

530.145.6

О КВАНТОВОТЕОРЕТИЧЕСКОМ ИСТОЛКОВАНИИ КИНЕМАТИЧЕСКИХ И МЕХАНИЧЕСКИХ СООТНОШЕНИЙ ***)

В. Гейзенберг (Гёттинген)

(Поступило 29 июля 1925 г.)

В этой работе делается попытка получить основы квантовотеоретической механики, которые базируются исключительно на соотношениях между принципиально наблюдаемыми величинами.

Как широко известно, против формальных правил, которые используются в квантовой теории для вычисления наблюдаемых величин (например, энергии водородного атома), выдвигаются серьезные возражения: эти правила содержат в качестве существенной составной части отношения между величинами, которые, по-видимому, принципиально не могут быть наблюдаемы (каковы, например, положение и время обращения электрона). Таким образом, этим правилам явно недостает какого-либо наглядного физического фундамента, если все еще не придерживаться надежды, что такие до сих пор ненаблюдаемые величины, возможно, могут стать доступными эксперименту когда-либо позднее. Такая надежда могла бы считаться правомерной, если бы упомянутые правила были сами по себе последовательны и применимы в какой-либо определенной ограниченной области квантовотеоретических проблем. Но опыт показывает, что эти формальные правила квантовой теории пригодны только для задач об атоме водорода и его эффекте Штарка, но уже в задаче о «скрещенных полях» («gekreuzten Felder») (атом водорода в электрическом и магнитном полях различного направления) появляются фундаментальные трудности, состоящие в том, что взаимодействие атома с периодически меняющимися полями, несомненно, не может удовлетворительно описываться с помощью названных правил и, что, наконец, распространение этих правил на описание атомов со многими электронами оказалось невозможным. Стало обычным считать эти неудачи квантовотеоретических правил, которые ведь по-существу, характеризовались применением классической механики, как отклонение от классической механики. Но данное толкование едва ли оправдано по существу, если вспомнить, что условие частот

*) L. de Broglie, Thèse, Paris, 1924.

**) A. Einstein, Sitzungber. Preuss. Akad. Wiss., 261 (1924); 3 (1925) (см. перевод: А. Эйнштейн, Собрание научных трудов, т. III, М., «Наука», 1966, с. 481, 489.— *Ред.*).

***) W. Heisenberg, Über quantentheoretische Umdeutung kinematischer und mechanischer Beziehungen, Zs. Phys. 33, 879—893 (1925). Перевод С. Г. Суворова.

Эйнштейна — Бора (которое ведь имеет совершенно общее значение) представляет собой столь полный отказ от классической механики, или лучше сказать, исходя из точки зрения волновой теории, отказ от кинематики, лежащей в основе этой механики, что классическую механику безусловно нельзя считать справедливой даже и в простейших квантотеоретических задачах. При таком положении дел кажется разумнее совсем отбросить надежду на возможность наблюдения до сих пор ненаблюдавшихся величин (таких, как положение и время обращения электрона) и таким образом одновременно допустить, что частичное согласие упомянутых квантовых правил с опытом более или менее случайно, и попытаться построить квантотеоретическую механику, аналогичную классической механике, в которую входили бы лишь соотношения между наблюдаемыми величинами. В качестве наиболее важных первых подходов к такой квантотеоретической механике можно рассматривать наряду с условием частот теорию дисперсии Крамерса *) и работы, развитые затем на ее основе **). В последующем мы хотим попытаться выдвинуть некоторые новые квантомеханические соотношения и использовать их для обстоятельного обсуждения некоторых конкретных проблем. При этом мы ограничимся рассмотрением задач с одной степенью свободы.

§ 1. В классической теории излучение движущегося электрона (в волновой зоне, т. е. $\mathcal{E} \sim \mathfrak{H} \sim 1/r$) дается не только выражениями

$$\mathcal{E} = \frac{e}{r^3 c^2} [\mathfrak{r} \dot{\mathfrak{r}} \mathfrak{b}],$$

$$\mathfrak{H} = \frac{e}{r^2 c^2} [\dot{\mathfrak{r}} \mathfrak{b}],$$

но к ним в следующем приближении добавляются еще члены, например, вида

$$\frac{e}{rc^3} \dot{\mathfrak{b}} \mathfrak{b},$$

которые могут толковаться как «квадрупольное излучение», а в еще более высоком приближении члены, например, вида

$$\frac{e}{rc^4} \dot{\mathfrak{b}} \mathfrak{b}^2,$$

и таким путем достигается сколь угодно большое приближение. (В предыдущем обозначено: $\mathcal{E}$, $\mathfrak{H}$ — напряженности поля в начальной точке, e — заряд электрона, $\mathfrak{r}$ — расстояние электрона от начальной точки, $\mathfrak{b}$ — скорость электрона.)

