

Pokroky matematiky, fyziky a astronomie

Rudolf Zajac; Teodor Obert

Sto rokov od narodenia Erwina Schrödingera. I. Schrödinger a jeho cesta ku kvantovej mechanike

Pokroky matematiky, fyziky a astronomie, Vol. 32 (1987), No. 4, 177--190

Persistent URL: <http://dml.cz/dmlcz/139310>

Terms of use:

© Jednota českých matematiků a fyziků, 1987

Institute of Mathematics of the Academy of Sciences of the Czech Republic provides access to digitized documents strictly for personal use. Each copy of any part of this document must contain these *Terms of use*.



This paper has been digitized, optimized for electronic delivery and stamped with digital signature within the project *DML-CZ: The Czech Digital Mathematics Library* <http://project.dml.cz>

Sto rokov od narodenia Erwina Schrödingera

I. Schrödinger a jeho cesta ku kvantovej mechanike

Rudolf Zajac a Teodor Obert, Bratislava

Začiatkom 20. storočia prebehla revolúcia vo fyzike, ktorej historický význam možno porovnať iba s „kopernikovským obratom“ a búrkou, ktorú vyvolal. Príčinou radikálnych zmien vo fyzike na prahu nášho storočia bola kumulácia experimentálnych poznatkov, ktoré sa nedali interpretovať klasicky.

Fyzika už je taká – a to je jej výhoda voči iným disciplinám ľudskej intelektuálnej činnosti –, že nové „čudné“ alebo prinajmenšom neočakávané experimentálne výsledky si vynucujú vznik nových teórií bez ohľadu na osobné postoje ich tvorcov. A skutočne, tvorcami modernej teoretickej fyziky boli jednak osobnosti, ktoré považovali za nevyhnutné prekonať tradičný spôsob myslenia, jednak tí, čo sa usilovali zachrániť klasický fyzikálny obraz sveta.

K druhej skupine patrí Erwin Schrödinger, ktorý sa stal spoluzakladateľom kvantovej mechaniky proti svojej vôli. Známy je jeho výrok: „Ak by sa predsa len malo zotrvať na tých prekliatych kvantových skokoch, potom ľutujem, že som sa kedy zaoberal kvantovou teóriou“ [1]. Citovaný Schrödingerov postoj nemení nič na veci, že jeho meno nesie základná rovnica kvantovej mechaniky a že je preto v modernej fyzike najfrekvencovanejšie.

Fyzik, básnik a filozof

Erwin Schrödinger sa narodil vo Viedni pred sto rokmi, 12. augusta 1887. Jeho otec, Rudolf Schrödinger, zdedil továrničku na voskované plátno, ktorá poskytla rodine slušné materiálne zabezpečenie. Rudolf Schrödinger sa venoval viac biológii ako voskovanému plátnu, bol dlhoročným podpredsedom Zoologicko-botanickej spoločnosti vo Viedni. Ešte predtým navštevoval prednášky profesora chémie Alexandra Bauera, ktorého dcéru si vzal za manželku.

V rodinnom prostredí mal Erwin Schrödinger priaznivé podmienky pre svoj duchovný rast. Do jedenásteho roku sa mu dostalo domáceho vzdelania a v roku 1898 zložil prijímaciu skúšku na Akademické gymnázium vo Viedni, ktoré bolo zamerané predovšetkým na humanitné predmety. Schrödinger bol fundovaný v latinčine a gréčtine, zaujímal sa

o literatúru a filozofiu*), sám písal básne, dokonca aj v neskoršom období, keď už bol ako fyzik preslávený. Popri svojom materinskom jazyku ovládal francúzštinu, angličtinu, taliančinu a španielčinu. Ako gymnazista vynikal vari rovnako vo všetkých predmetoch, rozhodol sa však pre fyziku. Po maturite v roku 1906 sa zapísal na viedenskú univerzitu na štúdium matematiky a fyziky. Bol to rok, v ktorom si 5. septembra dobrovoľne vzal život Ludwig Boltzmann (nar. 1844), po J. C. Maxwellovi (1831 – 1879) vari najvýznamnejšia postava klasickej teoretickej fyziky z konca 19. storočia.

Na viedenskej univerzite naďalej vládol Boltzmannov duch, Erwin Schrödinger sa s ním už ako poslucháč identifikoval a do konca života mu zostal verný. Počas Schrödingerovho štúdia na viedenskej univerzite udávali tón na tejto vysokej škole dvaja Boltzmannovi žiaci a nasledovníci: Friedrich Hasenöhl (1874–1915), ktorý v r. 1907 prevzal vedenie Katedry teoretickej fyziky, a Franz Exner (1849–1926), ktorý od roku 1891 viedol ako profesor experimentálnej fyziky II. fyzikálny ústav. Založil školu, z ktorej vyšli dvaja nositelia Nobelovej ceny, Victor Hess (1883–1964) a Erwin Schrödinger, a ďalší poprední fyzici ako Marian Smoluchowski (1872–1917), Stefan Meyer (1872 až 1949), K. F. W. Kohlrausch (1855–1936), F. Ehrenhaft (1879–1952) a iní. Prvé Schrödingerove práce boli z experimentálnej fyziky a aj svoju doktorskú dizertačnú prácu**), ktorú obhájil v r. 1910, pripravil v Exnerovom laboratóriu pod vedením Egonu Schweidlera (1873–1948).

E. Schrödinger bol 20. mája 1910 promován za doktora filozofie a po ročnej vojenskej službe sa vrátil na Exnerov ústav, kde desať rokov (s prerušením cez prvú svetovú vojnu) pôsobil ako asistent a mal za úlohu viesť praktika.

Schrödinger spomínal na svoju experimentátorskú činnosť vždy iba v dobrom, ale už od druhého ročníka štúdia ho fascinovala predovšetkým teoretická fyzika. Boltzmannov duch ako by v ňom prežíval a do konca svojho života s úctou a obdivom spomínal svojho učiteľa Hasenöhrla. Viac ako všetky komentáre povedia o tom dve citácie zo Schrödingerových ústnych a písomných prejavov, ktoré mal v najvýznamnejších dňoch svojho života.

