstrašovaly jej totiž s počátku metody transcendentní algebry, jež se mu zdály příliš obtížné a kromě toho nedostatek názornosti teorie Heisenbergovy.

V dalších pracích:

E. Schrödinger (Zürich) »Quantisierung als Eigenwertproblem« III. Mitteilung (10. 5. 1926), Ann. d. Phys. 80, 437—490 (1926), IV. Mitteilung (21. 6. 1926), Ann. d. Phys. 81, 110—139 (1926), rozšiřuje autor svoji teorii na ty problémy, které v dosavadní teorii se nedaly řešiti »direktně«, nýbrž pomocí t. zv. teorie perturbací. Dále

¹⁾ Viz Časopis pro pěst. mat. a fys. 55, 423—424 (1926). — Srovn. též předcházející přehled v témž ročníku »Časopisu« na str. 207.



SCHRÖDINGEROVA ROVNICE U NÁS (1928)

Poznámky k Schrödingerově vlnové mechanice.

V. Trkal.

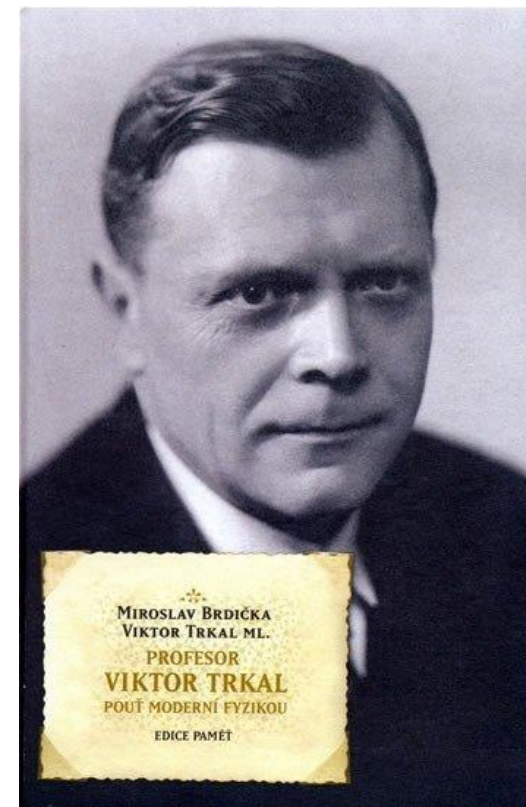
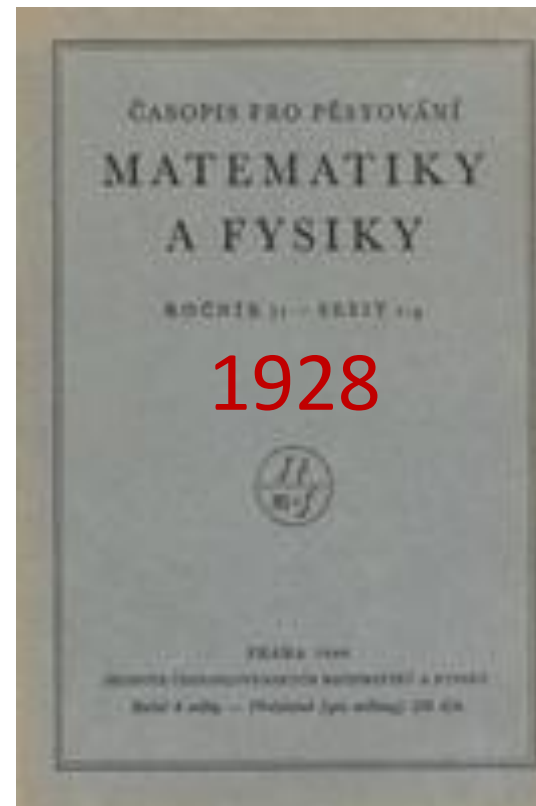
1. Kvantová a vlnová mechanika. — Zkušenost učí, že při fyzikálních pochodech, odehrávajících se ve velmi malých prostorech, hraje rozhodující úlohu typická diskontinuita, element obyčejné fyzice velmi cizí. A tak naproti obvyklé představě, kterou si v prostorově časovém nazírání činíme, že totiž prostor a hmota jsou spojitě a že se dají libovolně dělit, vznikla představa o složení hmoty z nepatrných částic, korpuskulí. Snaha popsat jejich mechanism pomocí obyčejné, t. zv. klasické mechaniky, nevedla k cíli — bylo nutno zavést dodatečné podmínky, t. zv. podmínky kvantové, aby se docílilo souhlasu teorie se zkušeností. Značné vady, ba nepřipustnost tohoto postupu, pocítovaly 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 být použito pro pochody mikroskopické. Avšak zato ukázalo se nemožností oněm korpuskulám přisoudit 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 fyzikální základy spočívají na »vlnové teorii« de Broglieově. Vlnová mechanika Schrödingerova dovoluje však učiniti si přec jen trochu názornější představy fyzikálního dění ve velmi malých prostorech než teorie Heisenbergova, třebaže dosud fyzice chybí pro názornou interpretaci onoho diskontinuálního 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 př. mat. a fys.« 55, 207, 423—424, 1926; 56, 53—56, 1927, a přehled pod tímž názvem v prvním 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.



K interpretaci vlnové mechaniky.

V. Trkal.

1. Před nedávnem použil L. de Broglie¹⁾ poprvé dávno známé analogie mezi klasickou mechanikou a geometrickou optikou k popisu kvantových zjevů. Tato analogie dá se nejvýstižněji vyjádřit 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

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

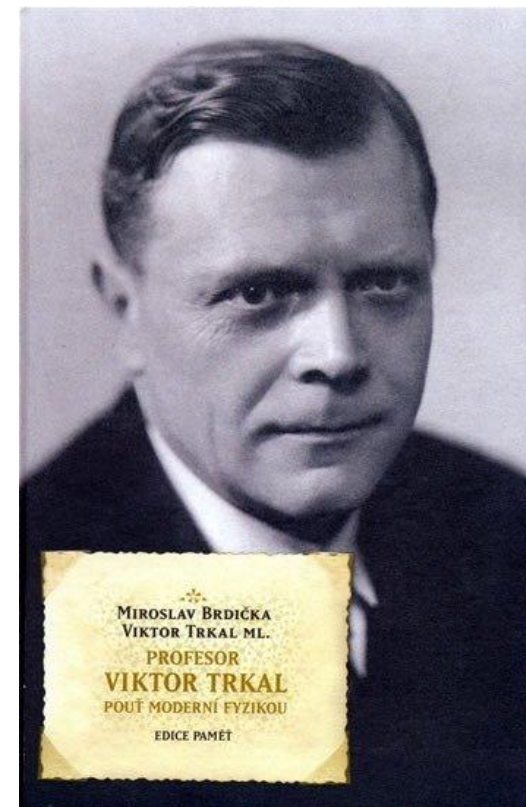
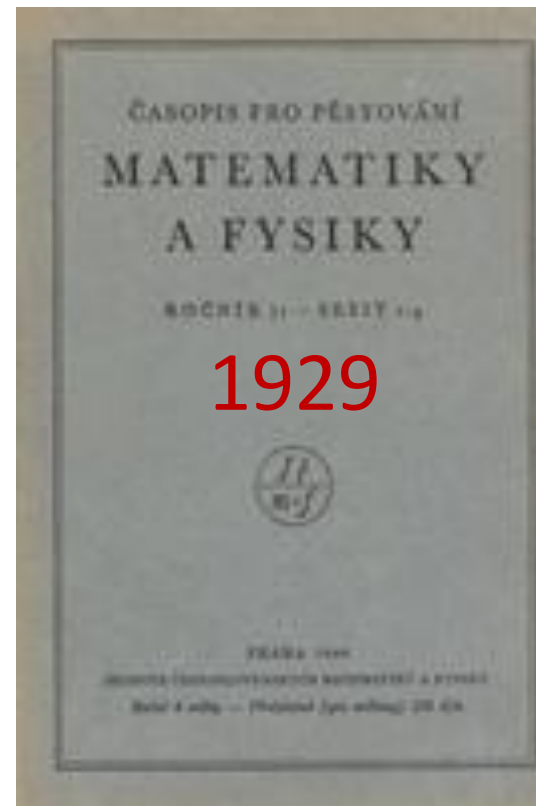
kde h jest konstanta, jejíž rozměr jest dimense součinu energie a času.

