530.145.6

ОСНОВНЫЕ УРАВНЕНИЯ КВАНТОВОЙ МЕХАНИКИ *)

П. А. М. Дирак (Кембридж)

(Поступило 7 ноября 1925 г.)

§ 1. ВВЕДЕНИЕ

Хорошо известно, что экспериментальные факты атомной физики требуют отхода от классической теории электродинамики при описании атомных явлений. Этот отход принимает, в теории Бора, форму специальных предположений о существовании стационарных состояний, в которых атом не излучает, а также определенных правил, называемых квантовыми условиями, которые фиксируют стационарные состояния и частоты излучения, испускаемого при переходах между уровнями. Эти предположения совершенно чужды классической теории, однако они оказались очень плодотворными при интерпретации ограниченной области атомных явлений. Единственный способ, которым используется классическая теория, это — путем предположения, что классические законы справедливы при описании движения в стационарных состояниях, хотя они и становятся совершенно неприменимыми во время переходов, а также — путем предположения, называемого *принципом соответствия*, что классическая теория дает правильные результаты в предельном случае, когда действие за период движения системы велико по сравнению с постоянной Планка h, а также некоторых других специальных случаях.

*) P. A. M. Dirac, Fundamental Equations of Quantum Mechanics, Proc. Roy Soc. (Lnd.) **A109** (No. A752), 642—653 (1925). (Представлено Р. Г. Фаулером.) Перевод М. Б. Волошина.

В недавней работе *) Гейзенберг выдвинул новую теорию, которая предполагает, что не уравнения классической механики в каком-либо отношении ошибочны, а что требуют модификации математические операции, посредством которых из этих уравнений выводятся физические результаты. Таким образом, вся информация, даваемая классической теорией, может быть использована в новой теории.

§ 2. КВАНТОВАЯ АЛГЕБРА

Рассмотрим многократно-периодическую невырожденную динамическую систему с u степенями свободы, которая описывается уравнениями, связывающими координаты с их производными по времени. Согласно классической теории, мы можем решить задачу о такой системе следующим образом. Предположим, что каждая из координат x может быть разложена в кратный ряд Фурье по времени t, т. е.

$$x = \sum_{\alpha_1 \ldots \alpha_u} x(\alpha_1\alpha_2 \ldots \alpha_u) \exp [i(\alpha_1\omega_1 + \alpha_2\omega_2 + \ldots + \alpha_u\omega_u)t] = \sum_{\alpha} x_\alpha \exp [i(\alpha\omega)t],$$

где последняя запись введена для краткости. Подставим эти выражения в уравнения движения и приравняем коэффициенты при каждой гармонике в обоих частях. Полученные таким образом уравнения (которые мы будем называть А-уравнениями) определят каждую из амплитуд x_α и частот $(\alpha\omega)$ (при этом частоты измеряются в радианах в единицу времени). Решение не будет единственным. Будет существовать u-кратное бесконечное множество решений, которые могут быть занумерованы тем, что амплитуды и частоты будут рассматриваться как функции u констант $\varkappa_1 \ldots \varkappa_u$. Таким образом, как x_α, так и $(\alpha\omega)$ являются функциями двух наборов чисел α и $\varkappa$ и могут быть записаны в виде $x_{\alpha\varkappa}$, $(\alpha\omega)_\varkappa$.

При квантовом решении задачи, согласно Гейзенбергу, мы также предполагаем, что каждая из координат может быть представлена гармоническими компонентами вида $\exp(i\omega t)$ с амплитудой и частотой каждой гармоники, зависящими от двух наборов чисел $n_1 \ldots n_u$ и $m_1 \ldots m_u$, в этом случае всегда целых, и записываемыми в виде $x(nm)$, $\omega(nm)$. Разности $n_r - m_r$ соответствуют величинам α_r в предыдущем рассмотрении, однако ни величины n, ни какие-либо функции, зависящие от n и m, не играют роли прежних величин $\varkappa$ при определении того, какому решению принадлежит данная гармоническая компонента Мы не можем, например, взять совокупность всех компонент, для которых величины n принимают заданный набор значений, и сказать, что эти значения сами по себе образуют одно полное решение уравнений движения. Квантовые решения все взаимосвязаны и должны рассматриваться как единое целое. Математически это означает, что если по классической теории каждое из А-уравнений является соотношением между амплитудами и частотами, отвечающим одному определенному набору величин $\varkappa$, то амплитуды и частоты, входящие в квантовое А-уравнение, не относятся к одному определенному набору значений величин n, или каких-либо функций, зависящих от n и m, а величины n и m, определяющие их, связаны между собой специальным образом, который будет указан позже.