Могут спросить, как можно рассматривать в квантовой теории эти члены высших порядков? Поскольку в классической теории более высокие приближения возможно рассчитать просто, если задано движение электрона или его фурье-образ, то и в квантовой теории можно ожидать нечто подобное. Этот вопрос не имеет ничего общего с электродинамикой, но он имеет — и это нам представляется особенно важным — чисто кинематическую природу. Мы могли бы сформулировать его в простейшей форме следующим образом: пусть дана квантотеоретическая величина, становящаяся на место классической величины $x(t)$; какая квантотеоретическая величина становится тогда на место $x^2(t)$?

*) H. A. K r a m e r s, Nature 113, 673 (1924).

**) M. B o r n, Zs. Phys. 26, 379 (1924); H. A. K r a m e r s, W. H e i s e n b e r g, ibid. 31, 681 (1925); M. B o r n, P. J o r d a n, ibid. 34, 858 (перевод публикуется в данном выпуске, с. 586.—Ред.).

Прежде чем ответить на этот вопрос, мы должны напомнить о том, что в квантовой теории невозможно с помощью наблюдаемых величин сопоставить электрону точку в пространстве как функцию времени. Но и в квантовой теории электрону вполне можно сопоставить излучение; это излучение будет описываться, во-первых, посредством частот, которые выступают как функции двух переменных; квантотеоретически они описываются в форме

$$\nu(n, n-\alpha) = \frac{1}{h} \{W(n) - W(n-\alpha)\},$$

а в классической теории — в форме

$$\nu(n, \alpha) = \alpha \nu(n) = \alpha \frac{1}{h} \frac{dW}{dn}$$

(здесь положено, что $nh = J$, т. е. равно одной из канонических констант).

Для сравнения классической и квантовой теорий можно выписать характерные для них комбинационные соотношения частот:

классически

$$\nu(n, \alpha) + \nu(n, \beta) = \nu(n, \alpha + \beta),$$

квантотеоретически

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

или

$$\nu(n-\beta, n-\alpha-\beta) + \nu(n, n-\beta) = \nu(n, n-\alpha-\beta).$$

Во-вторых, для описания излучения наряду с частотами необходимы и амплитуды: амплитуды могут пониматься как комплексные векторы (по шесть независимых определяющих отрезков для каждого) и определяют поляризацию и фазу. Они также являются функциями двух переменных n и α , так что соответствующая часть излучения будет представляться следующим выражением:

квантотеоретически

$$\operatorname{Re} \{ \mathfrak{A}(n, n-\alpha) e^{i\omega(n, n-\alpha)t} \}, \quad (1)$$

классически

$$\operatorname{Re} \{ \mathfrak{A}_\alpha(n) e^{i\omega(n)\alpha t} \}, \quad (2)$$

Сперва кажется, что в квантовой теории эта фаза (содержащаяся в $\mathfrak{A}$) не поддается физическому истолкованию, так как частоты в квантовой теории в общем случае несоизмеримы с их обертонами. Но мы тотчас же увидим, что и в квантовой теории фаза имеет определенный смысл, аналогичный смыслу ее в классической теории. Определенную величину $x(t)$ в классической теории можно мыслить представленной в виде совокупности величин вида

$$\mathfrak{A}_\alpha(n) e^{i\omega(n)\alpha t},$$

которые, смотря по тому, является ли движение периодическим или нет, представляют $x(t)$ в виде суммы или интеграла:

$$x(n, t) = \sum_{-\infty}^{+\infty} \mathfrak{A}_\alpha(n) e^{i\omega(n)\alpha t} \quad (2a)$$

или

$$x(n, t) = \int_{-\infty}^{+\infty} \mathfrak{A}_\alpha(n) e^{i\omega(n)\alpha t} d\alpha.$$

Подобное объединение соответствующих квантовотеоретических величин вследствие равноправности величин $n, n - \alpha$ представляется невозможным без произвола и потому неразумным, а вот совокупность величин

$$\mathfrak{A}(n, n - \alpha) e^{i\omega(n, n - \alpha)t}$$

можно рассматривать как представителя величины $x(t)$, и тогда можно попытаться ответить на поставленный выше вопрос: как могут быть представлены величины $x^2(t)$?