Vo svojej nástupnej reči na zasadnutí Akadémie vied v Berlíne dňa 4. júla 1929 povedal: „Prostredníctvom starého viedenského ústavu, ktorému bol tesne predtým (t. j. pred Schrödingerovým zápisom na univerzitu, pozn. aut.) vyrvaný Ludwig Boltzmann, prostredníctvom ústavov, v ktorých pôsobili Fritz Hasenöhl a Franz Exner a v ktorých sa pohybovali mnohí ďalší Boltzmannovi žiaci, mohol som bezprostredne vstrebávať idey tohto veľkého ducha. Jeho idey zohrali v mojom živote úlohu mladíckej vedeckej lásky, nik iný ma už tak mocne neupútal, nik to už vari nedokáže. S modernou

*) Cez prvú svetovú vojnu bol delostreleckým dôstojníkom na rakúskom juhozápadnom fronte. Stihol si tam osvojiť všeobecnú teóriu relativity a zaoberal sa filozofiou. Preštudoval Spinozove (1632–1677), Schopenhauerove (1788–1866), Machove (1838–1916), Semonove (1859–1918) a Avenariusove (1843–1896) diela a vážne uvažoval o tom, že sa po vojne bude venovať fyzike a filozofii.

**) SCHRÖDINGER, E.: *Über die Leitung der Elektrizität auf der Oberfläche von Isolatoren an feuchter Luft*. Sitzungsberichte der Kaiserlichen Akademie der Wissenschaften (Wien), Abteilung IIa, 119 (1910) s. 1215–1223.

atómovou teóriou som sa zblížil len veľmi pomaly. Jej vnútorné protirečenia mi zneli ako škripajúce disonancie, ak som ju posudzoval meradlami čistého neúprosne jasného Boltzmannovho myšlienkového postupu“ [2].

Druhú citáciu uvádzame zo Schrödingerovej autobiografie napísanej pri príležitosti prevzatia Nobelovej ceny v Štokholme 12. decembra 1933. V nej uvádza: „Vtedy (v prvej svetovej vojne, pozn. aut.) padol Hasenöhrl a môj cit mi hovorí, že keby sa to nebolo stalo, stálo by dnes namiesto môjho jeho meno.“ [3].

Tieto výroky svedčia o hlbokej úcte, ktorú prechovával Schrödinger voči svojim predchodcom, a o pevnom charaktere, ktorý preukázal aj v osudnom roku 1933. Vysvetľujú aj Schrödingerove postoje v diskusiách s Bohrom, Bornom a inými, o ktorých sa zmienime v pokračovaní nášho článku. V dejinách je len málo významných ľudí, ktorí zostali tak nekompromisne verní koreňom, z ktorých vyrástli, ako Erwin Schrödinger.

Rané práce

E. Schrödinger pozorne sledoval práce, ktoré sa zaoberali Bohrovou-Sommerfeldovou teóriou, ale aktívne sa kvantovej teórii štruktúry atómov venoval len málo. V bibliografii, ktorú zostavil A. M. Frenk [4] zo 44 prác, ktoré Schrödinger uverejnil pred svojou tetralógiou o vlnovej mechanike, len štyri sa zaoberajú kvantovou teóriou.

Prvé Schrödingerove práce boli výlučne experimentálneho charakteru. Ako habilitačnú prácu predložil v r. 1914 svoju už uverejnenú stať Štúdie o kinetike dielektrík, o bode topenia, o pyroelektrine a piezoelektrine.*) V tom istom roku už ako súkromný docent**) ohlásil semestrálnu prednášku o interferencii röntgenových lúčov.

Po vojne pôsobil E. Schrödinger od apríla 1920 ako docent a mimoriadny profesor na univerzite v Jene a v tom istom roku ho vymenovali za mimoriadneho profesora Vysokej školy technickej v Stuttgarte. Zo Stuttgartu odišiel na univerzitu do Vratislavi, aby napokon v lete roku 1921 zakotvil ako riadny profesor teoretickej fyziky na univerzite v Zürichu, kde pred ním pôsobili Albert Einstein (1879–1955) a Max von Laue (1879–1960). V Zürichu nadviazal blízke priateľské kontakty so svojimi kolegami z Konfederálnej vysokej školy technickej (ETH) Petrom Debyeom (1884–1966) a Hermannom Weylom (1889–1955).

Predhistória vlnovej mechaniky

Max Born (1882–1970) vydal v roku 1969 svoju korešpondenciu s Albertom Einsteinom [5]. V súvislosti so vznikom vlnovej a maticovej mechaniky je zaujímavá ich výmena listov v roku 1925.

*) SCHRÖDINGER, E.: *Studien über Kinetik der Dielectrica, den Schmelzpunkt, Pyro- und Piezoelektrizität*. Sitzungsber. Akad. (Wien), Abt. IIa, 119 (1912), s. 1937–1973.

**) Súkromný docent mal právo prednášať na univerzite (venia docendi). Zamestnanecký pomer sa docentúrou nezmenil, Schrödinger zostal Exnerovým asistentom.

Einstein písal Bornovi o tom, akým dojmom naň zapôsobila dizertačná práca Louisa de Broglieho, ktorý prišiel na myšlienku priradiť elektrónu vlnu a využiť vlnové vlastnosti častíc na odôvodnenie Bohrovho modelu atómu.

Born zase upozornil Einsteina na to, že podpísal na uverejnenie do tlače prácu svojho mladého asistenta (mal na mysli Wernera Heisenberga), ktorú považuje za významnú pre ďalší vývin kvantovej teórie. O de Broglieho práci sa Born nezmieňuje. Zrejme naň mimoriadne nezapôsobila, de Broglieho si v tom čase v Göttingene zvlášť necenili pre nejaké nedopatrenia v statiach, ktoré predtým uverejnil [6]. M. Born spolu s Pascualom Jordanom (nar. 1902) nadviazali na Heisenbergovu stať*) a vypracovali matematický aparát maticovej mechaniky.**)

Naproti tomu Einstein mal výhrady voči Heisenbergovej práci, najmä voči princípu pozorovateľnosti, a spočiatku jej nevenoval pozornosť. Výmenou listov z roku 1925 Albert Einstein a Max Born – títo nerozluční priatelia – akoby začali kopať tunel, každý z inej strany, pričom sa nikdy nestretli. (Toto prirovnanie sa týka kvantovej mechaniky, nie ich osobných vzťahov.)