В классической теории мы имеем очевидное соотношение

$$(\alpha\omega)_\varkappa + (\beta\omega)_\varkappa = (\alpha + \beta, \omega)_\varkappa.$$

*) W. Heisenberg, Zs. Phys. 33, 879 (1925) (перевод публикуется в данном выпуске, с. 574.—*Ред.*).

Следуя Гейзенбергу, мы предполагаем, что соответствующим соотношением в квантовой теории является

$$\omega(n,\ n-\alpha)+\omega(n-\alpha,\ n-\alpha-\beta)=\omega(n,\ n-\alpha-\beta)$$

или

$$\omega(nm)+\omega(mk)=\omega(nk). \tag{1}$$

Это означает, что $\omega(nm)$ имеет вид $\Omega(n)-\Omega(m)$, где Ω есть уровни частоты. В теории Бора уровни частоты равны уровням энергии, умноженным на $2\pi/h$, однако для нас нет необходимости в этом предположении.

В классической теории мы можем перемножить две гармонические компоненты, связанные с одним и тем же набором величин $\varkappa$, следующим образом:

$$a_{\alpha\varkappa}\exp[i(\alpha\omega)_\varkappa t]\, b_{\beta\varkappa}\exp[i(\beta\omega)_\varkappa t]=(ab)_{\alpha+\beta,\,\varkappa}\exp[i(\alpha+\beta,\ \omega)_\varkappa t],$$

где

$$(ab)_{\alpha+\beta,\,\varkappa}=a_{\alpha\varkappa}b_{\beta\varkappa}.$$

Аналогичным образом в квантовой теории мы можем перемножить компоненты (nm) и (mk):

$$a(nm)\exp[i\omega(nm)t]\, b(mk)\exp[i\omega(mk)t]=ab(nk)\exp[i\omega(nk)t],$$

где

$$ab(nk)=a(nm)\,b(mk).$$

Таким образом, мы пришли к интерпретации произведения амплитуд компонент (nm) и (mk) как амплитуды (nk). Это соотношение вместе с правилом, требующим, чтобы в А-уравнение в виде суммы входили лишь ампитуды, связанные с одной и той же парой наборов чисел, заменяет то классическое правило, что все амплитуды, входящие в А-уравнение, имеют один и тот же набор величин $\varkappa$.

Теперь мы имеем возможность выполнять обычные алгебраические действия над квантовыми переменными. Сумма x и y определяется уравнениями

$$\{x+y\}(nm)=x(nm)+y(nm),$$

а произведение соотношением

$$xy(nm)=\textstyle\sum_k x(nk)\,y(km), \tag{2}$$

аналогичным классическому произведению

$$(xy)_{\alpha,\,\varkappa}=\sum_r x_{r\varkappa}y_{\alpha-r,\,\varkappa}.$$

Здесь появляется важное различие между двумя алгебрами. В общем случае

$$xy(nm)\neq yx(nm)$$

и квантовое умножение не является коммутативным, хотя, как легко проверить, оно является ассоциативным и дистрибутивным. Величину с компонентами $xy(nm)$, определяемыми соотношением (2), мы будем называть гейзенберговским произведением x и y и записывать просто как xy. Везде, где входит произведение двух квантовых величин, будет пониматься гейзенберговское произведение. Обычное умножение, естественно, подразумевается для произведений амплитуд и частот, а также других величин, связанных с явно указанными наборами величин n.

Обратная величина квантовой переменной x может быть определена любым из соотношений

$$\frac{1}{x}x=1 \quad \text{или} \quad x\frac{1}{x}=1. \tag{3}$$

Эти два уравнения эквивалентны, так как если мы умножим обе части первого уравнения на x слева и поделим на x справа, то получим второе. Аналогичным образом квадратный корень из x может быть определен соотношением

$$\sqrt{x}\sqrt{x}=x. \tag{4}$$

Не очевидно, что всегда должны существовать решения уравнений (3) и (4). В частности, может оказаться, что необходимо введение субгармоник, т. е. новых промежуточных уровней частот, для того, чтобы выразить $\sqrt{x}$. Этих трудностей можно избежать путем устранения иррациональностей и приведения к общему знаменателю каждого уравнения до интерпретации его в квантовой теории и получения из него А-уравнений.