Очевидно, что классически ответ гласит так:

$$\mathfrak{B}_\beta(n) e^{i\omega(n)\beta t} = \sum_{-\infty}^{+\infty} \mathfrak{A}_\alpha \mathfrak{A}_{\beta-\alpha} e^{i\omega(n)(\alpha+\beta-\alpha)t} \quad (3)$$

или

$$= \int_{-\infty}^{+\infty} \mathfrak{A}_\alpha \mathfrak{A}_{\beta-\alpha} e^{i\omega(n)(\alpha+\beta-\alpha)t} d\alpha; \quad (4)$$

при этом тогда

$$x^2(t) = \sum_{-\infty}^{+\infty} \mathfrak{B}_\beta(n) e^{i\omega(n)\beta t} \quad (5)$$

или

$$= \int_{-\infty}^{+\infty} \mathfrak{B}_\beta(n) e^{i\omega(n)\beta t} d\beta. \quad (6)$$

Квантовотеоретически наиболее простым и естественным кажется такой прием, когда соотношения (3) и (4) заменяются следующими:

$$\mathfrak{B}(n, n - \beta) e^{i\omega(n, n - \beta)t} = \sum_{-\infty}^{+\infty} \mathfrak{A}(n, n - \alpha) \mathfrak{A}(n - \alpha, n - \beta) e^{i\omega(n, n - \beta)t} \quad (7)$$

или

$$= \int_{-\infty}^{+\infty} d\alpha \mathfrak{A}(n, n - \alpha) \mathfrak{A}(n - \alpha, n - \beta) e^{i\omega(n, n - \beta)t}, \quad (8)$$

притом вид этого выражения получается почти принудительно из комбинационных соотношений частот. Если сделать эти допущения (7) и (8), то видно, что фазы квантовотеоретического $\mathfrak{A}$ имеют такой же большой физический смысл, как и фазы в классической теории: только начальный момент времени, и поэтому фазовая константа, *общая* для всех $\mathfrak{A}$, произвольна и не имеет физического смысла; однако фазы *отдельных* $\mathfrak{A}$ существенно входят в величины $\mathfrak{B}$ *). Геометрическая интерпретация таких фазовых квантовотеоретических соотношений, по аналогии с классической теорией, сперва кажется едва ли возможной.

*) Ср. также: H. A. K r a m e r s, W. H e i s e n b e r g, указ. соч. В использованное там выражение для индуцированного рассеивающего момента существенным образом входят фазы.

Если мы зададим затем вопрос о представителе величины $x^3(t)$, то без труда найдем:

классически

$$\mathfrak{E}(n, \gamma) = \sum_{-\infty}^{+\infty} \sum_{-\infty}^{+\infty} \mathfrak{A}_{\alpha}^{\gamma, \beta} \mathfrak{A}_{\alpha}(n) \mathfrak{A}_{\beta}(n) \mathfrak{A}_{\gamma-\alpha-\beta}(n), \quad (9)$$

квантовотеоретически

$$\mathfrak{E}(n, n-\gamma) = \sum_{-\infty}^{+\infty} \sum_{-\infty}^{+\infty} \mathfrak{A}(n, n-\alpha) \mathfrak{A}(n-\alpha, n-\alpha-\beta) \mathfrak{A}(n-\alpha-\beta, n-\gamma) \quad (10)$$

или соответствующие интегралы.

Подобным же образом могут быть представлены квантовотеоретически все величины вида $x^n(t)$, и когда задана какая-либо функция $f[x(t)]$, то, очевидно, всегда может быть найдена квантовотеоретическая аналогия этой функции, если она разложима в степенной ряд относительно x . Однако возникает существенная трудность, когда мы рассматриваем две функции $x(t)$, $y(t)$ и задаем вопрос о произведении $x(t)y(t)$.

Пусть $x(t)$ характеризуется посредством $\mathfrak{A}$, а $y(t)$ — посредством $\mathfrak{B}$; тогда для представления произведения $x(t)y(t)$ получается:

классически

$$\mathfrak{E}_{\beta}(n) = \sum_{-\infty}^{+\infty} \mathfrak{A}_{\alpha}(n) \mathfrak{B}_{\beta-\alpha}(n),$$

квантовотеоретически

$$\mathfrak{E}(n, n-\beta) = \sum_{-\infty}^{+\infty} \mathfrak{A}(n, n-\alpha) \mathfrak{B}(n-\alpha, n-\beta).$$

В то время как классически $x(t) \cdot y(t)$ всегда равно $y(t)x(t)$, в квантовой теории это в общем случае не имеет места. В особых случаях, например для выражения $x(t)x^2(t)$, эта трудность не возникает.

Если вопрос, поставленный в начале этого параграфа, будет отнесен к выражениям вида

$$v(t) \dot{v}(t),$$

то квантовотеоретически следует заменить $v\dot{v}$ через $(v\dot{v} + \dot{v}v)/2$, чтобы $v\dot{v}$ получилось, как производная от $v^2/2$. Точно так же всегда могут быть естественным образом заданы квантовотеоретические средние значения, которые, конечно, еще более гипотетичны, чем формулы (7) и (8).