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

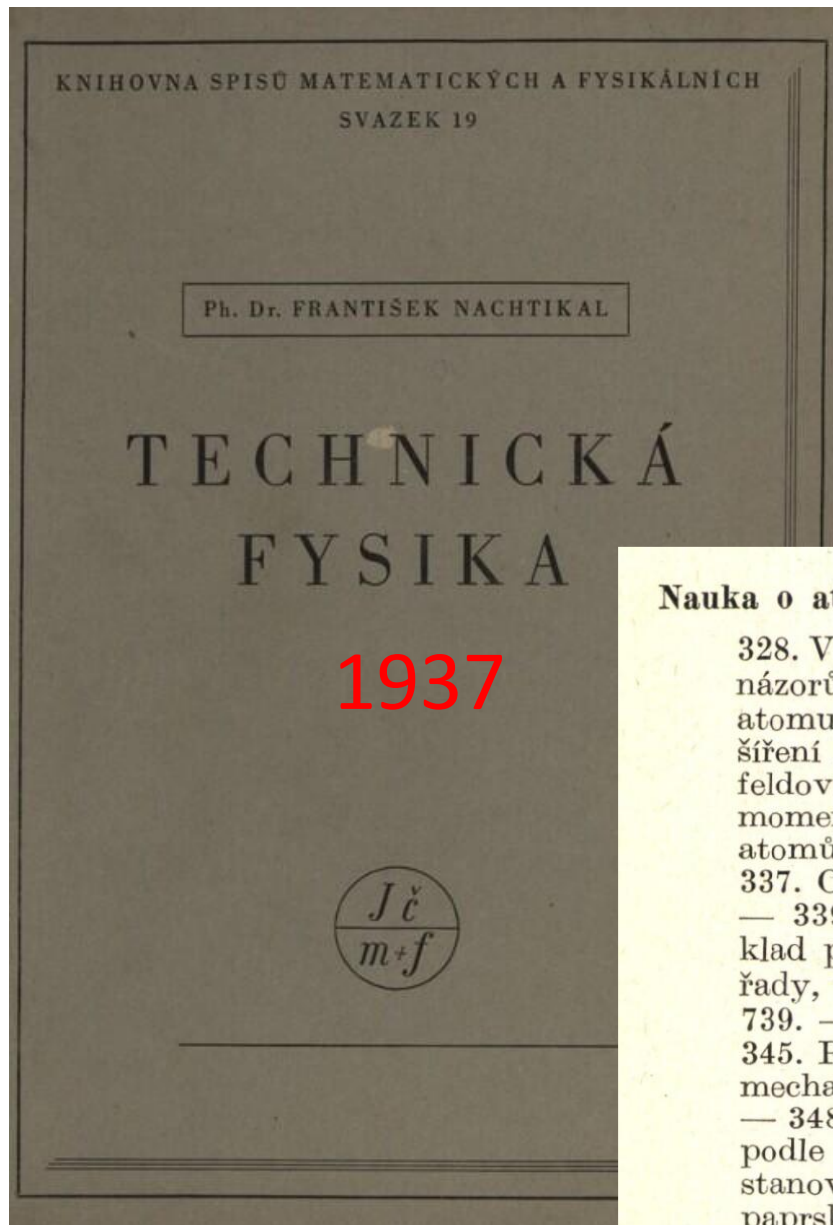
Opticky nehomogenní těleso je charakterisováno tím, že index lomu N se mění od místa k místu určitým způsobem. Dispergující nehomogenní těleso se vyznačuje tím, že index lomu N závisí též na frekvenci ω . V isotropickém nehomogenním dispergujícím tělese jest index lomu N v určitém bodě a pro určitou 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.



SCHRÖDINGEROVA ROVNICE U NÁS (VE VŠ UČEBNICI)



Nauka o atomech (atomistika) 685—759

328. Vznik a význam kvantové domněnky, 685. — 329. Vývoj názorů o atomech, 690. — 330. Bohrov model vodíkového atomu, 691. — 331. Vodíkové spektrum, 693. — 332. Rozšíření Bohrovy teorie na pohyb jádra, 696. — 333. Sommerfeldova teorie eliptických drah, 700. — 334. Magnetický moment dráhy elektronu, 706. — 335. Modely složitějších atomů, 709. — 336. Chemické vlastnosti atomů, 712. — 337. Optická spektra, 715. — 338. Röntgenová spektra, 721. — 339. Zákonitosti röntgenových spekter, 723. — 340. Výklad periodické soustavy prvků, 727. — 341. Radioaktivní řady, 731. — 342. Isotopie, 734. — 343. Neutron a positron, 739. — 344. Rozbíjení jader a umělá radioaktivita, 741. — 345. Pomocné věty matematické, 744. — 346. Vznik vlnové mechaniky, 746. — 347. Schrödingerova vlnová rovnice, 750. — 348. Heisenbergův princip neurčitosti, 752. — 349. Pohyb podle vlnové mechaniky, 753. — 350. Bohrovy postuláty se stanoviska vlnové mechaniky, 755. — 351. Ohyb katodových paprsků na prostorové mřížce, 757. — 352. Závěr, 758.