Теперь мы можем перенести каждое из уравнений движения системы в квантовую теорию при условии, что мы можем решить, какой порядок величин в каждом из произведений является правильным. Любое уравнение, которое может быть выведено из уравнений движения при помощи алгебраических действий, не включающих перемену мест сомножителей в произведении, а также посредством дифференцирования и интегрирования по t, может также быть перенесено в квантовую теорию. В частности, таким образом может быть перенесено уравнение сохранения энергии.

Уравнения движения не достаточны для решения квантовой задачи. В классической теории уравнения движения не определяют $x_{\alpha\varkappa}$, $(\alpha\omega)_\varkappa$ как функции переменных $\varkappa$ до тех пор, пока не сделано каких-либо определенных предположений, определяющих переменные $\varkappa$. Мы могли бы при желании дополнить решение, выбрав переменные $\varkappa$ такие, что $\partial E/\partial\varkappa_r = \omega_r/2\pi$, где E — энергия системы; при таком выборе величины $\varkappa_r$ равны переменным действия J_r. Должны иметься соответствующие уравнения в квантовой теории, и эти уравнения представляют квантовые условия.

§ 3. КВАНТОВОЕ ДИФФЕРЕНЦИРОВАНИЕ

До сих пор единственным видом дифференцирования, рассмотренным нами, было дифференцирование по времени t. Теперь мы определим вид наиболее общей квантовой операции d/dv, которая удовлетворяет законам

$$\frac{d}{dv}(x+y)=\frac{d}{dv}x+\frac{d}{dv}y, \tag{I}$$

$$\frac{d}{dv}(xy)=\frac{d}{dv}x\cdot y+x\cdot\frac{d}{dv}y. \tag{II}$$

(Заметим, что в последнем соотношении сохраняется последовательность величин x и y.)

Первый из этих законов требует, чтобы амплитуды компонент величины dx/dv были линейными функциями компонент x, т. е.

$$\frac{dx}{dv}(nm)=\sum_{n'm'}a(nm;\,n'm')\,x(n'm'). \tag{5}$$

Имеется по одному коэффициенту $a\,(nm,\,n'm')$ для каждого набора целочисленных значений четырех величин: n, m, n' и m'. Второй закон накладывает определенные ограничения на коэффициенты a. Подставим для производных в (II) их выражения согласно соотношению (5) и приравняем компоненты (nm) в обеих частях равенства. Результат имеет вид

$$\sum_{n'm'k} a\,(nm;\ n'm')\,x\,(n'k)\,y\,(km') =$$
$$= \sum_{kn'k'} a\,(nk;\ n'k')\,x\,(n'k')\,y\,(km) + \sum_{kk'm'} x\,(nk)\,a\,(km;\ k'm')\,y\,(k'm').$$

Это равенство должно выполняться для всех значений амплитуд x и y, поэтому мы можем приравнять коэффициенты при $x\,(n'k)\,y\,(k'm')$ в обеих частях. Используя символ δ_{nm}, равный единице, когда $n = m$ (т. е., когда для каждого r, $m_r = n_r$), и нулю при $m \neq n$, получаем

$$\delta_{kk'}a\,(nm;\ n'm') = \delta_{mm'}a\,(nk';\ n'k) + \delta_{nn'}a\,(km;\ k'm').$$

Чтобы перейти к дальнейшему, мы должны по отдельности рассмотреть всевозможные случаи равенства и неравенства в пáрах kk', mm' и nn'.

Рассмотрим сначала случай, когда $k = k'$, $m \neq m'$, $n \neq n'$. При этом находим

$$a\,(nm;\ n'm') = 0.$$

Следовательно, равны нулю все коэффициенты $a\,(nm,\ n'm')$, за исключением тех, для которых $n = n'$ или $m = m'$ (или же выполняются оба равенства). Случаи $k \neq k'$, $m = m'$, $n \neq n'$, и $k \neq k'$, $m \neq m'$, $n = n'$, не дают ничего нового. Рассмотрим теперь случай $k = k'$, $m = m'$, $n \neq n'$. Это дает $a\,(nm;\ n'm) = a\,(nk;\ n'k)$. Следовательно, если $n \neq n'$, то $a\,(nm;\ n'm)$ не зависит от m. Аналогично, рассмотрение случая $k = k'$, $m \neq m'$, $n = n'$ показывает, что $a\,(nm;\ nm')$ не зависит от n, если $m \neq m'$. Случай $k \neq k'$, $m = m'$, $n = n'$ дает