A. Einstein sa dozvedel o de Broglieho***) práci od Paula Langevina (1872–1946). Langevin bol členom rigorózneho komisie, pred ktorou Louis de Broglie (nar. 1892) 25. novembra 1924 obhájil svoju dizertačnú prácu. V tom čase odporúčal Einstein na uverejnenie stať S. N. Boseho (1894–1974), nazvanú Planckov zákon a hypotéza svetelných kvánt,****) a ohlásil uverejnenie svojich vlastných príspevkov k problematike kvantovej štatistiky. Einstein predniesol na zasadnutiach Akadémie vied v Berlíne dva referáty s názvom Kvantová teória jednoatómového ideálneho plynu [7]. V druhom referáte 8. januára 1925 podrobne opísal de Broglieho myšlienky a navrhol preveriť jeho teóriu demonštráciou interferenčných javov jednoatómových ideálnych plynov pri nízkych teplotách.*****)

Erwin Schrödinger pozorne sledoval práce – pochopiteľne najmä Einsteinove – týkajúce sa štatistickej fyziky, a tak sa dozvedel z Einsteinových referátov o vzniku Boseho-Einsteinovej štatistiky a súčasne o de Broglieho hypotéze. Už v roku 1925 sa pustil do práce a usiloval sa aplikovať de Broglieho myšlienky na elektrón viazaný v atóme. Pomocou relativistických úvah dospel k rovnici, nazvanej neskoršie Kleinovou-Gordonovou rovnicou pre bezspinovú časticu.*****) Pochopiteľne, pre elektrón, ktorý má spin $\hbar/2$, výsledky, ku ktorým dospel, nesúhlasili s experimentálnymi údajmi. Schrödinger potom po polročnej pauze vypracoval vlnovú mechaniku v nerelativistickom priblížení. Jej výsledky sú doteraz platné.

*) HEISENBERG, W.: *Über quantentheoretische Umdeutung kinematischer und mechanischer Beziehungen*. Zeitschrift für Physik 33 (1925) s. 879

***) BORN, M., JORDAN, P.: *Zur Quantenmechanik*. Zeitschrift für Physik, 34 (1925) s. 858

****) BROGLIE, L. DE.: *Recherche sur la théorie des quanta, thèse de doctorat soutenue à Paris le 25 novembre 1924*. Annales de Physique 3 (1925), s. 122–128.

*****) BOSE, S. N.: *Plancks Gesetz und Lichtquantenhypothese*. Zeitschrift für Physik, 26 (1924) s. 178–181.

*****) Ako je známe, de Broglieho hypotéza bola experimentálne potvrdená v roku 1927 demonštráciou interferenčných javov elektrónov.

*****) Podľa L. S. POLAKA by sa vlastne Kleinova-Gordonova rovnica mala nazývať relativistická Schrödingerova rovnica.

Kvantovanie ako problém vlastných hodnôt

Erwin Schrödinger uverejnil v roku 1926 v časopise *Annalen der Physik* päť článkov k vlnovej mechanike v rozsahu 166 strán, z toho štyri pod názvom *Kvantovanie ako problém vlastných hodnôt* a piaty o ekvivalencii maticovej a vlnovej mechaniky.*) Tieto práce vyšli knižne v r. 1927 bez udania vydavateľa, druhé vydanie vyšlo v roku 1928 v Lipsku v nakladateľstve J. A. Barth. Spomínané Schrödingerove práce vyšli v mnohých jazykoch, v nemčine znovu v r. 1963 v Stuttgarte [8], v r. 1980 (s výnimkou tretieho oznámenia) v Berlíne [9], existuje ich preklad do ruštiny [10].

V pomerne krátkom čase od januára do júna 1926 vytvoril kompendium kvantovej mechaniky a vypracoval návod k matematickému riešeniu otvorených problémov atómovej fyziky vrátane základnej rovnice, ktorú teraz označujeme ako časovú Schrödingerovu rovnicu. Metódami maticovej mechaniky sa v tom čase ešte nepodarilo zvládnuť problém kvantovania energetických hladín atómu vodíka. Na tomto probléme pracovali také hlavy ako W. Heisenberg (1902–1976), M. Born, P. Jordan, W. Pauli (1900–1958) a P. A. M. Dirac (1902–1984).

Schrödinger hneď vo svojom prvom oznámení vypočítal vlastné hodnoty energie a príslušné vlastné funkcie elektrónu v atóme vodíka.

Až v druhom oznámení potom rozpracoval analógiu medzi stavmi mikročastice a kmitajúcou strunou. Hlavným výsledkom tretieho oznámenia je aplikácia poruchovej teórie na atóm vodíka a teoretické zdôvodnenie Starkovho efektu. Napokon vo štvrtom oznámení formuloval aj rovnicu pre časový vývoj stavu mikročastíc, teda časovú Schrödingerovu rovnicu v súčasnom ponímaní. Veľké úspechy, ktoré dosiahol v aplikáciách, svedčia nielen o plodnosti jeho metódy, ale aj o jeho nesmiernej invencii. Čo všetko vedel vytvoriť Schrödinger z de Broglieho podnetov, vystihol Max Planck slovami: „Čítam Vaše pojednanie tak, ako si zvedavé dieťa plné napätia vypočuje vyriešenie hlavolamu, nad ktorým sa dlho trápilo ...“ [11].

V prvom oznámení, ktoré postúpil redakcii *Annalen der Physik* 27. januára 1926, Schrödinger najkratšou cestou dospeje k formulácii svojej rovnice pre stacionárne stavy (bezčasovej Schrödingerovej rovnice) a prezentuje jej riešenie pre vodíkový atóm.