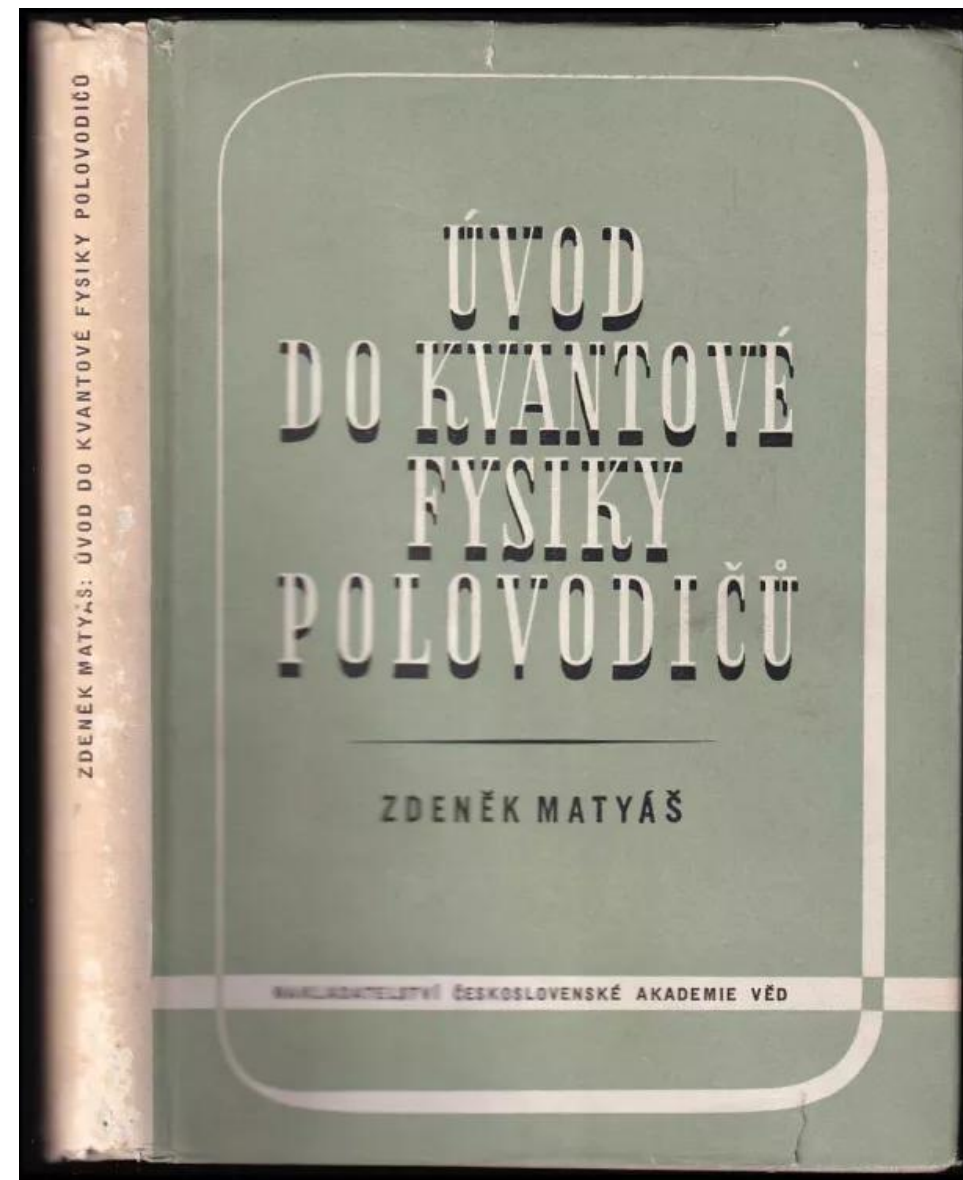
PRVNÍ MONOGRAFIE, V JEJÍMŽ NÁZVU JE SLOVO KVANTOVÁ, U NÁS (1954)



Zdeněk Matyáš, UK (1914-1957)

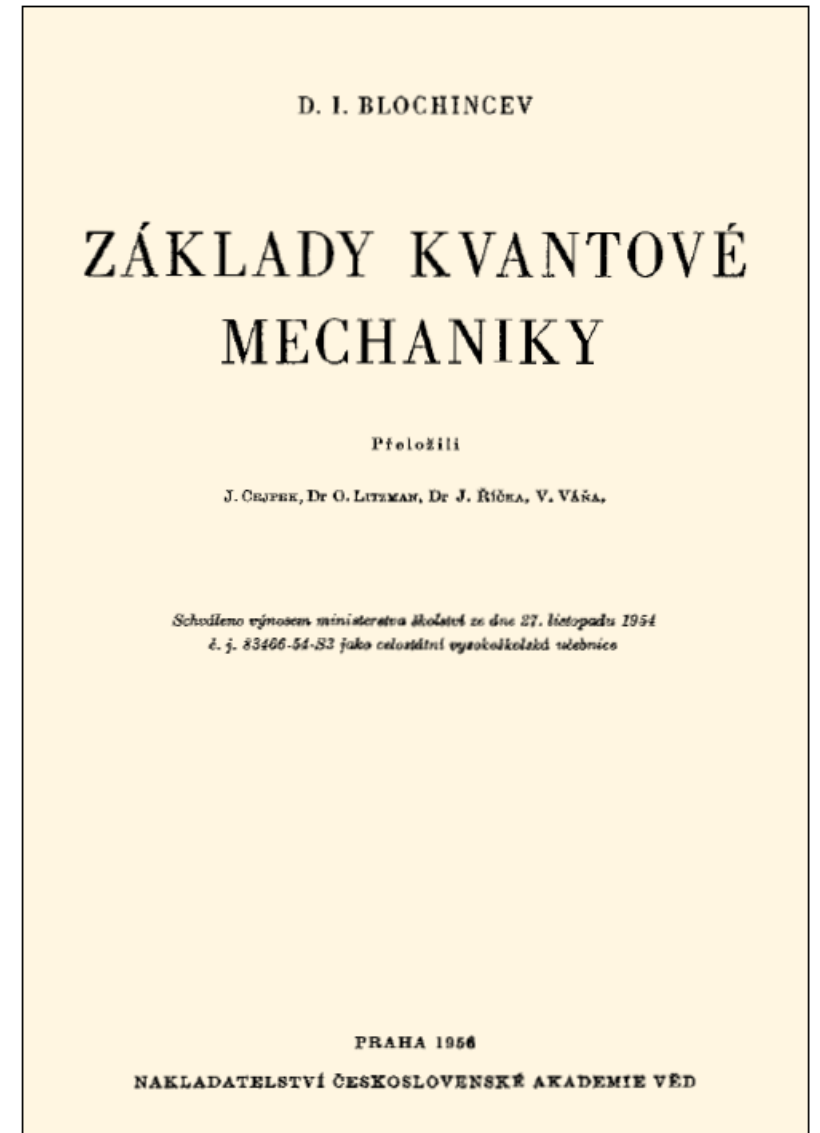
Zakladatel moderní fyziky pevných látek u nás

1946-47 působil v Bristolu u prof. Motta



PRVNÍ UČEBNICE KVANTOVÉ MECHANIKY U NÁS (1956)

V Brně začal vyučovat kvantovou mechaniku prof. O. Litzman až v polovině 50. let (přitom vznikal překlad Blochincevovy knihy).



Po posledním článku **Schrödingerovy** tetralogie vyšel dne 9. 7. 1926 v časopise *Naturwissenschaften* krátký článek, v němž **konstruuje vlnový balík z vlastních funkcí harmonického oscilátoru.**

28 (1926), pp. 664-666

Der stetige Übergang von der Mikro- zur Makromechanik.

Von E. SCHRÖDINGER, Zürich.

Auf Ideen DE BROGLIES¹⁾ und EINSTEINS²⁾ fußend, hab ich zu zeigen versucht³⁾, daß die gewöhnlichen Differentialgleichungen der Mechanik, welche die Koordinaten des mechanischen Systems als Funktionen der Zeit bestimmen wollen, für „kleine“ Systeme nicht mehr zuständig sind; an ihre Stelle hat eine gewisse *partielle* Differentialgleichung zu treten, welche ein Variable ψ („Wellenfunktion“) als Funktion der Koordinaten und der Zeit bestimmt. Ähnlich wie bei der Differentialgleichung der schwingenden Saite oder irgendeines anderen schwingenden Systems ergibt sich ψ als Superposition von zeitlich reinharmonischen (d. i. „sinusförmigen“) Schwingungen, deren Frequenzen mit den spektroskopischen „Termfrequenzen“ des mikromechanischen Systems genau übereinstimmen. Z. B. für den linearen PLANCKschen Oszillator⁴⁾ mit der Energiefunktion

¹⁾ L. DE BROGLIE, Ann. de phys. (10) 3, 22. 1925 (Thèses, Paris 1924).