$$a\,(nk';\ nk) + a\,(km;\ k'm) = 0.$$

Эти результаты можно объединить, положив

$$a\,(nk',\ nk) = a\,(kk') = -\,a\,(km;\ k'm), \tag{6}$$

при условии, что $k \neq k'$. Символ $a\,(k,\ k')$ с двумя индексами зависит, разумеется, от двух наборов целых чисел k и k'. Рассмотрение единственного оставшегося случая $k = k'$, $m = m'$, $n = n'$ приводит к результату

$$a\,(nm;\ nm) = a\,(nk;\ nk) + a\,(km;\ km).$$

Это означает, что можно положить

$$a\,(nm;\ nm) = a\,(mm) - a\,(nn). \tag{7}$$

Соотношение (7) дополняет соотношение (6), определяя $a\,(kk')$ при $k = k'$.

Уравнение (5) сводится теперь к следующему:

$$\frac{dx}{dv}\,(nm) = \sum_{m' \neq m} a\,(nm;\ nm')\,x\,(nm') + \sum_{n' \neq n} a\,(nm;\ n'm)\,x\,(n'm) +$$
$$+\,a\,(nm;\ nm)\,x\,(nm) = \sum_{m' \neq m} a\,(m'm)\,x\,(nm') - \sum_{n' \neq n} a\,(nn')\,x\,(n'm) +$$
$$+\,\{a\,(mm) - a\,(nn)\}\,x\,(nm) = \sum_{k} \{x\,(nk)\,a\,(km) - a\,(nk)\,x\,(km)\}.$$

Следовательно,

$$\frac{dx}{dv} = xa - ax. \tag{8}$$

Таким образом, наиболее общей операцией, удовлетворяющей законам I и II, которая может быть произведена над квантовой переменной, является взятие разности ее гейзенберговских произведений на некоторую другую квантовую переменную. Легко видеть, что в общем случае нельзя переставлять порядок дифференцирования, т. е.

$$\frac{d^2x}{du\,dv} \neq \frac{d^2x}{dv\,du}.$$

В качестве примера квантового дифференцирования мы можем рассмотреть случай, когда (a) диагонально, так что $a\,(nm) = 0$, за исключением случая $n = m$. В этом случае имеем

$$\frac{dx}{dv}(nm) = x\,(nm)\,a\,(mm) - a\,(nn)\,x\,(nm).$$

В частности, если $ia\,(mm) = \Omega\,(m)$, где $\Omega\,(m)$ — введенные ранее уровни частот, то

$$\frac{dx}{dv}(nm) = i\omega\,(nm)\,x\,(nm)$$

и наше дифференцирование по v становится обычным дифференцированием по t.

§ 4. КВАНТОВЫЕ УСЛОВИЯ

Рассмотрим теперь, какому объекту классической теории соответствует выражение $(xy - yx)$. Для этого предположим, что с изменением n $x\,(n,\ n - \alpha)$ меняется лишь медленно, причем числа n предполагаются большими, а числа α — малыми, так что можно положить

$$x\,(n,\ n - \alpha) = x_{\alpha\varkappa},$$

где $\varkappa_r = n_r h$ или $(n_r + \alpha_r)\,h$, что практически эквивалентно. Тогда имеем

$$\begin{aligned} x\,(n, n-\alpha)\,y\,(n-\alpha, n-\alpha-\beta) - y\,(n, n-\beta)\,x\,(n-\beta, n-\alpha-\beta) &= \\ = \{x\,(n, n-\alpha) - x\,(n-\beta, n-\beta-\alpha)\}\,y\,(n-\alpha, n-\alpha-\beta) &- \\ - \{y\,(n, n-\beta) - y\,(n-\alpha, n-\alpha-\beta)\}\,x\,(n-\beta, n-\alpha-\beta) &= \\ = h \sum_r \left\{\beta_r \frac{\partial x_{\alpha\varkappa}}{\partial \varkappa_r}\,y_{\beta\varkappa} - \alpha_r \frac{\partial y_{\beta\varkappa}}{\partial \varkappa_r}\,x_{\alpha\varkappa}\right\}&. \end{aligned} \tag{9}$$