Если отвлечься от только что описанных трудностей, то формулы типа (7) и (8) должны быть вообще достаточны, чтобы выразить взаимодействия электронов в атоме с помощью характеристических амплитуд электронов.

§ 2. После этих соображений, которые касались кинематики квантовой теории, мы перейдем теперь к механической проблеме, имея в виду определение $\mathfrak{A}$, ν , W по заданным силам в системе. В существовавшей до сих пор теории эта проблема решалась в две ступени:

1. Интегрированием уравнения движения

$$\ddot{x} + f(x) = 0. \quad (11)$$

2. Определением константы периодического движения при помощи

$$\oint p \, dq = \oint m \dot{x} \, dx = J (= nh). \quad (12)$$

Если намереваются построить квантовотеоретическую механику, возможно более аналогичную классической, то очень напрашивается мысль перенести непосредственно уравнение движения (11) в квантовую теорию, при этом только необходимо, чтобы не уклоняться от надежного фундамента принципиально наблюдаемых величин — заменить величины $\ddot{x}$, $\ddot{f}(x)$ их квантовотеоретическими представителями, известными из § 1. В классической теории возможно искать решение (11) путем разложения x в ряд Фурье или интеграл Фурье с неопределенными коэффициентами (и частотами); правда, мы получаем тогда, вообще говоря, бесконечно много уравнений с бесконечно многими неизвестными или соответственно интегральные уравнения, которые только в особых случаях преобразуются к простейшим рекурсионным формулам для $\mathcal{H}$. Однако в квантовой теории мы пока вынуждены ограничиться этим видом решения (11), поскольку, как сказано выше, нельзя определить никакой квантовотеоретической функции, непосредственно аналогичной функции $x(n, t)$.

Это приводит прежде всего к тому, что квантовотеоретическое решение (11) осуществимо только в простейших случаях. Прежде чем мы обратимся к подобным простым примерам, следует еще вывести квантовотеоретическое определение константы согласно (12). Таким образом, мы принимаем, что движение (классическое) периодически:

$$x = \sum_{-\infty}^{+\infty} a_{\alpha}(n) e^{i\alpha\omega_n t}; \quad (13)$$

тогда

$$m\dot{x} = m \sum_{-\infty}^{+\infty} \dot{a}_{\alpha}(n) i\alpha\omega_n e^{i\alpha\omega_n t}$$

и

$$\oint m\dot{x} dx = \oint m\dot{x}^2 dt = 2\pi m \sum_{-\infty}^{+\infty} a_{\alpha}(n) a_{-\alpha}(n) \alpha^2 \omega_n.$$

Так как далее $a_{-\alpha}(n) = \overline{a_{\alpha}(n)}$ (x должно быть действительным), то следует

$$\oint m\dot{x}^2 dt = 2\pi m \sum_{-\infty}^{+\infty} |a_{\alpha}(n)|^2 \alpha^2 \omega_n. \quad (14)$$

Этот фазовый интеграл до сих пор обычно приравнивали целому кратному h , следовательно, полагали равным nh . Однако такое условие не только включается лишь весьма искусственно в механический расчет; оно кажется произвольным даже с прежней точки зрения, исходя из смысла принципа соответствия, потому что в силу соответствия величины J определяются как целые кратные h только с точностью до аддитивной константы, и на место (14) естественно должно было бы встать

$$\frac{d}{dn}(nh) = \frac{d}{dn} \oint m\dot{x}^2 dt,$$

т. е.

$$h = 2\pi m \sum_{-\infty}^{+\infty} \alpha \frac{d}{dn} (\alpha \omega_n |a_{\alpha}|^2). \quad (15)$$

Конечно, и тогда такое условие определяет величины a_α только с точностью до константы, и эта неопределенность приводила к трудностям в связи с эмпирическим появлением половинных квантовых чисел.

Если же мы отыскиваем квантовотеоретическое соотношение между наблюдаемыми величинами, соответствующее (14) и (15), то исчезнувшая однозначность опять восстанавливается сама собой.

А именно, хотя только уравнение (15) допускает простую квантовотеоретическую перестройку, связанную с теорией дисперсии Крамерса *):

$$\hbar = 4\pi m \sum_0^\infty \{ |a(n, n+\alpha)|^2 \omega(n, n+\alpha) - |a(n, n-\alpha)|^2 \omega(n, n-\alpha) \}, \quad (16)$$

все же этого соотношения здесь достаточно для однозначного определения a ; это потому, что прежде неопределенная константа в величинах a определяется сама собой в силу условия, что должно иметься нормальное состояние, в котором уже отсутствует какое-либо излучение. Пусть нормальное состояние обозначается через n_0 , тогда все

$$a(n_0, n_0 - \alpha) = 0 \quad (\text{для } \alpha > 0).$$

Поэтому вопрос о полупелом или целочисленном квантовании в квантовотеоретической механике, которая применяет соотношения только между наблюдаемыми величинами, не может возникнуть.