²⁾ A. EINSTEIN, Berlin. Ber. 1925, S. 9ff.

³⁾ Ann. d. Physik 79, 361, 489, 734. 1926; weitere Mitteilungen im Druck.

⁴⁾ d. i. ein Massenpunkt von der Masse m , der, auf

$$\frac{m}{2} \left(\frac{dq}{dt} \right)^2 + 2\pi^2 \nu_0^2 m q^2 \quad (1)$$

ergibt sich, wenn man statt der Elongation q die dimensionslose Variable

$$x = q \cdot 2\pi \sqrt{\frac{m\nu_0}{h}} \quad (2)$$

einführt, die Wellenfunktion ψ als Superposition der folgenden Eigenschwingungen¹⁾,

$$\left. \begin{aligned} \psi_n &= e^{-\frac{x^2}{2}} H_n(x) e^{2\pi i \nu_n t} \\ \left(\nu_n &= \frac{2n+1}{2} \nu_0; n = 0, 1, 2, 3 \dots \right) \end{aligned} \right\} \quad (3)$$

Die H_n sind die nach HERMITE benannten

einer Geraden beweglich, gegen einen festen Punkt derselben gezogen wird mit einer Kraft, die seiner Elongation q von diesem Punkt proportional ist; nach der gewöhnlichen Mechanik führt ein solcher Massenpunkt Sinusschwingungen von der Frequenz ν_0 aus.

¹⁾ i bedeutet $\sqrt{-1}$. Rechts ist, wie üblich, der Realteil zu nehmen.

Schrödinger konstruuje gaussovský vlnový balík, který se nerozplývá, a uvádí

„že skupina vlastních kmitů s vysokým kvantovým číslem n a relativně malými rozdíly kvantových čísel je schopna představovat „hmotný bod“, který vykonává „pohyb“ očekávaný podle klasické mechaniky (...).“

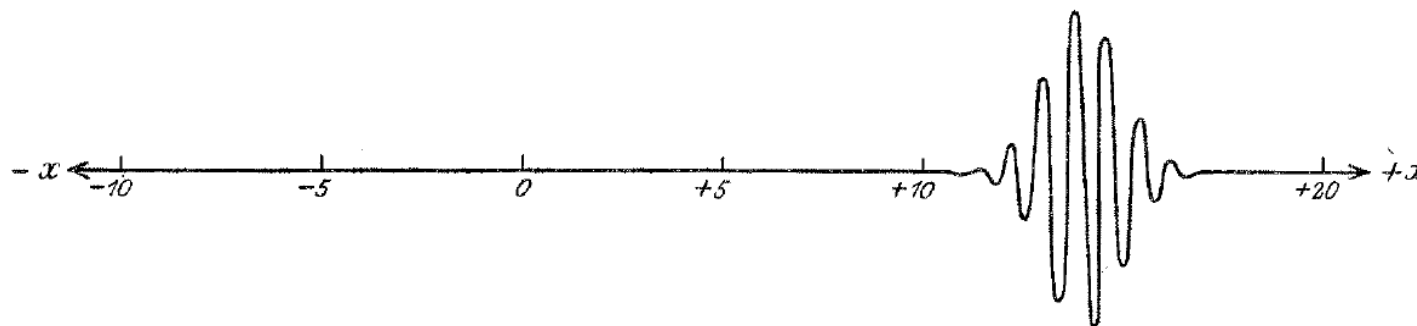
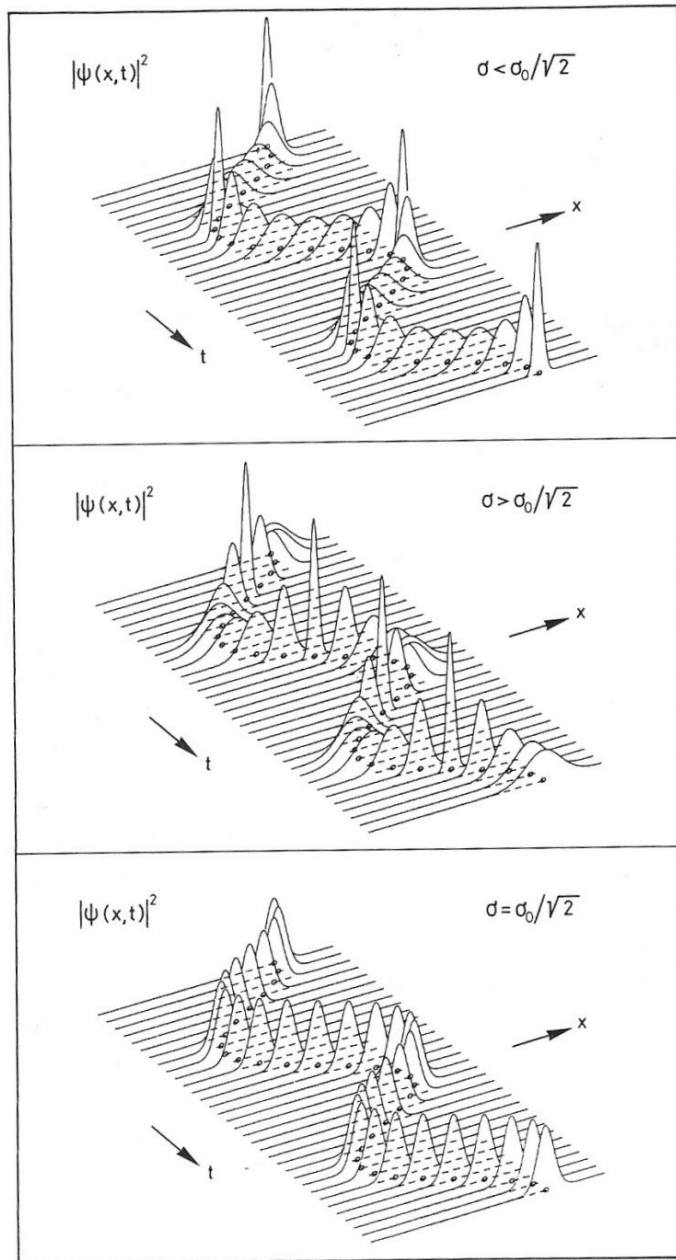
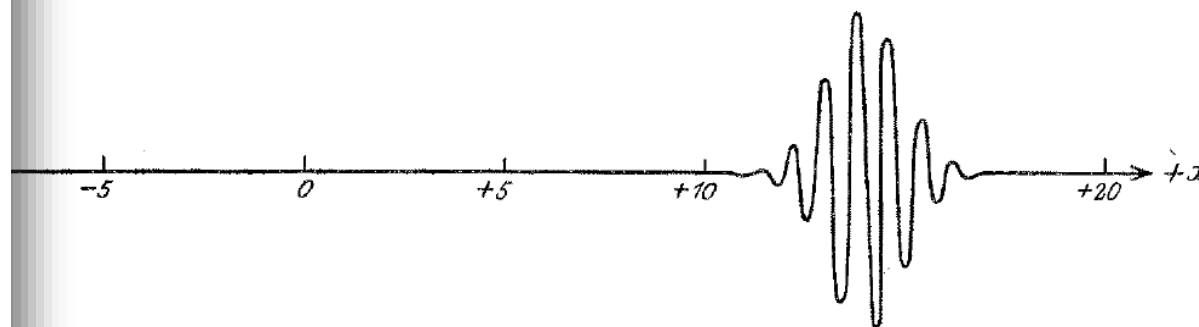


Fig. 2. Pendelnde Wellengruppe als undulationsmechanisches Bild des Massenpunktes.