Далее

$$2\pi i \beta_r y_\beta \exp\,[i\,(\beta\omega)\,t] = \frac{\partial}{\partial w_r}\{y_\beta \exp\,[i\,(\beta\omega)\,t]\},$$

где w_r — угловые переменные, равные $\omega_r t/2\pi$. Следовательно, компонента (nm) разности $(xy - yx)$ соответствует в классической теории величине

$$\begin{aligned} \frac{ih}{2\pi} \sum_{\alpha+\beta=n-m} \sum_r \Big\{ &\frac{\partial}{\partial \varkappa_r}\{x_\alpha \exp\,[i\,(\alpha\omega)\,t]\}\,\frac{\partial}{\partial w_r}\{y_\beta \exp\,[i\,(\beta\omega)\,t]\} - \\ &- \frac{\partial}{\partial \varkappa_r}\{y_\beta \exp\,[i\,(\beta\omega)\,t]\}\,\frac{\partial}{\partial w_r}\{x_\alpha \exp\,[i\,(\alpha\omega)\,t]\}\Big\}, \end{aligned}$$

т. е. сама разность $(xy - yx)$ соответствует величине

$$-\frac{ih}{2\pi}\sum_r \left\{\frac{\partial x}{\partial \varkappa_r}\frac{\partial y}{\partial w_r} - \frac{\partial y}{\partial \varkappa_r}\frac{\partial x}{\partial w_r}\right\}.$$

Если положить $\varkappa_r$ равными переменным действия J_r, то это выражение становится скобкой Пуассона (или Якоби), умноженной на $ih/2\pi$:

$$[x,\ y] = \sum_r \left\{\frac{\partial x}{\partial w_r}\frac{\partial y}{\partial J_r} - \frac{\partial y}{\partial w_r}\frac{\partial x}{\partial J_r}\right\} = \sum_r \left\{\frac{\partial x}{\partial q_r}\frac{\partial y}{\partial p_r} - \frac{\partial y}{\partial q_r}\frac{\partial x}{\partial p_r}\right\},$$

где величины p_r и величины q_r образуют произвольный набор канонических переменных системы.

Выражения для элементарных скобок Пуассона различных комбинаций p и q имеют вид

$$\left.\begin{aligned} [q_r, q_s] = 0, \quad [p_r, p_s] = 0, & \\ [q_r, p_s] = \delta_{rs} = 0 \qquad & (r \neq s) \\ = 1 \qquad & (r = s). \end{aligned}\right\} \tag{10}$$

В общем случае скобки Пуассона удовлетворяют правилам (I) и (II), которые можно переписать в виде

$$[x, z] + [y, z] = [x + y, z], \tag{IA}$$

$$[xy, z] = [x, z]\, y + x\, [y, z]. \tag{IIA}$$

Используя эти правила и соотношение $[x, y] = -[y, x]$, можно выразить $[x, y]$ через $[q_r, q_s]$, $[p_r, p_s]$ и $[q_r, p_s]$, если x и y являются алгебраическими функциями переменных p_r и q_r, не прибегая к коммутативному закону умножения (за исключением того, что этот закон неявно используется при доказательстве соотношения (IIA) [для классических скобок Пуассона.— *Перев.*]). Таким образом, выражение $[x, y]$ имеет смысл и в квантовой теории, где x и y являются квантовыми переменными, если принять, что в этом случае остаются справедливыми выражения (10) для элементарных скобок.

Мы делаем основное предположение, что *разность гейзенберговских произведений двух квантовых величин равна скобке Пуассона этих величин, умноженной на* $ih/2\pi$. Или, в символической записи,

$$xy - yx = \frac{ih}{2\pi}\,[x, y]. \tag{11}$$

Мы видели, что это утверждение в предельном случае классической теории эквивалентно отождествлению величин $\varkappa_r$, нумерующих решения, с переменными действия J_r, и представляется разумным считать, что уравнение (11) выражает общие квантовые условия.