V krátkom úvode oboznamuje čitateľa so svojou základnou myšlienkou, ktorú zhrňujeme vo voľnom preklade: Predpis kvantovania možno nahradiť inou požiadavkou, v ktorej sa nevyskytuje ani slovko o „celých číslach“.**) Celočíselnosť výjde tým istým

*) SCHRÖDINGER, E.: *Quantisierung als Eigenwertproblem; erste Mitteilung*, Ann. Phys. 79, s. 361–376, *zweite Mitt.* 79, s. 489–527, *dritte Mitt.* 80, s. 437–491, *vierte Mitt.* 81, s. 109–140. SCHRÖDINGER, E.: *Über das Verhältnis der Heisenberg-Born-Jordanschen Quantenmechanik zu der meinen*. Ann. Phys. 79, s. 734–757.

**) V Bohrovej-Sommerfeldovej teórii sa postulovalo, že pri násobneperiodických pohyboch pre každý stupeň voľnosti sa musí integrál $\oint p_k dq_k$ rovnať celočíselnému násobku Planckovej konštanty, pričom p_k je zovšeobecnená hybnosť a q_k zovšeobecnená súradnica.

prírodným spôsobom ako napríklad celočíselný počet uzlov kmitajúcej struny. Nové poňatie možno zovšeobecniť a dotýka sa hlbokej podstaty predpisov kvantovania [12]. Tento pôvodný Schrödingerov prístup sa v súčasnosti využíva pri zavádzaní vyučovania základov kvantovej mechaniky na gymnáziách.

V ďalšej časti Schrödingerovho „Prvého oznámenia“ už prevláda riešenie technických problémov. Schrödinger vychádza z Hamiltonovej rovnice pre časticu v konzervatívnom silovom poli

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

kde H je Hamiltonova funkcia, závislá od zovšeobecnenej súradnice častice q a zovšeobecnenej hybnosti p , pričom $p = \partial S / \partial q$, kde S je účinok. Na pravej strane E je energia. V druhom kroku urobí substitúciu

$$(2) \quad S = k \ln \psi,$$

kde ψ je nová neznáma funkcia, k je konštanta, ktorá má rozmer účinku. Po tejto substitúcii prejde rovnica (1) do tvaru

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

Rovnicu (1') možno previesť do tvaru: kvadratická forma funkcie ψ a jej prvých derivácií sa rovná nule. Pre elektrón v atóme vodíka platí $T + U = E$, kde T je kinetická energia, U potenciálna energia a E celková energia, pričom $T = (p_x^2 + p_y^2 + p_z^2) / 2m$, $U = -(4\pi\epsilon_0)^{-1} \cdot e^2 / r$ alebo v sústave cgs jednoducho $U = -e^2 / r$, kde $r = \sqrt{(x^2 + y^2 + z^2)}$. Po vykonaní substitúcií dostaneme požadovaný tvar rovnice (1'), a to

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

Bohrov-Sommerfeldov kvantový postulát potom nahradil Schrödinger týmto extrémnym postulátom: Hľadáme v celom priestore *jednoznačné, konečné* a dvakrát derivovateľné *spojité* funkcie ψ , pre ktoré integrál z kvadratickej formy (1'') nadobudne extrém. Spomínaným extrémnym postulátom nadviazal Schrödinger na Hamiltonove práce o šírení svetla a analógiu medzi geometrickou (lúčovou) a vlnovou optikou. Hamilton formuloval rovnicu pre eikónal – zhruba povedané pre plochu, do ktorej sa v danom čase dostali lúče šíriace sa v prostredí rýchlosťou $v(x, y, z)$:

$$\left(\frac{\partial \psi}{\partial x}\right)^2 + \left(\frac{\partial \psi}{\partial y}\right)^2 + \left(\frac{\partial \psi}{\partial z}\right)^2 = \frac{1}{v^2} \left(\frac{\partial \psi}{\partial t}\right)^2.$$

Vo fyzikálnej optike je základnou rovnicou

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial z^2} = \frac{1}{v^2} \frac{\partial^2 \psi}{\partial t^2}.$$

Prechod od prvej na druhú rovnicu možno dostať z variančného princípu. Schrödinger tento prechod dobre poznal. Druhá vec, ktorú využil, bola analógia medzi vlnovou funk-

ciou ψ a mechanickým účinkom S . Uplatnením analógie $\psi \rightarrow S$ a spomínaného extrémneho postulátu dospel Schrödinger (podobne ako to bolo už známe v optike) od bodovej mechaniky k vlnovej mechanike. Tento postup vedie priamo na bezčasovú Schrödingerovu rovnicu:

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

V ďalšom prepíše svoju rovnicu (2a) do sférických súradníc, urobí separáciu premenných a nájde riešenie pre radiálnu vlnovú funkciu, ktorá spĺňa požadované vlastnosti jednoznačnosti, konečnosti a spojitosti v celom konfiguračnom priestore. Schrödinger získal tak energetické spektrum vodíkového atómu a porovnaním s Bohrovými výsledkami určil konštantu k

$$k = \frac{\hbar}{2\pi} = \hbar,$$

kde \hbar je Planckova konštanta.

Schrödingerov postulát bol oveľa plodnejší ako Bohrov-Sommerfeldov po prvé preto, že pomocou vzťahu (2a) s $k = \hbar$ možno v princípe určiť energetické spektrum aj iných útvarov, a po druhé preto, že pre ionizovaný elektrón poskytuje spojité spektrum. Zo Schrödingerovej rovnice vyplynulo automaticky diskrétné spektrum energetických hladín pre finitný pohyb a spojité spektrum pre infinitný pohyb.

Pri riešení diferenciálnej rovnice pre radiálnu vlnovú funkciu vyvstal pre Schrödingera problém okrajových podmienok. V tejto otázke konzultoval s Hermannom Weylom, za čo mu v práci vyjadril aj vďaku. Schrödinger potom ukázal, že požiadavka konečnosti v bode nula a v nekonečne pre radiálnu vlnovú funkciu je ekvivalentná so zadaním okrajových podmienok.