VLNOVÉ BALÍKY



e gaussovský vlnový balík, který se nerozplývá, a uvádí kmitů s vysokým kvantovým číslem n a relativně malými sel je schopna představovat „hmotný bod“, který kávaný podle klasické mechaniky (...).“



Pendelnde Wellengruppe als undulationsmechanisches Bild des Massenpunktes.

S. Brandt, H. D. Dahmen: *The Picture Book of Quantum Mechanics*. J. Wiley, 1985.

Schrödinger konstruuje gaussovský vlnový balík, který se nerozplývá, a uvádí

„že skupina vlastních kmitů s vysokým kvantovým číslem n a relativně malými rozdíly kvantových čísel je schopna představovat „hmotný bod“, který vykonává „pohyb“ očekávaný podle klasické mechaniky (...).“

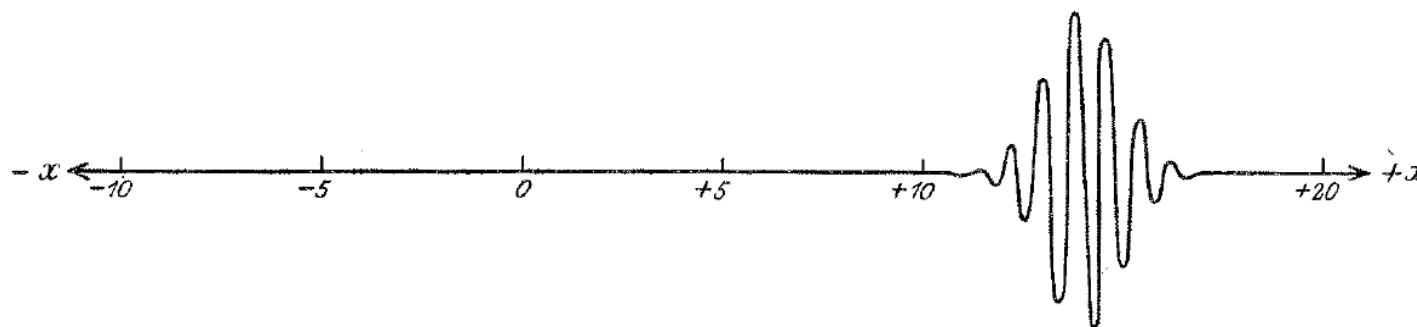


Fig. 2. Pendelnde Wellengruppe als undulationsmechanisches Bild des Massenpunktes.

Tuto jednoduchou úvahu uzavírá poněkud překvapující poznámkou: „Lze s jistotou předvídat, že zcela obdobným způsobem bude možné konstruovat i vlnové balíky, které obíhají po Keplerových elipsách s vysokými kvantovými čísly a představují vlnově mechanický obraz elektronu v atomu vodíku; pouze jsou zde výpočetní obtíže větší než v tomto zde probíraném (...) příkladu.“

S tímto názorem však nebyli všichni spokojeni. **H. A. Lorenz** **Schrödingera** okamžitě upozornil v dopise na jeho omyl:

„Pokud se rozhodneme elektron takříkajíc zcela rozložit a nahradit jej vlnovým systémem, má to jednu nevýhodu (...) – to, co předpokládáme o elektronu vodíkového atomu, musíme pravděpodobně předpokládat i o všech elektronech ve všech atomech; všechny je musíme nahradit vlnovými systémy. Jak však potom pochopíme jevy, jako je fotoelektrický jev či uvolňování elektronů z rozehřátých kovů? Zde se částice objevují pěkné a neporušené; jak se mohly po rozložení opět zformovat?“

Následoval druhý dopis, který Lorentz (tehdy 73letý) doplňuje 12stránkovým výpočtem, jehož výsledkem bylo, že **Schrödingerova** představa o vlnových balících není pro atomy možná.

Dopisy H. A. Lorenze jsou velmi působivé – žádný jiný kolega se tak detailně nezabýval obtížemi Schrödingerem předkládané interpretace.

XII/19

1.10.1

1933

1933

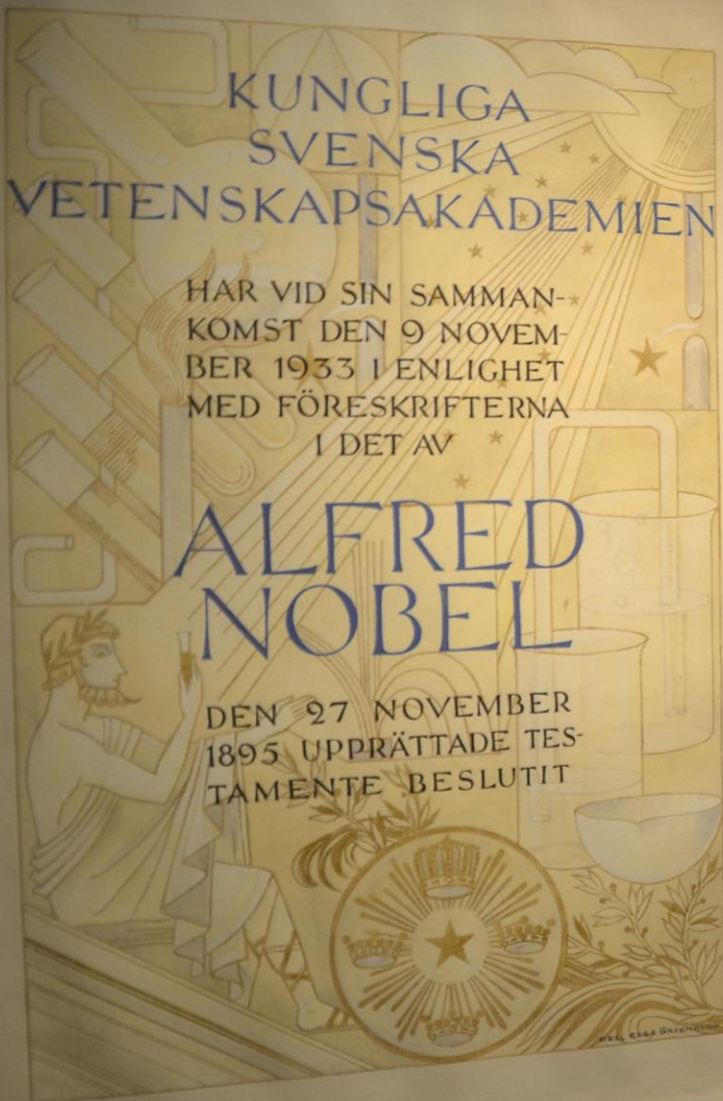
1933-

KUNGLIGA
SVENSKA
VETENSKAPSAKADEMIEN

HAR VID SIN SAMMAN-
KOMST DEN 9 NOVEM-
BER 1933 I ENLIGHET
MED FÖRESKRIFTERNA
I DET AV

ALFRED
NOBEL

DEN 27 NOVEMBER
1895 UPPRÄTTADE TES-
TAMENTE BESLUTIT



ATT TILLDELA HÄLFTEN AV DET PRIS, SOM
DETTA ÅR BORTGIVES ÅT DEN, SOM INOM
FYSIKENS OMRÅDE HAR GJORT DEN VIKTI-
GASTE UPPTÄCKT ELLER UPPFINNING, TILL

ERWIN
SCHRÖDINGER

FÖR UPPTÄCKANDET AV NYA FRUKTBÄRANDE
FORMER AV ATOMTEORIN.