Уравнения (11) и (16) совместно содержат, если они допускают решение, полное определение не только частот и энергий, но и квантовотеоретических вероятностей переходов. Однако реальный математический расчет осуществим прежде всего только в простейших случаях: особое осложнение возникает для многих систем, например, для атома водорода, благодаря тому, что решения соответствуют отчасти периодическим, а отчасти аperiодическим движениям; результатом этого является то, что квантовотеоретические ряды (7) и (8), и уравнение (16) всегда распадаются на сумму и интеграл. Квантовомеханически разделение на «периодическое и аperiодическое движения» в общем случае не удастся произвести.

Несмотря на это, уравнения (11) и (16) возможно было бы рассматривать, по крайней мере принципиально, как удовлетворительное решение механических проблем, если бы можно было показать, что эти решения совпадают или не стоят в противоречии с известными до сих пор квантовомеханическими соотношениями; что, следовательно, небольшое возмущение механической задачи приводит к дополнительным членам в выражениях для энергии и соответственно для частот, которые как раз соответствуют выражениям, найденным Крамерсом и Борном, в противоположность тем, которые давала бы классическая теория. Далее нужно было бы исследовать, соответствует ли в общем случае уравнению (11) интеграл энергии $m(\dot{x}^2/2) + U(x) = \text{const}$ также и в предложенной здесь квантовотеоретической трактовке, а также удовлетворяет ли полученная таким образом энергия условию $\Delta W = \hbar\nu$, подобно тому, как классически имеет место $\nu = \partial W / \partial J$. Только общий ответ на эти вопросы мог бы раскрыть внутреннюю связь имеющегося до сих пор квантовомеханического опыта и привести к последовательной квантовой механике, оперирующей только с наблюдаемыми величинами. Не касаясь вопроса об общей связи между дисперсионной формулой Крамерса и уравнениями (11) и (16), мы можем

*) Это соотношение было уже дано на основе рассмотрения дисперсии В. Куном (Zs. Phys. 33, 408 (1925)) и В. Томасом (Naturwissenschaften 13, 627 (1925)).

ответить на поставленные выше вопросы только в совершенно специальных случаях, которые могут быть разрешимы с помощью простых рекурсионных соотношений.

Такая общая связь между теорией дисперсии Крамерса и нашими уравнениями (11), (16) состоит в том, что из уравнения (11) (т. е. из его квантово-теоретической аналогии), так же как и в классической теории, следует, что колеблющийся электрон ведет себя по отношению к свету, который является гораздо более коротковолновым, чем все собственные колебания системы, как свободный электрон. Этот результат следует и из теории Крамерса, если учесть еще уравнение (16). В самом деле, Крамерс находит для момента, индуцированного волной $E \cos 2\pi\nu t$,

$$M = e^2 E \cos 2\pi\nu t \cdot \frac{2}{h} \sum_0^{+\infty} \alpha \left\{ \frac{|a(n, n+\alpha)|^2 \nu(n, n+\alpha)}{\nu^2(n, n+\alpha) - \nu^2} - \frac{|a(n, n-\alpha)|^2 \nu(n, n-\alpha)}{\nu^2(n, n-\alpha) - \nu^2} \right\};$$

следовательно, для $\nu \gg \nu(n, n+\alpha)$

$$M = -\frac{2Ee^2 \cos 2\pi\nu t}{\nu^2 h} \sum_0^{+\infty} \alpha \{ |a(n, n+\alpha)|^2 \nu(n, n+\alpha) - \\ - |a(n, n-\alpha)|^2 \nu(n, n-\alpha) \},$$

что ввиду (16) переходит в

$$M = -\frac{e^2 E \cos 2\pi\nu t}{\nu^2 \cdot 4\pi^2 m}.$$

§ 3. В качестве простейшего примера рассмотрим в дальнейшем ангармонический осциллятор:

$$\ddot{x} + \omega_0^2 x + \lambda x = 0. \quad (17)$$

В классической физике это уравнение удовлетворяется выражением вида

$$x = \lambda a_0 + a_1 \cos \omega t + \lambda a_2 \cos 2\omega t + \lambda^2 a_3 \cos 3\omega t + \dots + \lambda^{\tau-1} a_\tau \cos \tau \omega t,$$

где величины a представляют степенные ряды по λ , которые начинаются с члена, не содержащего λ . Квантово-теоретически мы испробуем аналогичное выражение и представим x в виде членов, имеющих форму

$$\lambda a(n, n), a(n, n-1) \cos \omega(n, n-1)t, \lambda a(n, n-2) \cos \omega(n, n-2)t, \\ \dots \lambda^{\tau-1} a(n, n-\tau) \cos \omega(n, n-\tau)t \dots$$