V závere svojho prvého oznámenia Schrödinger uvádza, že vlnovú funkciu ψ možno interpretovať nejakým kmitavým procesom v atóme (vlastnými kmitmi stojatých vln, pozn. aut.). Podnet k týmto úvahám mu poskytli predovšetkým „duchaplne Théses pána Louisa de Broglieho“. Pôvodne zamýšľal odôvodniť novú koncepciu kvantovania v tejto názornejšej podobe, uprednostnil však spomínanú „neutrálnu matematickú formu“, v ktorej kvantovanie vyplýva z konečnosti, jednoznačnosti (a spojitosti pozn. aut.) istej priestorovej funkcie.

Od de Broglieho k Schrödingerovi

Až v druhom oznámení, ktoré poslal do tlače 23. februára 1926, Schrödinger prezentuje svoju fyzikálnu koncepciu. Aj táto práca je matematicky náročná, opäť sa opiera o Hamiltonovu-Jacobiho diferenciálnu rovnicu a pre svoje vlny zavádza konfiguračný priestor s osobitnou metrikou. Inštruktívnejšia je Schrödingerova práca *Four lectures on wave mechanics* [13] z roku 1928, a to nielen vzhľadom na názornosť, ale aj preto, lebo autor tu v nerelativistickej forme opakuje de Broglieho myšlienky a ukazuje ako na ne nadviazal.

Vychádza podobne ako de Broglie z Maupertuisovho princípu pre hmotný bod, ktorý prechádza z bodu A do bodu B

$$(3) \quad \delta \int_A^B 2T dt = 0,$$

kde T je kinetická energia. (Na rozdiel od de Broglieho Schrödinger neuvažuje voľnú časticu, ale časticu v poli, v ktorom má potenciálnu energiu $U(x, y, z)$.) Ak sa hmotný bod pohybuje v danom čase rýchlosťou $v = ds/dt$ a má hmotnosť m , potom

$$2T = mv^2 = m \left(\frac{ds}{dt} \right)^2 = 2(E_0 - U) = \frac{ds}{dt} \sqrt{2m(E_0 - U)},$$

kde E_0 je celková energia, ktorá sa v konzervatívnom silovom poli zachováva. Rovnicu (3) možno teda prepísať do tvaru

$$(4) \quad \delta \int_A^B \sqrt{2m(E_0 - U)} ds = 0.$$

Inštruktívny výklad využitia analógie medzi optikou a mechanikou na základe pozorovania Maupertuisovho a Fermatovho princípu nájde čitateľ v prednáškach Enrica Fermiho (1901–1954) o kvantovej mechanike [14].

Svojho času W. R. Hamilton (1805–1868) konfrontoval rovnicu (4) s Fermatovým princípom najkratšej optickej dráhy v nehomogénnom prostredí

$$\delta \int_A^B n ds = 0.$$

V poslednom integrále $n = c/v_f$, kde $d(x, y, z)$ je absolútny index lomu, c rýchlosť svetla vo vákuu a $v_f(x, y, z)$ fázová rýchlosť svetla v prostredí. (Ľahko vidno, že Fermatov princíp je vlastne princípom najkratšieho času.) Ak dosadíme za index lomu do posledného integrálu c/v_f , dostaneme vzhľadom na $c = \text{konšt.}$

$$(5) \quad \delta \int_A^B \frac{ds}{v_f} = 0.$$

V integrande vo vzťahu (5) je fázová rýchlosť vlny v_f v menovateli, zatiaľ čo vzťah (4) vedie v najjednoduchšom prípade na

$$(4a) \quad \delta \int_A^B v_c ds = 0,$$

kde v_c je rýchlosť častice. S touto ťažkosťou sa stretol už G. W. Leibniz (1646–1716) a fyzici ju považovali za nepreklenuteľnú prekážku, ak mali prekonať rozpor medzi vzťahom (5) pre šírenie svetla ako vlny podľa Huygensa a Fermata na jednej strane a medzi vzťahom (4a) pre šírenie svetla ako emitovaných častíc.

De Broglie nadviazal na myšlienky W. R. Hamiltona a lorda Rayleigha (1842–1919) a vyriešil tento rozpor zavedením grupovej rýchlosti. „Dejiny optických teórií ukazujú“ – napísal de Broglie [15], „že vedecký názor dlhý čas kolísal medzi mechanickým

a vlnovým ponímaním svetla. Ale tieto dva náhľady si vari protirečia oveľa menej, než sa to predtým predpokladalo. Zdá sa, že tento názor potvrdzuje najmä vývin kvantovej teórie.“

V ďalšom budeme najprv sledovať de Broglieho myšlienky v Schrödingerovej modifikácii a potom ukážeme, ako ich Schrödinger rozvinul tak, že dospel k svojej rovnici.

Oba princípy, (4) a (5), budú identické, ak postulujeme

$$(6) \quad v_f = \frac{C}{\sqrt{(2m(E_0 - U))}},$$

kde C nezávisí od polohy častice, iba parametricky od jej celkovej energie E_0 . Takým spôsobom sme – podľa Schrödingera – myšlienkovo skonštruovali optické prostredie, kde varieta možných svetelných lúčov sa kryje s dynamickými dráhami hmotného bodu s hmotnosťou m , ktorý sa pohybuje s danou energiou v silovom poli a v ňom má potenciálnu energiu $U(m, y, z)$. Rýchlosť svetla teraz závisí nielen od súradníc cez $U(x, y, z)$, ale aj od celkovej energie hmotného bodu E_0 . Závislosť od E_0 interpretujeme ako disperziu, t. j. ako závislosť od frekvencie ν podľa vzťahu

$$(7) \quad E = h\nu.$$

Teda všetky možné svetelné lúče ν (myslenom) nehomogénnom disperznom prostredí korešpondujú so všetkými dynamickými dráhami uvažovanej častice.