Заранее не очевидно, что вся информация, содержащаяся в уравнении (11), является самосогласованной. Благодаря тому, что величины, стоящие в обеих частях (11), подчиняются одним и тем же законам (I) и (II) или (IA) и (IIA), единственными независимыми условиями, накладываемыми уравнением (11), являются условия, в которых в качестве x и y фигурируют p и q, а именно

$$\left.\begin{aligned} q_r q_s - q_s q_r &= 0, \\ p_r p_s - p_s p_r &= 0, \\ q_r p_s - p_s q_r &= \delta_{rs}\frac{ih}{2\pi}. \end{aligned}\right\} \tag{12}$$

Если бы единственным основанием для того, чтобы считать, что уравнения (12) являются согласующимися между собой и с уравнениями движения, было то, что известна их самосогласованность в пределе $h \to 0$, то это не могло бы быть достаточно веским основанием, так как из уравнений можно было бы сделать вывод о несогласованности, состоящей в том, что $h = 0$, и такая несогласованность исчезала бы в пределе. Имеется, однако, гораздо более сильное свидетельство, чем это [в пользу самосогласованности уравнений (12).— *Перев.*], обусловленное тем, что классические операции подчиняются тем же законам, что и квантовые. Поэтому, если, применяя квантовые операции, мы получаем несогласованность, то, применяя таким же образом классические операции, мы также должны прийти к несогласованности. Если последовательность классических операций приводит к равенству $0 = 0$, то соответствующая последовательность квантовых операций также должна привести к равенству $0 = 0$, а не $h = 0$, так как невозможно найти величину, которая не обращается в нуль при выполнении квантовой операции над квантовыми переменными, такую, что соответствующая классическая операция над соответствующими классическими переменными давала бы величину, равную нулю. Таким образом, упомянутая выше возможность вывода из квантовых условий несогласованности вида $h = 0$ не может осуществиться. *Соответствие между квантовой и классической теорией лежит не столько в предельном согласии при $h \to 0$, сколько в том, что математические операции обеих теорий подчиняются во многих случаях одинаковым законам.*

Для системы с одной степенью свободы, если положить $p = m\dot{q}$, единственное квантовое условие имеет вид

$$2\pi m (q\dot{q} - \dot{q}q) = ih.$$

Приравнивая диагональный элемент левой части ih, получаем

$$4\pi m \sum_k q(nk)\, q(kn)\, \omega(kn) = h,$$

что эквивалентно квантовому условию Гейзенберга *). Приравнивая остальные элементы левой части нулю, мы получаем новые соотношения, которые не давались теорией Гейзенберга.

Квантовые условия (12) во многих случаях позволяют преодолевать трудности, связанные с выбором порядка сомножителей в уравнениях движения. Порядок сомножителей не является существенным, только за исключением случая, когда перемножаются p_r и q_r, что никогда не имеет места для системы, описываемой потенциальной энергией, зависящей только от переменных q_r, и кинетической энергией, зависящей только от переменных p_r.

Можно отметить, что классическая величина, фигурирующая в теории рассеяния атомами Крамерса и Гейзенберга **), имеет компоненты вида (8) (при $\varkappa_r = J_r$), которые интерпретируются (Крамерсом и Гейзенбергом.— *Перев.*) в квантовой теории способом, находящимся в согласии с излагаемой здесь теорией. Ни одно классическое выражение, содержащее производные, не может быть интерпретировано в квантовой теории, если оно не может быть приведено к виду (8).

§ 5. СВОЙСТВА КВАНТОВЫХ СКОБОК ПУАССОНА

В этом разделе мы выведем некоторые результаты, независимые от предположений о квантовых условиях (11) или (12).

В классической теории скобки Пуассона удовлетворяют тождеству

$$[x, y, z] \equiv [[x, y], z] + [[y, z], x] + [[z, x], y] = 0. \qquad (13)$$

В квантовой теории этот результат, очевидно, правилен, если в качестве переменных x, y и z фигурируют p и q. Из (IA) и (IIA) также следует, что

$$[x_1 + x_2, y, z] = [x_1, y, z] + [x_2, y, z]$$

и

$$[x_1 \cdot x_2, y, z] = x_1 [x_2, y, z] + [x_1, y, z]\, x_2.$$

*) W. Heisenberg, указ. соч., уравнение (16).
**) H. A. Kramers, W. Heisenberg, Zs.Phys.31,681 (1925),формула (18).

Следовательно, тождество (13) должно быть справедливо также и в квантовой теории в том случае, когда x, y и z представимы каким-либо образом в виде сумм и произведений p и q, поэтому оно должно быть справедливо и в общем случае. Заметим, что тождество, аналогичное (13), очевидно, правильно, если скобки Пуассона заменить разностями гейзенберговских произведений $(xy - yx)$, так что никаких противоречий с соотношением (11) не возникает.

