5.0.145.6

# О КВАНТОВОЙ МЕХАНИКЕ *)

*М. Борн, П. Иордан* (Гёттинген)

(Поступило 27 сентября 1925 г.)

Высказанные недавно Гейзенбергом предположения (прежде всего для системы с одной степенью свободы) развиваются в настоящей статье до систематической теории квантовой механики. Математическим аппаратом является матричное исчисление. После его краткого изложения выводятся уравнения движения механики из вариационного принципа и доказывается, что из уравнений механики на основе квантовых условий Гейзенберга следует закон сохранения энергии и условие частоты Бора. На примере ангармонического осциллятора обсуждается вопрос об однозначности решения и о значении фаз в парциальных колебаниях. В заключение делается попытка охватить новой теорией законы электромагнитного поля.

Введение. Недавно Гейзенберг опубликовал в этом журнале статью **), в которой изложил подход к новой кинематике и механике, отражающий основные требования квантовой теории. Нам представляется, что этот подход имеет огромное значение. Он означает попытку выразить новые факты не с помощью более или менее искусственной и вынужденной подгонки старых привычных понятий, а путем создания новой, действительно приспособленной системы понятий. Гейзенберг изложил идеи, которыми он руководствовался, в столь ясной форме, что всякое дополнительное замечание кажется излишним. Но в формально-математическом отношении его рассуждения, как это он сам подчеркивал, находятся только в начальной стадии. Он пояснил свои гипотезы только на

---

*) M. Born, P. Jordan, Zur Quantenmechanik, Zs. Phys. **34**, 858—888 (1925). Перевод С. Г. Суворова.

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

простых примерах и не пришел к общей теории. В силу того благоприятного объстоятельства, что мы могли познакомиться с его соображениями уже in statu nascendi (в процессе зарождения.— *Перев.*), мы постарались после завершения его исследования выяснить формально-математическое содержание его подхода и предлагаем здесь некоторые наши результаты. Они показывают, что действительно можно на фундаменте, данном Гейзенбергом, возвести здание замкнутой математической теории квантовой механики, в замечательно тесной аналогии с классической механикой, однако при сохранении черт, характерных для квантовых явлений.

Как и Гейзенберг, мы сначала ограничиваемся рассмотрением систем с *одной степенью свободы*, о которых мы предполагаем, что они, выражаясь классическим языком, *периодичны*. Обобщением математической теории на системы со сколь угодно многими степенями свободы и на апериодические движения мы займемся отдельно, в виде продолжения этой статьи. В существенном обобщении гейзенберговского подхода мы не ограничиваемся ни рассмотрением нерелятивистской механики, ни вычислением в декартовых координатах. Единственное ограничение, которое мы налагаем на координаты, состоит в том, что наши выводы относятся к *либрационным координатам*, которые в классической теории являются *периодическими* функциями времени. Конечно, во многих случаях кажется более простым использовать другие координаты, например, для ротатора — угол вращения $\varphi$, являющийся линейной функцией времени. Так поступал и Гейзенберг в своем рассмотрении ротатора, однако это оставляет нерешенным вопрос о том, будет ли примененный при этом метод справедлив с точки зрения последовательной квантовой механики.

Математической основой гейзенберговского рассмотрения является закон *перемножения* квантовотеоретических величин, который он открыл с помощью остроумного метода соответствия. Развитие его формализма, которое мы здесь излагаем, основано на замечании, что это правило перемножения есть не что иное, как хорошо известный математикам закон *перемножения матриц*. Бесконечная квадратная, соответственно двум измерениям, схема (с индексами, изменяющимися дискретно или непрерывно), так называемая *матрица*, является представителем физической величины, которая в классической теории задается как функция времени. Математический метод новой квантовой механики поэтому характеризуется применением *матричного анализа* вместо обычного численного анализа.

Этим методом мы рассмотрим здесь простейшие вопросы механики и электродинамики. Подсказанный методом соответствия *вариационный принцип* для наиболее общей гамильтоновой функции приводит к *уравнениям движения* в тесной аналогии с классическими каноническими уравнениями. Квантовые условия, в сочетании с соотношением, вытекающим из уравнений движения, допускают простой способ матричной записи. С его помощью удается провести доказательство общей справедливости *закона сохранения энергии* и *условия частот Бора* в смысле, который предполагал Гейзенберг, доказательство, которое он не смог провести полностью и для простых рассмотренных им примеров. К одному из этих примеров мы потом возвращаемся и разбираем его более подробно, чтобы получить представление о той роли, которую играют в новой теории фазы парциальных колебаний. В заключение мы показываем, что и основные законы электромагнитного поля в вакууме непринужденно подчиняются новому методу, и даем обоснование допущения, сделанного Гейзенбергом, что квадраты значений элементов матрицы, представляющей электрический момент атома, являются мерой для вероятностей переходов.