Problém možno uviesť aj takto: možno vytvoriť bodový svetelný signál – pýta sa Schrödinger – ktorý by sa pohyboval tak ako uvažovaný hmotný bod? Na prvý pohľad to nie je možné vzhľadom na starý rozpor medzi (4a) a (5). Pre $E_0 = \text{konšt.}$ možno za v_g vo vzťahu (4a) napísať

$$(8) \quad v_g = \frac{1}{m} \sqrt{(2m(E_0 - U))}.$$

Vidno, že (8) je v rozpore so (6). Situácia vyzerá ináč, ak uvažíme, že „bodový“ svetelný signál sa šíri grupovou rýchlosťou $v_g = d\nu/d(1/\lambda)$, kde λ je vlnová dĺžka. Vzhľadom na $1/\lambda = \nu/v_f$

$$\frac{1}{v_g} = \frac{d}{d\nu} \left(\frac{\nu}{v_f} \right)$$

a s využitím (7) dostaneme

$$(9) \quad \frac{1}{v_g} = \frac{d}{dE_0} \left(\frac{E_0}{v_f} \right).$$

Ak postupujeme podľa de Broglieho a použijeme korešpondenciu rýchlosti častice s grupovou rýchlosťou vlnového balíku, opisujúceho šírenie svetelného signálu, čiže ak $v_g = v_g$, pomocou (6), (8) a (9) dostaneme

$$\frac{d}{dE_0} \left(\frac{E_0 \sqrt{(2m(E_0 - U))}}{C} \right) = \frac{m}{\sqrt{(2m(E_0 - U))}} = \frac{d}{dE_0} (\sqrt{(2m(E_0 - U))});$$

z toho

$$\left(\frac{E_0}{C} - 1\right) \sqrt{2m(E_0 - U)} = \text{konšt.}$$

Posledná rovnosť je splnená len vtedy ak prvý faktor na ľavej strane sa rovná nule čiže pre $P = E_0$, lebo U závisí od súradníc a C závisí iba od E_0 .

Namiesto (6) teda môžeme pre fázovú rýchlosť písať

$$(10) \quad v_f = \frac{E_0}{\sqrt{2m(E_0 - U)}}.$$

Teraz už zo vzťahov (7) a (10) možno určiť vlnovú dĺžku vlny priradenej častici:

$$(11) \quad \lambda = \frac{v_f}{v} = \frac{h}{\sqrt{2m(E_0 - U)}} = \frac{h}{mv_\varepsilon}.$$

To je vzťah, ktorý de Broglie postuloval pre voľnú časticu na základe relativistických úvah. Za predpokladu, že sa častica, ktorej sme priradili vlnovú dĺžku λ , pohybuje po kruhovej dráhe o polomere a , teda po obvode kruhu $2\pi a$, musí platiť

$$(12) \quad \frac{2\pi a}{\lambda} = n,$$

kde $n = 1, 2, 3, \dots$. Dosadením (12) do (11) dostaneme

$$(13) \quad mv_\varepsilon a = n \frac{h}{2\pi}.$$

Schrödinger, obdobne ako de Broglie, dospel tak k rovnakému výsledku ako N. Bohr v r. 1913 [16]. Celočíselné násobky Planckovej konštanty sa tu pre fyzikálne veličiny nepostulujú, ale vyplývajú z priradenia de Broglieovej vlnovej dĺžky častici.*)

Pritom vzťah (12), ktorý možno prepísať do tvaru

$$(12') \quad \frac{\lambda}{a} = \frac{2\pi}{n}$$

vychádza ešte z „obyčajnej“ mechaniky, v ktorej sa častice pohybujú po dráhe. Podľa Schrödingera možno aplikovať „obyčajnú“ mechaniku len pre $a \gg \lambda$. Tu vlastne vyslovil v inom balení Bohrov princíp korešpondencie: Pre vlnové dĺžky porovnateľné s rozmermi uvažovaného systému treba podľa Schrödingera prejsť od „obyčajnej“ mechaniky k vlnovej mechanike, a to podobne ako v optike prechádzame od geometrickej, lúčovej optiky k fyzikálnej, vlnovej optike.

*) Treba povedať, že N. Bohr pôvodne vyšiel tiež iba z Planckovho vzťahu $E = h\nu$ a napokon dospel na základe celkom iných úvah ako de Broglie a Schrödinger ku kvantovaniu momentu hybnosti podľa (13). Len neskoršie v Bohrovej-Sommerfeldovej teórii sa vzťah (13) zovšeobecnil na postulát $\oint p_k dq_k = nh$ a z kvantovej teórie sa stala „kabala celých čísel“.

Takýto prechod je podľa Schrödingera potrebný práve pri opise pohybu elektrónu v atóme vodíka. Problém treba riešiť obdobne ako pri určení všetkých možných kmitov (stojatých vln) pružného telesa. Pre jednoduchosť sa uvažuje pružná kvapalina v uzavretej nádobe. Pre tlak p platí vlnová rovnica

$$(14) \quad \Delta p - \frac{1}{v_f^2} \ddot{p} = 0,$$

kde v_f je konštantná rýchlosť šírenia pozdĺžnych vln možných v uvažovanej uzavretej nádobe. Rovnica (14) sa rieši substitúciou

$$(14a) \quad p(x, y, z, t) = \psi(x, y, z) e^{i\omega t},$$

kde $\omega = 2\pi\nu$ je uhlová frekvencia. Z toho pre vlnovú funkciu ψ dostaneme rovnicu

$$(14b) \quad \Delta\psi + \frac{\omega^2}{v_f^2} \psi = 0,$$

pričom pre ψ platia rovnaké okrajové podmienky ako pre p .

Rovnica (14a) má jednoznačne regulárne riešenie za daných okrajových podmienok len pre spočítateľnú množinu vlnových funkcií ψ_1, ψ_2, \dots a pre príslušné vlastné hodnoty parametra $\omega_1, \omega_2, \dots$. Ak ψ_1, ψ_2, \dots tvoria úplný systém funkcií, potom všeobecné riešenie (14) je

$$(15) \quad p = \sum_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}} \psi_{\mathbf{k}} e^{i(\omega_{\mathbf{k}} t + \vartheta_{\mathbf{k}})},$$

kde $c_{\mathbf{k}}, \vartheta_{\mathbf{k}}$ sú ľubovoľné konštanty.