Если H — функция Гамильтона системы, то классические уравнения движения могут быть записаны в виде

$$\dot{p}_r = [p_r, \mathrm{H}], \qquad \dot{q}_r = [q_r, \mathrm{H}].$$

Эти уравнения остаются справедливыми и в квантовой теории для систем, в уравнениях движения которых несуществен порядок расположения сомножителей в произведениях. Они также могут считаться справедливыми в случае систем, для которых порядок сомножителей важен, если есть возможность решить вопрос о порядке сомножителей в H. Из законов (IA) и (IIA) следует, что в квантовой теории для любой переменной x имеет место соотношение

$$\dot{x} = [x, \mathrm{H}]. \tag{14}$$

Если A — интеграл движения в квантовой теории, то

$$[\mathrm{A}, \mathrm{H}] = 0.$$

Переменные действия J_r, естественно, должны удовлетворять этому условию. Если A_1 и A_2 — два интеграла движения, то прямым применением тождества (13) получаем

$$[\mathrm{A}_1, \mathrm{A}_2] = \mathrm{const},$$

так же как и в классической теории.

В классической теории условия того, что набор переменных P_r, Q_r является каноническим, имеют вид

$$[\mathrm{Q}_r, \mathrm{Q}_s] = 0, \quad [\mathrm{P}_r, \mathrm{P}_s] = 0, \quad [\mathrm{Q}_r, \mathrm{P}_s] = \delta_{rs}.$$

Эти уравнения могут быть перенесены в квантовую теорию как условия, чтобы квантовые переменные Q_r, P_r были каноническими.

В классической теории можно ввести набор канонических переменных ξ_r, η_r, связанных с переменными действия J_r и угловыми переменными w_r отношениями

$$\xi_r = (2\pi)^{-1/2} J_r^{1/2} \exp[2\pi i w_r], \qquad \eta_r = -i(2\pi)^{-1/2} J_r^{1/2} \exp[-2\pi i w_r].$$

Естественно предположить, что в квантовой теории должен существовать соответствующий набор канонических переменных, каждая из которых имеет только один тип компонент, так что $\xi_r(nm) = 0$, за исключением случая $m_r = n_r - 1$ и $m_s = n_s$ $(s \neq r)$, а $\eta_r(nm) = 0$, за исключением случая $m_r = n_r + 1$ и $m_s = n_s$ $(s \neq r)$. Существование таких переменных можно рассматривать как условие многократной периодичности системы в квантовой теории. Компоненты гейзенберговских произведений переменных ξ_r и η_r удовлетворяют соотношению

$$\xi_r\eta_r(nn) = \xi_r(nm)\,\eta_r(mn) = \eta_r(mn)\,\xi_r(nm) = \eta_r\xi_r(mm), \tag{15}$$

где m и n связаны равенствами $m_r = n_r - 1$, $m_s = n_s$ $(s \neq r)$.

Классические переменные ξ и η удовлетворяют соотношению $\xi_r\eta_r = (-i/2\pi)\,J_r$. Это соотношение не обязательно должно соблюдаться для квантовых величин ξ и η. Квантовое соотношение может иметь, например, вид $\eta_r\xi_r = (-i/2\pi)\,J_r$ или $(\xi_r\eta_r + \eta_r\xi_r)/2 = (-i/2\pi)\,J_r$. Необходимо подробное исследование каждой конкретной динамической системы для выяснения правильного вида этих соотношений. В случае, если правильно последнее соотношение, мы можем ввести новые канонические переменные ξ_r', η_r', определенные равенствами

$$\xi_r' = \frac{\xi_r + i\eta_r}{\sqrt{2}}, \qquad \eta_r' = \frac{i\xi_r + \eta_r}{\sqrt{2}},$$

и тогда получим

$$J_r = \pi(\xi_r'^2 + \eta_r'^2).$$

Именно это соотношение в действительности имеет место для гармонического осциллятора. В общем же случае J_r даже не является обязательно рациональной функцией переменных ξ_r и η_r; такой пример представляет жесткий ротатор, рассмотренный Гейзенбергом.