STOCKHOLM DEN 10 DECEMBER 1933.

W. Palmer
KGL. VET. AK. S. PRÄSES.



H. Pleijel
KGL. VET. AK. S. SEKRETERARE

Po posledním článku **Schrödingerovy** tetralogie vyšel dne 9. 7. 1926 v časopise *Naturwissenschaften* krátký článek, v němž **konstruuje vlnový balík z vlastních funkcí harmonického oscilátoru.**

28 (1926), pp. 664-666

Der stetige Übergang von der Mikro- zur Makromechanik.

Von E. SCHRÖDINGER, Zürich.

Auf Ideen DE BROGLIES¹⁾ und EINSTEINS²⁾ fußend, hab ich zu zeigen versucht³⁾, daß die gewöhnlichen Differentialgleichungen der Mechanik, welche die Koordinaten des mechanischen Systems als Funktionen der Zeit bestimmen wollen, für „kleine“ Systeme nicht mehr zuständig sind; an ihre Stelle hat eine gewisse *partielle* Differentialgleichung zu treten, welche ein Variable ψ („Wellenfunktion“) als Funktion der Koordinaten und der Zeit bestimmt. Ähnlich wie bei der Differentialgleichung der schwingenden Saite oder irgendeines anderen schwingenden Systems ergibt sich ψ als Superposition von zeitlich reinharmonischen (d. i. „sinusförmigen“) Schwingungen, deren Frequenzen mit den spektroskopischen „Termfrequenzen“ des mikromechanischen Systems genau übereinstimmen. Z. B. für den linearen PLANCKschen Oszillator⁴⁾ mit der Energiefunktion

¹⁾ L. DE BROGLIE, Ann. de phys. (10) 3, 22. 1925 (Thèses, Paris 1924).

²⁾ A. EINSTEIN, Berlin. Ber. 1925, S. 9ff.

³⁾ Ann. d. Physik 79, 361, 489, 734. 1926; weitere Mitteilungen im Druck.

⁴⁾ d. i. ein Massenpunkt von der Masse m , der, auf

$$\frac{m}{2} \left(\frac{dq}{dt} \right)^2 + 2\pi^2 \nu_0^2 m q^2 \quad (1)$$

ergibt sich, wenn man statt der Elongation q die dimensionslose Variable

$$x = q \cdot 2\pi \sqrt{\frac{m\nu_0}{h}} \quad (2)$$

einführt, die Wellenfunktion ψ als Superposition der folgenden Eigenschwingungen¹⁾,

$$\left. \begin{aligned} \psi_n &= e^{-\frac{x^2}{2}} H_n(x) e^{2\pi i \nu_n t} \\ \left(\nu_n &= \frac{2n+1}{2} \nu_0; n = 0, 1, 2, 3 \dots \right) \end{aligned} \right\} \quad (3)$$

Die H_n sind die nach HERMITE benannten

einer Geraden beweglich, gegen einen festen Punkt derselben gezogen wird mit einer Kraft, die seiner Elongation q von diesem Punkt proportional ist; nach der gewöhnlichen Mechanik führt ein solcher Massenpunkt Sinusschwingungen von der Frequenz ν_0 aus.

¹⁾ i bedeutet $\sqrt{-1}$. Rechts ist, wie üblich, der Realteil zu nehmen.

Schrödinger konstruuje gaussovský vlnový balík, který se nerozplývá, a uvádí

„že skupina vlastních kmitů s vysokým kvantovým číslem n a relativně malými rozdíly kvantových čísel je schopna představovat „hmotný bod“, který vykonává „pohyb“ očekávaný podle klasické mechaniky (...).“

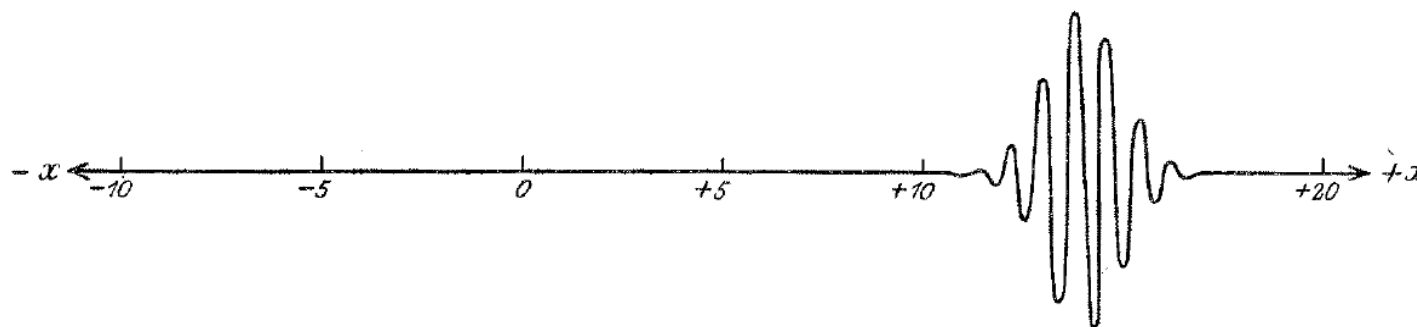
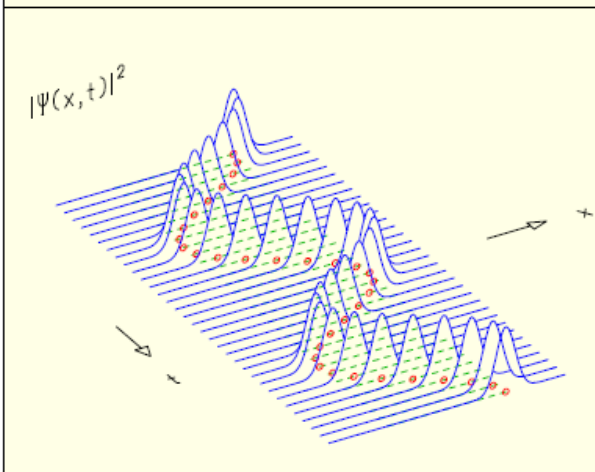
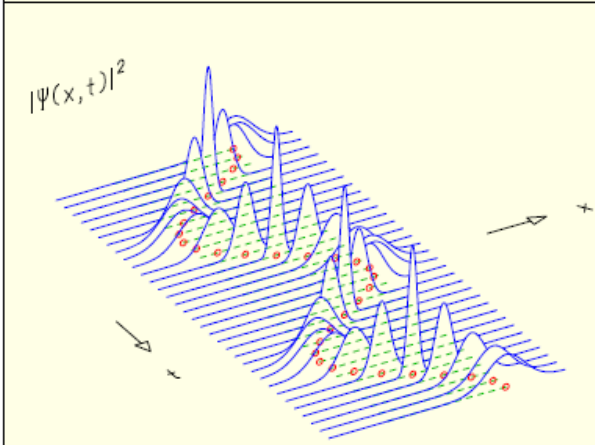
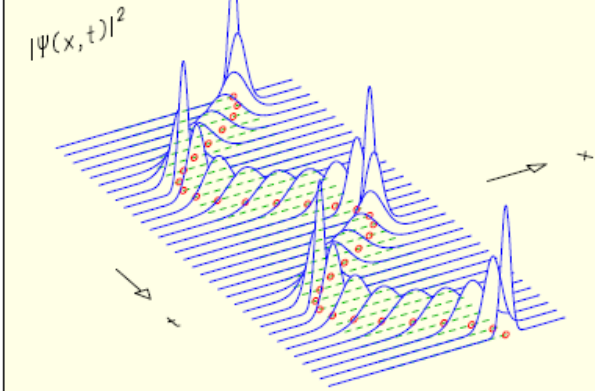