Pre vlnu, ktorú Schrödinger priradil častici, uvažoval tiež veličinu p , pre ktorú platí rovnica typu (14). Teraz za v_f treba však dosadiť vzťah (10). Situácia sa komplikuje tým, že fázová rýchlosť tejto vlny už nie je konštantná, ale závisí od energie, a teda aj od frekvencie podľa (7). Cez potenciálnu energiu závisí v_f od súradníc. Závislosť v_f od E_0 v prípade stacionárnych stavov je jednoduchá, lebo našu vlnovú rovnicu možno aplikovať len na takú funkciu p , pre ktorú podľa (14a)

$$p \sim e^{i/\hbar Et}.$$

Platí teda

$$(16) \quad \ddot{p} = \frac{E^2}{\hbar^2} p.$$

Ak dosadíme (16) a (10) do (14) a písmeno p nahradíme gréckym ψ ,*) dostaneme

$$(17) \quad \Delta\psi + \frac{2m}{\hbar^2} (E - U) \psi = 0.$$

Teraz namiesto E_0 píšeme E . Riešením rovnice (17) pre viazané stavy sú diskkrétne

*) Toto ψ tak ako v (14a) a (14b) je iba funkciou súradníc.

hodnoty $E_1, E_2, E_3, \dots, E_i, \dots$. Každé E_i predstavuje možnú hodnotu energie. Rovnica (17) už je „bezčasová“ Schrödingerova rovnica, v ktorej koeficient pri ψ už nie je konštantný, ale závisí od súradníc.

Situácia sa skomplikuje pre viacčasticový systém, kde namiesto obyčajného priestoru zaviedol Schrödinger konfiguračný priestor s osobitnou metrikou. Bol si pritom vedomý, že tu už nepriraďuje systému vlnu, ktorá opisuje reálny fyzikálny proces.

Ekvivalencia vlnovej a maticovej mechaniky

V ďalšej práci z roku 1926 pod nadpisom *O vzťahu Heisenbergovej-Bornovej-Jordanovej kvantovej mechaniky k mojej* [17] Schrödinger ukázal, že maticová a vlnová mechanika sú ekvivalentné. V tejto práci zavádza pojem operátora, jeho vlastných funkcií, poukazuje na to, že tvoria úplný ortogonálny systém funkcií, opisuje rozvoj ľubovoľnej vlnovej funkcie do radu podľa vlastných funkcií nejakého operátora a napokon ukazuje, že výraz $\int \psi_1^* \hat{F} \psi_2 dx = F_{12}$ nie je nič iné ako Heisenbergov maticový element veličiny F , ak ψ_1, ψ_2 sú vlastné funkcie napríklad hamiltoniánu.*)

Schrödinger potom uverejnil – ako sme už uviedli – ešte tretiu a štvrtú časť svojho pojednania *Kvantovanie ako problém vlastných hodnôt* [8], kde uvádza aj metódu výpočtu intenzity a polarizácie rozštiepených spektrálnych čiar. V poslednej stati potom prechádza na nekonzervatívne systémy. Dôvodí, že bezčasová rovnica (17) nie je vlastne vlnovou rovnicou a postuluje časovú závislosť

$$\frac{\partial \psi}{\partial t} = \pm \frac{i}{\hbar} E \psi,$$

ktorá vedie na Schrödingerovu rovnicu

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = \hat{H} \psi.$$

Napokon rozširuje poruchovú teóriu na poruchy obsahujúce explicitne čas a vypracováva prvú kvantovomechanickú teóriu disperzie.

Svoju sériu článkov končí odstavcom: *O fyzikálnom význame poľného skalára* (vlnovej funkcie ψ , pozn. aut.). Podľa Schrödingera druhá mocnina absolútnej hodnoty vlnovej funkcie je akosi funkciou váhy v konfiguračnom priestore systému. „Vlnovomechanická konfigurácia systému je superpozíciou mnohých, prísne vzaté všetkých kinematicky možných bodovomechanických konfigurácií. Pritom prispieva každá bo-

*) Ekvivalentnosť maticovej a vlnovej mechaniky objavil nezávisle od Schrödingera aj W. PAULI, ako to vyplýva z jeho obširneho listu P. JORDANOVÍ, datovaného 12. apríla 1926. Tento list uverejnil VAN DER WAERDEN ako dodatok k svojej stati *Od maticovej a vlnovej mechaniky k zjednotenej kvantovej mechanike* v knihe *The physicist's Conception of Nature*, ed. JAGDISH MEHRA, D. Reidel Publ. Company, Dordrecht-Holland/Boston-USA, str. 276.

dovomechanická konfigurácia určitou váhou k skutočnej vlnovomechanickej konfigurácii. Táto váha je určená výrazom $\psi^*\psi$. Ak niekto obľubuje paradoxy, môže povedať, že systém sa nachádza súčasne ako celok vo všetkých mysliteľných kinematických polohách, ale nie vo všetkých »s rovnakou intenzitou.« Ak máme zjednodušiť Schrödingerovu interpretáciu, elektróny sú okolo atómového jadra akosi rozmazané s hustotou určenou v objeme dV výrazom $\psi^*\psi dV$. Aby toto tvrdenie podporil, odvodzuje napokon rovnicu kontinuity. (Jeho odvodenie rovnice kontinuity nachádzame dodnes v učebniciach kvantovej mechaniky.)