§ 6. СТАЦИОНАРНЫЕ СОСТОЯНИЯ

Компоненты (nm) произвольной величины C, неизменяющейся со временем, равны нулю, за исключением случая $n = m$. Следовательно, удобно предположить, что каждому набору величин n можно сопоставить определенное состояние атома, как и в теории Бора, так, что каждая величина $C\,(nn)$ относится к определенному состоянию точно таким же образом, как каждая величина, встречающаяся в классической теории, относится к определенной конфигурации. При этом, однако, компоненты изменяющейся во времени величины настолько взаимосвязаны, что невозможно ассоциировать сумму некоторых из них с данным состоянием.

Когда все квантовые величины являются константами движения, соотношение между ними сводится к соотношению между компонентами $C(nn)$, принадлежащими определенному стационарному состоянию n. Это состояние будет таким же, как и в классической теории, при предположении, что классические законы справедливы для описания стационарных состояний; в частности, зависимость энергии от переменных действий J_r будет такой же, как и в классической теории. В этом и заключается оправдание предположения Бора о механической природе стационарных состояний. Следует, однако, отметить, что переменные величины, ассоциируемые со стационарным состоянием в теории Бора, такие как амплитуды и частоты орбитального движения, не имеют физического смысла и никакого значения с математической точки зрения.

Если мы применим основное уравнение (11) к величинам x и H, то с помощью (14) получим

$$x\,(nm)\,\mathrm{H}\,(mm) - \mathrm{H}\,(nn)\,x\,(nm) = \frac{ih}{2\pi}\,\dot{x}\,(nm) = -\frac{h}{2\pi}\omega(nm)\,x\,(nm)$$

или

$$\mathrm{H}\,(nn) - \mathrm{H}\,(mm) = \frac{h}{2\pi}\,\omega\,(nm).$$

Это есть в точности соотношение Бора, связывающее частоты с разностями энергий состояний.

Квантовое условие (11), примененное к введенным выше каноническим переменным ξ_r, η_r, дает

$$\xi_r\eta_r\,(nn) - \eta_r\xi_r\,(nn) = \frac{ih}{2\pi}\,[\xi_r, \eta_r] = \frac{ih}{2\pi}$$

Из этого уравнения и из (15) следует, что

$$\xi_r\eta_r\,(nn) = -\frac{n_r ih}{2\pi} + \mathrm{const}.$$

Физически известно, что атом имеет нормальное состояние, в котором он не излучает. Это обстоятельство учитывается в теории с помощью предположения Гейзенберга, что все амплитуды $C\,(nm)$, имеющие отрицательные n_r или m_r, обращаются в нуль, или скорее не существуют, если за нормальное принято то состояние, для которого каждое из n_r равно нулю. Отсюда вытекает в силу уравнения (15), что $\xi_r\eta_r\,(nn) = 0$ при $n_r = 0$. Следовательно, в общем случае

$$\xi_r\eta_r\,(nn) = -n_r\frac{ih}{2\pi}.$$

Если $\xi_r\eta_r = (-i/2\pi)\,J_r$, то $J_r = nh$. Это есть обычное правило квантования стационарных состояний, так что в данном случае частоты системы совпадают с даваемыми теорией Бора. Если же $(\xi_r\eta_r + \eta_r\xi_r)/2 = (-i/2\pi)\,J_r$, то $J_r = [n + (1/2)]\,h$. Следовательно, в этом случае, вообще говоря, следует использовать полуцелые квантовые числа для получения правильных значений частот по теории Бора *).

До сих пор мы рассматривали только многократно-периодические системы. Однако не видно причин, по которым основные уравнения (11) и (12) нельзя было бы применить также и к непериодическим системам, в которых ни одна из образующих их частиц не уходит на бесконечность, таким, как атом в общем случае. Для такой системы нельзя ожидать, что стационарные состояния могут быть классифицированы, за исключением, возможно, тех случаев, когда имеются четко выделенные периодические движения, и поэтому придется приписывать, произвольным образом, единственное квантовое число n каждому из стационарных состояний. Наши квантовые переменные по-прежнему будут иметь гармонические компоненты, каждая из которых связана с двумя значениями n, а гейзенберговское умножение может быть выполнено так же, как и в рассмотренных выше случаях. Таким образом, не возникнет никакой неоднозначности при интерпретации уравнений (12) или уравнений движения.

Я хотел бы выразить мою благодарность Р. Г. Фаулеру за многие ценные предложения во время написания этой статьи.