Fig. 2. Pendelnde Wellengruppe als undulationsmechanisches Bild des Massenpunktes.

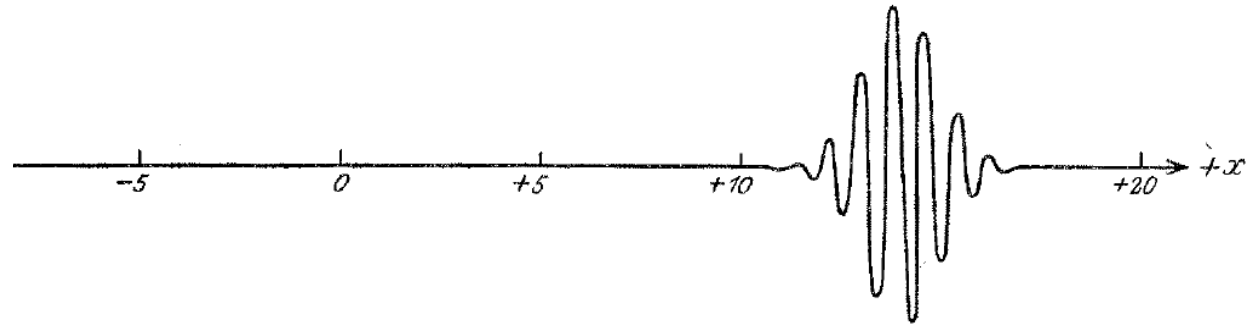
VLNOVÉ BALÍKY

je gaussovský vlnový balík, který se nerozplývá, a uvádí

1 kmitů s vysokým kvantovým číslem n a relativně malými
ísel je schopna představovat „hmotný bod“, který
ekávaný podle klasické mechaniky (...).“



t



2. Pendelnde Wellengruppe als undulationsmechanisches Bild des Massenpunktes.

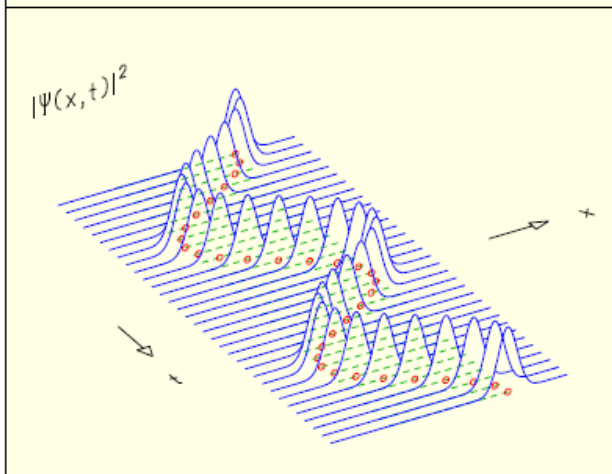
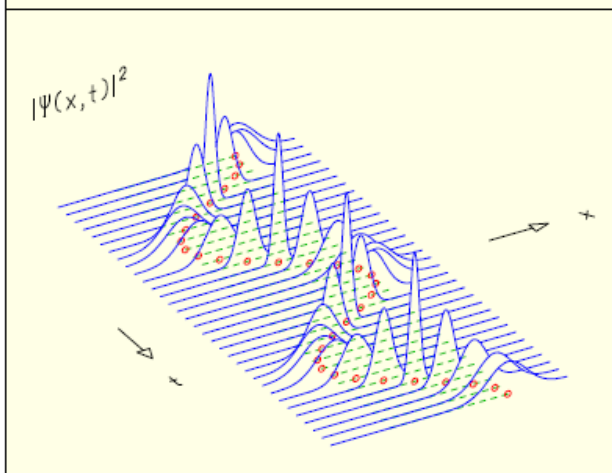
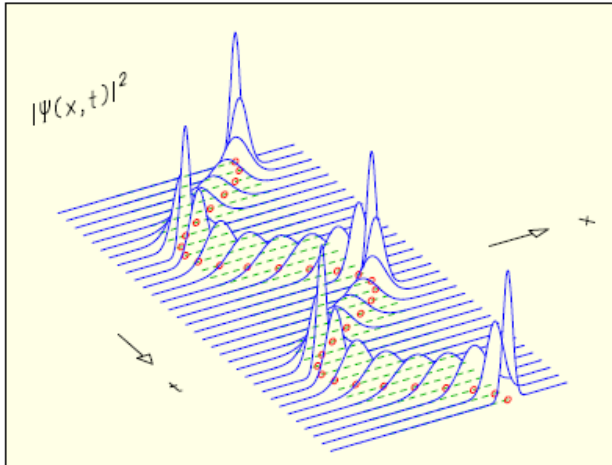
c

S. Brandt, H. D. Dahmen: *The Picture Book of Quantum Mechanics*. (4th ed) J. Wiley, 2012.

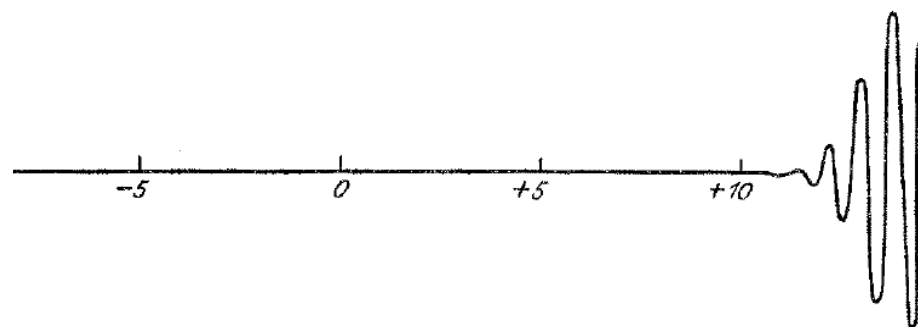
VLNOVÉ BALÍKY

je gaussovský vlnový balík, kte

1 kmitů s vysokým kvantovým
ísel je schopna představovat „h
ekávaný podle klasické mechar