Рекурсионные формулы для определения величин a и ω гласят (с точностью до членов порядка λ), согласно уравнениям (3), (4) или соответственно (7), (8):

$$\left. \begin{array}{l} \text{классически} \\ \omega^2 a_0(n) + \frac{a_1^2(n)}{2} = 0, \\ -\omega^2 + \omega_0^2 = 0, \\ (-4\omega^2 + \omega_0^2) a_2(n) + \frac{a_1^2}{2} = 0, \\ (-9\omega^2 + \omega_0^2) a_3(n) + a_1 a_2 = 0, \\ \dots \dots \dots \end{array} \right\} \quad (18)$$

$$\left. \begin{aligned}
 &\text{квантовотеоретически} \\
 &\omega_0^2 a_0(n) + \frac{a^2(n+1, n) + a^2(n, n-1)}{4} = 0, \\
 &\quad -\omega^2(n, n-1) + \omega_0^2 = 0, \\
 &[-\omega^2(n, n-2) + \omega_0^2] a(n, n-2) + \frac{a(n, n-1) a(n-1, n-2)}{2} = 0, \\
 &[-\omega^2(n, n-3) + \omega_0^2] a(n, n-3) + \frac{a(n, n-1) a(n-1, n-3)}{2} + \\
 &\quad + \frac{a(n, n-2) a(n-2, n-3)}{2} = 0, \\
 &\dots\dots\dots
 \end{aligned} \right\} \quad (19)$$

К этому добавляется квантовое условие ($J = nh$):

$$\begin{aligned}
 &\text{классически} \\
 &1 - 2\pi m \frac{d}{dJ} \sum_{-\infty}^{+\infty} \tau^2 \frac{|a_\tau|^2 \omega}{4}, \\
 &\text{квантовотеоретически} \\
 &h = \pi m \sum_0^\infty \{ |a(n+\tau, n)|^2 \omega(n+\tau, n) - |a(n, n-\tau)|^2 \omega(n, n-\tau) \}.
 \end{aligned}$$

Это дает в первом приближении, как классически, так и квантовотеоретически:

$$a_1^2(n) \text{ соответственно } a^2(n, n-1) = \frac{(n + \text{const}) h}{\pi m \omega_0}. \quad (20)$$

Квантовотеоретически константу в (20) можно определить при наличии условия, что $a(n, n-1)$ в нормальном состоянии должно равняться нулю. Перенумеровав величины n так, что в нормальном состоянии n будет равно нулю, т. е. $n_0 = 0$, получим

$$a^2(n, n-1) = \frac{n\hbar}{\pi m \omega_0}.$$

Тогда из рекурсионных уравнений (18) следует, что в классической теории a_τ (в первом приближении по λ) будет иметь вид $\kappa(\tau) n^{\tau/2}$, где $\kappa(\tau)$ представляет множитель, независимый от n . В квантовой теории из (19) получается

$$a(n, n-\tau) = \kappa(\tau) \sqrt{\frac{n!}{(n-\tau)!}}, \quad (21)$$

причем $\kappa(\tau)$ представляет собой тот же коэффициент пропорциональности, независимый от n . Для больших значений n квантовотеоретическое значение a_τ , разумеется, асимптотически переходит в классическое.

Для энергии естественно испробовать классическое выражение

$$\frac{mx^2}{2} + m\omega_0^2 \frac{x^2}{2} + \frac{m\lambda}{3} x^3 = W,$$

которое в вычисляемом здесь приближении является действительно постоянным также и квантовомеханически и, согласно (19), (20) и (21), имеет значение

$$\begin{aligned}
 &\text{классически} \\
 &W = \frac{n\hbar\omega_0}{2\pi}, \quad (22)
 \end{aligned}$$

квантовотеоретически (согласно (7), (8))

$$W = \frac{[n + (1/2)] \hbar \omega_0}{2\pi} \quad (23)$$

(с точностью до величин порядка λ^2).

Таким образом, согласно этому толкованию, уже для гармонического осциллятора энергия не может быть выражена посредством «классической механики», т. е. уравнением (22), а она имеет вид (23).

Более точное вычисление также и более высоких приближений для W , а. ω будет выполнено на более простом примере аугармонического осциллятора типа

$$\ddot{x} + \omega_0^2 x + \lambda x^3 = 0.$$

Классически здесь можно положить

$$x = a_1 \cos \omega t + \lambda a_3 \cos 3\omega t + \lambda^2 a_5 \cos 5\omega t + \dots,$$

аналогично мы испробуем квантовое выражение

$$a(n, n-1) \cos \omega(n, n-1)t, \lambda a(n, n-3) \cos \omega(n, n-3)t, \dots$$

Величины a опять представляют степенные ряды по λ , первый член которых, как и в (21), имеет вид

$$a(n, n-\tau) = \kappa \tau \sqrt{\frac{n!}{(n-\tau)!}}.$$

как это получается путем вычисления из уравнений, соответствующих уравнениям (18), (19).