Bornova interpretácia kvantovej mechaniky

E. Schrödinger, W. Pauli a neskoršie John von Neumann dokázali, že vlnová a maticová mechanika sú matematicky izomorfné, ale Heisenbergova a Schrödingerova fyzikálna interpretácia sa diametrálne rozchádzali. K tejto otázke zaujal stanovisko Max Born v článku *Kvantová mechanika zrážkových procesov* [18]:

„Maticová forma kvantovej mechaniky, ktorú založil Heisenberg a rozvinul s Jordanom a autorom tohto článku, vychádza z myšlienky, že procesy v priestore a čase vôbec nie je možné exaktne zobrazit' a uspokojuje sa formulovaním vzťahov medzi pozorovateľnými veličinami, ktoré možno interpretovať ako vlastnosti pohybov iba v limitnom klasickej prípad. Na druhej strane Schrödinger, zdá sa, pripisuje vlnám rovnakú realitu, akú majú svetelné vlny. Tieto vlny posudzuje podľa de Broglieho postupu ako nositeľov atomárnych procesov. Usiluje sa konštruovať »grupy vln, ktoré majú vo všetkých smeroch malé rozmery« a ktoré majú zrejme nepriamo zobrazit' pohybujúce sa častice.

Ani jedno z oboch poňatí sa mi nezdá byť uspokojivé. Pokúsil by som sa podať tu tretiu interpretáciu a vyskúšať jej upotrebitelnosť na zrážkových procesoch. Pritom nadväzujem na Einsteinovu poznámku o vzťahu vlnového poľa a svetelných kvánt. Einstein povedal asi toľko, že vlny sú tu iba na to, aby nasmerovali korpuskulárne svetelné kvantá, a v tomto zmysle hovoril o akomsi »poli duchov« (má tu na mysli skôr pole strašidiel – Gespensterfeld, pozn. aut.). Toto pole určuje pravdepodobnosť, že svetelné kvantum, nositeľ energie a hybnosti, sa bude pohybovať určitým smerom. Samému poľu však neprináleží energia ani hybnosť ... A tu sa ponúka myšlienka posudzovať de Broglieho a Schrödingerove vlny ako »pole duchov« alebo »vodiace pole«“. V ďalšom M. Born uvádza, že podľa jeho interpretácie sa šíri vodiace pole zobrazené skalárnou vlnovou funkciou ψ podľa Schrödingerovej diferenciálnej rovnice. Ale hybnosť a energia sa pritom prenášajú tak, ako keby sa skutočne premiestňovali častice. Pre polohu častice možno určiť len pravdepodobnosť pomocou rozdelenia hodnôt funkcie ψ . Born uzatvára svoje úvahy paradoxom: pohyb častíc sa deje podľa pravdepodobnostných zákonov, sama pravdepodobnosť sa však šíri v súlade so zákonom príčinnosti. Inými slovami, znalosť stavu vo všetkých bodoch v danom okamihu určuje rozdelenie stavu vo všetkých neskorších časoch.

V ďalšej časti svojej práce potom M. Born podáva známu definíciu, podľa ktorej (pre jednu časticu)

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

je pravdepodobnosť výskytu častice v čase t v objemovom elemente $dV = dx dy dz$ [19]. Erwin Schrödinger ani Albert Einstein nikdy Bornovu pravdepodobnostnú interpretáciu neprijali.

(Pokračovanie)

Literatúra

- [1] HEISENBERG, W.: *Der Teil und das Ganze*. München, R. Piper und Co. Verlag, 1969, s. 108.
- [2] SCHRÖDINGER, E.: *Antrittsrede gehalten in der Akademie der Wissenschaften am 4. Juli 1929*. In: *Physiker über Physiker II.*, Berlin, Akademie Verlag, 1979, s. 264.
- [3] Autobiografija E. Schrödingera. In: ERWIN SCHRÖDINGER — *Izbrannye trudy po kvantovoj mehanike*, Moskva, Nauka, 1976, s. 343.
- [4] FRENK, A. M.: *Bibliografija*. In: ERWIN SCHRÖDINGER — *Novyje puti v fizike*, Moskva, Nauka 1971, s. 413.
- [5] ALBERT EINSTEIN - HEDWIG und MAX BORN: *Briefwechsel 1916—1955*. München, Nymphenburger Verlagshandlung, 1969.
- [6] POLAK, L. S.: *Erwin Schrödinger i vozniknovenije kvantovoj mehaniki*. In [3] s. 347.
- [7] EINSTEIN, A.: *Quantentheorie des einatomigen idealen Gases, Erste Abhandlung*. Sitzungsberichte der preussischen Akademie der Wissenschaften, Phys.-math. Kl. (1924) 261—267; *Zweite Abhandlung*, (1925) 3—14, Wiederabdruck durch die Akademie der Wissenschaften der DDR, Berlin, Akademie-Verlag, 1978.
- [8] SCHRÖDINGER, E.: *Die Wellenmechanik*. Stuttgart, Ernst Battenberg, 1963.
- [9] LUDWIG, G.: *Wellenmechanik, Einführung und Originaltexte*. Berlin, Akademie-Verlag 1970.
- [10] Pozri [3] s. 9—138.
- [11] SCHRÖDINGER-PLANCK-EINSTEIN-LORENTZ: *Briefe zur Wellenmechanik*. Ed. K. PRZIBRAM, Wien, Springer Verlag 1963.
- [12] Pozri [8] s. 9—24, alebo [9] s. 108—122, tiež [10] s. 9—20.
- [13] Pozri [4] s. 273—316.
- [14] FERMI, E.: *Notes on Quantum Mechanics*. Chicago, University Press, 1955. Anglické faksimile a ruský preklad in: FERMI, E.: *Kvantovaja mehanika* (Konspekt lekcij, Moskva, Mir 1965, s. 15).
- [15] Pozri [9] s. 85—108.
- [16] BOHR, N.: *On the Constitution of Atoms and Molecules*. In: NIELS BOHR — *Collected Works*, Volume 2, ed. L. ROSENFELD and U. HOYER, Amsterdam, North Holland Publishing Company, 1981, s. 161—185.
- [17] SCHRÖDINGER, E.: *Über das Verhältnis der Heisenberg-Born-Jordanschen Quantenmechanik zu der meinen*. In [8], s. 64—86.
- [18] BORN, M.: *Quantenmechanik der Stossvorgänge*. Zeitschrift für Physik 38 (1926) s. 803, in [9] s. 237—259.
- [19] ZAJAC, R.: *Max Born a vznik kvantovej mehaniky*. PMFA, 27 (1982), s. 317—325.