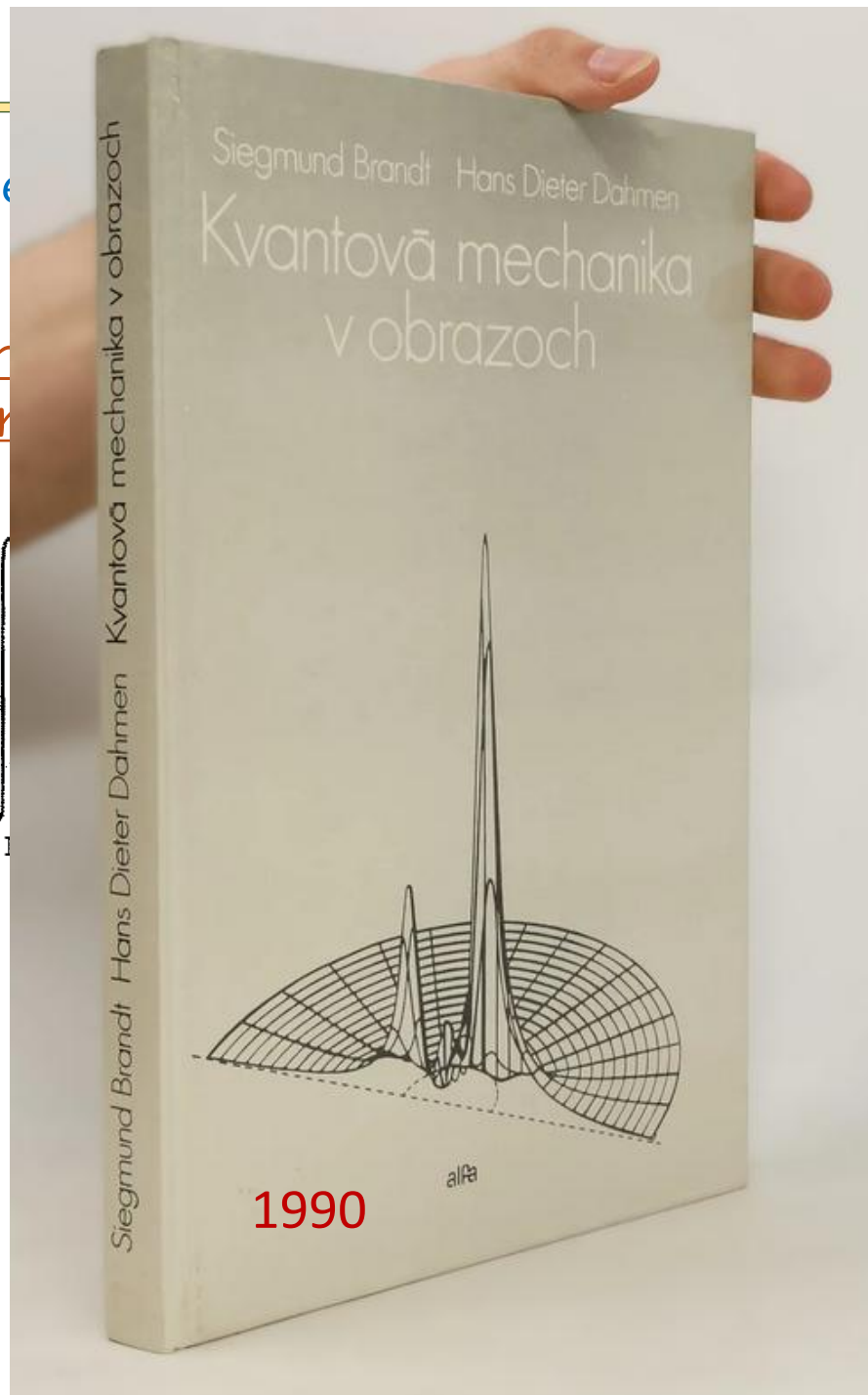
t



2. Pendelnde Wellengruppe als undulationsmechanisches Bild des I

c

S. Brandt, H. D. Dahmen: *The Picture Book of Quantum Mechanics*. (4th ed) J. Wiley, 2012.



Schrödinger konstruuje gaussovský vlnový balík, který se nerozplývá, a uvádí

„že skupina vlastních kmitů s vysokým kvantovým číslem n a relativně malými rozdíly kvantových čísel je schopna představovat „hmotný bod“, který vykonává „pohyb“ očekávaný podle klasické mechaniky (...).“

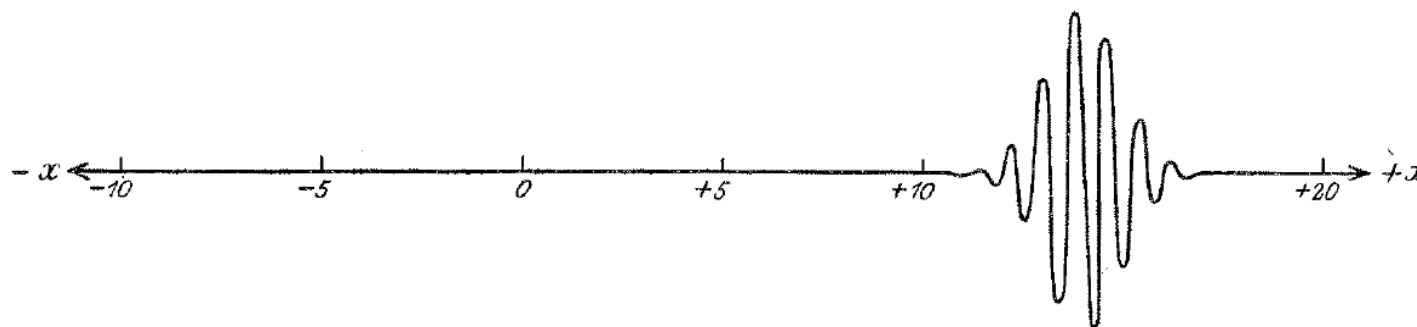


Fig. 2. Pendelnde Wellengruppe als undulationsmechanisches Bild des Massenpunktes.

Tuto jednoduchou úvahu uzavírá poněkud překvapující poznámkou: „Lze s jistotou předvídat, že zcela obdobným způsobem bude možné konstruovat i vlnové balíky, které obíhají po Keplerových elipsách s vysokými kvantovými čísly a představují vlnově mechanický obraz elektronu v atomu vodíku; pouze jsou zde výpočetní obtíže větší než v tomto zde probíraném (...) příkladu.“

S tímto názorem však nebyli všichni spokojeni. **H. A. Lorenz** **Schrödingera** okamžitě upozornil v dopise na jeho omyl:

„Pokud se rozhodneme elektron takříkajíc zcela rozložit a nahradit jej vlnovým systémem, má to jednu nevýhodu (...) – to, co předpokládáme o elektronu vodíkového atomu, musíme pravděpodobně předpokládat i o všech elektronech ve všech atomech; všechny je musíme nahradit vlnovými systémy. Jak však potom pochopíme jevy, jako je fotoelektrický jev či uvolňování elektronů z rozehřátých kovů? Zde se částice objevují pěkné a neporušené; jak se mohly po rozložení opět zformovat?“

Následoval druhý dopis, který Lorentz (tehdy 73letý) doplňuje 12stránkovým výpočtem, jehož výsledkem bylo, že **Schrödingerova** představa o vlnových balících není pro atomy možná.

Dopisy H. A. Lorenze jsou velmi působivé – žádný jiný kolega se tak detailně nezabýval obtížemi Schrödingerem předkládané interpretace.