Если провести вычисление ω , a согласно (18), (19) (с приближением до λ^2 или соответственно λ), то получается

$$\omega(n, n-1) = \omega_0 + \lambda \cdot \frac{3nh}{8\pi\omega_0^3 m} - \lambda^2 \cdot \frac{3h^2}{256\omega_0^3 m^2 \pi^2} (17n^2 + 7) + \dots, \quad (24)$$

$$a(n, n-1) = \sqrt{\frac{nh}{\pi\omega_0 m}} \left(1 - \lambda \frac{3nh}{16\pi\omega_0^3 m} + \dots \right), \quad (25)$$

$$a(n, n-3) = \frac{1}{32} \sqrt{\frac{h^3}{\pi^3\omega_0^3 m^3} n(n-1)(n-2)} \left(1 - \lambda \frac{39(n-1)h}{32\pi\omega_0^3 m} \right). \quad (26)$$

Энергия, которая определяется как постоянный член в выражении

$$m \frac{\dot{x}^2}{2} + m\omega_0^2 \frac{x^2}{2} + \frac{m\lambda}{4} x^4$$

(что все периодические члены действительно равны нулю, я не смог доказать в общем виде, но для вычисленных членов это имело место), приводится к выражению

$$W = \frac{[n + (1/2)] \hbar \omega_0}{2\pi} + \lambda \cdot \frac{3[n^2 + n + (1/2)] \hbar^2}{8 \cdot 4\pi^2 \omega_0^3 m} - \lambda^2 \cdot \frac{\hbar^3}{512\pi^3 \omega_0^3 m^2} \left(17n^3 + \frac{51}{2}n^2 + \frac{59}{2}n + \frac{21}{2} \right). \quad (27)$$

Эта энергия может быть вычислена также и по методу Крамерса — Борна, рассматривая член $(m\lambda/4)x^4$ в качестве члена, возмущающего гармонический осциллятор. В этом случае мы действительно опять приходим как раз к результату (27), что мне представляется замечательным подтверждением положенных в основу квантовомеханических уравнений. Далее, рассчитанная согласно (27) энергия удовлетворяет формуле

(ср. с (24))

$$\frac{\omega(n, n-1)}{2\pi} = \frac{1}{h} [W(n) - W(n-1)],$$

которая должна рассматриваться также и как необходимое условие для возможности определения вероятностей переходов, соответствующих уравнениям (11) и (16).

В заключение приведем в качестве примера ротатор и укажем на связь уравнений (7), (8) с формулами интенсивностей для эффекта Зеемана *) и для мультиплетов **).

Пусть ротатор представляется электроном, который вращается вокруг ядра на постоянном расстоянии a . Тогда «уравнения движения» как классически, так и квантотеоретически означают только, что электрон совершает вокруг ядра на постоянном от него расстоянии a равномерное вращение в плоскости с угловой скоростью ω . «Квантовое условие» (16) дает, согласно (12),

$$h = \frac{d}{dn} (2\pi m a^2 \omega),$$

согласно (16),

$$h = 2\pi m \{a^2 \omega (n+1, n) - a^2 \omega (n, n-1)\},$$

откуда в обоих случаях следует

$$\omega(n, n-1) = \frac{h(n + \text{const})}{2\pi m a^2}.$$

То условие, что в нормальном состоянии ($n_0 = 0$) излучение должно исчезать, ведет к формуле

$$\omega(n, n-1) = \frac{hn}{2\pi m a^2}. \quad (28)$$

Энергия будет

$$W = \frac{m}{2} v^2,$$

или, согласно (7), (8),

$$W = \frac{m}{2} a^2 \frac{\omega^2(n, n-1) + \omega^2(n+1, n)}{2} = \frac{h^2}{8\pi^2 m a^2} \left(n^2 + n + \frac{1}{2} \right), \quad (29)$$

что снова удовлетворяет соотношению

$$\omega(n, n-1) = \frac{2\pi}{h} [W(n) - W(n-1)].$$

В качестве подтверждения формул (28) и (29), отклоняющихся от прежних обычных теорий, можно считать то, что, по-видимому, многие полосатые спектры (в том числе и такие, для которых существование электронного момента импульса не является вероятным) требуют, согласно Кратцгеру***), формул типа (28), (29) (которые до сих пор классические механические теории пытались объяснить квантованием с полуцелыми числами).

Чтобы прийти к формулам Гаудсмита — Кронига — Хёня для ротатора, мы должны покинуть область задач с одной степенью свободы и принять, что в каком-то направлении в пространстве ротатор совершает

*) S. Goudsmit, R. de L. Kronig, Naturwissenschaften 13, 90 (1925); H. Hönig, Zs. Phys. 31, 340 (1925).

**) R. de L. Kronig, ibid., S. 885; A. Sommerfeld, H. Hönig, Sitzungber. Preuss. Akad. Wiss., 141 (1925); H. N. Russell, Nature 115, 835 (1925).

***) Ср., например: B. A. Kratzer, Sitzungber. Bayer. Akad. Wiss., 107 (1922).

очень медленную прецессию ϕ вокруг оси z внешнего поля. Квантовое число, соответствующее этой прецессии, обозначим через m . Тогда движение представляется величинами:

$$\begin{aligned} z: a(n, n-1; m, m) \cos \omega(n, n-1)t, \\ x + iy: b(n, n-1; m, m-1) e^{i[\omega(n, n-1)+\phi]t}, \\ b(n, n-1; m-1, m) e^{i[-\omega(n, n-1)+\phi]t}. \end{aligned}$$

Уравнения движения напишутся просто:

$$x^2 + y^2 + z^2 = a^2,$$

что согласно (7) приводит к уравнениям *)

$$\begin{aligned} \frac{1}{2} \left\{ \frac{1}{2} a^2(n, n-1; m, m) + b^2(n, n-1; m, m-1) + b^2(n, n-1; m, m+1) + \right. \\ \left. + \frac{1}{2} a^2(n+1, n; m, m) + b^2(n+1, n; m-1, m) + b^2(n+1, n; m+1, m) \right\}, \end{aligned} \quad (30)$$

$$\begin{aligned} \frac{1}{2} a(n, n-1; m, m) a(n-1, n-2; m, m) = \\ = b(n, n-1; m, m+1) b(n-1, n-2; m+1, m) + \\ + b(n, n-1; m, m-1) b(n-1, n-2; m-1, m). \end{aligned} \quad (31)$$

К этому добавляется, согласно (16), квантовое условие

$$2\pi m \{ b^2(n, n-1; m, m-1) \omega(n, n-1) - b^2(n, n-1; m-1, m) \omega(n, n-1) \} = (m + \text{const}) h. \quad (32)$$

Соответствующие этим уравнениям классические соотношения

$$\left. \begin{aligned} \frac{1}{2} a_0^2 + b_1^2 + b_{-1}^2 &= a^2, \\ \frac{1}{4} a_0^2 &= b_1 b_{-1}, \\ 2\pi m (b_{+1}^2 - b_{-1}^2) \omega &= (m + \text{const}) h \end{aligned} \right\} \quad (33)$$

достаточны (с точностью до неопределенной константы при m) для однозначного определения a_0 , b_1 , b_{-1} .

Наиболее простое из возможных решений квантовотеоретических уравнений (30), (31), (32) гласит

$$\begin{aligned} b(n, n-1; m, m-1) &= a \sqrt{\frac{(n+m+1)(n+m)}{4 \left(n + \frac{1}{2}\right) n}}, \\ b(n, n-1; m-1, m) &= a \sqrt{\frac{(n-m)(n-m+1)}{\left(n + \frac{1}{2}\right) n}}, \\ a(n, n-1; m, m) &= a \sqrt{\frac{(n+m+1)(n-m)}{\left(n + \frac{1}{2}\right) n}}. \end{aligned}$$

*) Уравнение (30) в основном идентично с правилом сумм Орнштейна — Бюргера.

Эти выражения совпадают с формулами Гаудсмита, Кронига и Хёня; однако нельзя увидеть простым образом, что эти выражения представляют собой *единственные* решения (30), (31), (32), что мне все же представляется вероятным, учитывая граничные условия (обращение в нуль a , b на «границе», ср. цитированные выше работы Кронига, Зоммерфельда и Хёня, Рассела).

Рассмотрение, аналогичное изложенному здесь, приводит к результату также и для формул интенсивностей для мультиплетов, что данные правила интенсивностей находятся в согласии с уравнениями (7) и (16). Этот результат снова должен рассматриваться как подтверждение справедливости, в частности, кинематического уравнения (7).

Можно ли метод определения квантотеоретических данных на основе соотношений между наблюдаемыми величинами, подобный предложенному здесь, уже считать в принципе удовлетворительным, или же этот метод все еще представляет собой слишком грубый подход к физической. с самого начала явно очень сложной проблеме квантотеоретической механики,— это станет ясным только после глубокого математического исследования метода, примененного здесь лишь очень поверхностно.

Гёттинген,
Институт теоретической физики