## I. МАТРИЧНОЕ ИСЧИСЛЕНИЕ

§ 1. Элементарные операции. Функции. Мы оперируем здесь с квадратичными бесконечными *матрицами* *), которые будем обозначать жирным шрифтом; светлые буквы всегда будут означать обычные числа:

$$\mathbf{a} = (a(nm)) = \begin{pmatrix} a(00) & a(01) & a(02)\ldots \\ a(10) & a(11) & a(12)\ldots \\ a(20) & a(21) & a(22)\ldots \\ \ldots & \ldots & \ldots \end{pmatrix}$$

Равенство двух матриц означает равенство соответствующих элементов:

$$\mathbf{a} = \mathbf{b} \quad \text{означает} \quad a(nm) = b(nm). \tag{1}$$

Сложение определяется сложением соответствующих элементов:

$$\mathbf{a} = \mathbf{b} + \mathbf{c} \quad \text{означает} \quad a(nm) = b(nm) + c(nm). \tag{2}$$

Умножение определяется известным из теории детерминантов правилом — «строки умножаются на столбцы»:

$$\mathbf{a} = \mathbf{bc} \quad \text{означает} \quad a(nm) = \sum_{k=0}^{\infty} b(nk)\, c(km). \tag{3}$$

Возведение в степень определяется как повторное умножение. Для умножения справедлив ассоциативный закон, а для сочетания сложения и умножения дистрибутивный:

$$(\mathbf{ab})\,\mathbf{c} = \mathbf{a}\,(\mathbf{bc}), \tag{4}$$

$$\mathbf{a}\,(\mathbf{b} + \mathbf{c}) = \mathbf{ab} + \mathbf{ac}. \tag{5}$$

Однако коммутативный закон для умножения *не* имеет места: соотношение $\mathbf{ab} = \mathbf{ba}$ в общем случае *не* выполняется. Если он имеет место, то $\mathbf{a}$ и $\mathbf{b}$ будут называться *переставимыми*. *Единичная* матрица, определяемая через

$$\mathbf{1} = (\delta_{nm}), \quad \begin{cases} \delta_{nm} = 0 & \text{для} \quad n \neq m, \\ \delta_{nn} = 1, \end{cases} \tag{6}$$

обладает следующим свойством:

$$\mathbf{a1} = \mathbf{1a} = \mathbf{a}. \tag{6a}$$

Матрица $\mathbf{a}^{-1}$, *обратная* к $\mathbf{a}$, определяется через **)

$$\mathbf{a}^{-1}\mathbf{a} = \mathbf{aa}^{-1} = \mathbf{1}. \tag{7}$$

Под *«средним значением»* некоторой матрицы $\mathbf{a}$ мы будем понимать такую матрицу, диагональные элементы которой совпадают с диагональными элементами матрицы $\mathbf{a}$, в то время как все остальные элементы равны нулю:

$$\overline{\mathbf{a}} = (\delta_{nm} a(nm)). \tag{8}$$

---

*) Подробные сведения о матричном исчислении можно найти, например: M. Bôcher, Einführung in die hohere Algebra, Lpz., Teubner, 1910, § 22—25 (перев. с англ. Г. Бека); ранее: R. Courant, D. Hilbert, Methoden der mathematischen Physik, Bd. I, Brl., Springer, 1924, 1. Kap.

**) Как известно, у *конечных* квадратичных матриц $\mathbf{a}^{-1}$ в силу этого определения всегда устанавливается однозначно, если *детерминант* $A$ от $\mathbf{a}$ отличается от нуля. Если $A = 0$, то нет матрицы, обратной к $\mathbf{a}$.

Сумма этих диагональных элементов будет называться *«диагональной суммой»* матрицы **a** и обозначаться через $D$ (**a**):

$$D(\mathbf{a}) = \sum_n a(nn). \tag{9}$$

В соответствии с соотношением (3) легко показать, что если диагональная сумма некоторого произведения $\mathbf{y} = \mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \ldots, \mathbf{x}_m$ конечна, то она сохраняется неизменной при циклической перестановке множителей

$$D(\mathbf{x}_1\mathbf{x}_2\ldots\mathbf{x}_m) = D(\mathbf{x}_r\mathbf{x}_{r+1}\ldots\mathbf{x}_m\mathbf{x}_1\mathbf{x}_2\ldots\mathbf{x}_{r-1}). \tag{10}$$

Очевидно, достаточно убедиться в справедливости этого закона для *двух* сомножителей.

Если элементы матриц **a**, **b** являются функциями параметра $t$, то

$$\frac{d}{dt}\sum_k a(nk)\,b(km) = \sum_k \{\dot{a}(nk)\,b(km) + a(nk)\,\dot{b}(km)\}$$

или, согласно определению (3),

$$\frac{d}{dt}(\mathbf{ab}) = \dot{\mathbf{a}}\mathbf{b} + \mathbf{a}\dot{\mathbf{b}}. \tag{11}$$

Повторное применение (11) дает

$$\frac{d}{dt}(\mathbf{x}_1\mathbf{x}_2\ldots\mathbf{x}_n) = \dot{\mathbf{x}}_1\mathbf{x}_2\ldots\mathbf{x}_n + \mathbf{x}_1\dot{\mathbf{x}}_2\ldots\mathbf{x}_n + \ldots + \mathbf{x}_1\mathbf{x}_2\ldots\dot{\mathbf{x}}_n. \tag{11'}$$

С помощью вычислительных операций (2), (3) можно определить *функции* матриц. В качестве наиболее общей функции $\mathbf{f}(\mathbf{x}_1\mathbf{x}_2\ldots\mathbf{x}_m)$ здесь будет рассматриваться прежде всего такая функция, которая может быть формально представлена как сумма конечного или бесконечного числа произведений степеней аргументов $\mathbf{x}_k$ с *численными* коэффициентами. Тогда можно определить с помощью уравнений

$$\begin{gathered} \mathbf{f}_1(\mathbf{y}_1\ldots\mathbf{y}_n;\ \mathbf{x}_1\ldots\mathbf{x}_n) = 0, \\ \ldots\ldots\ldots\ldots\ldots \\ \mathbf{f}_n(\mathbf{y}_1\ldots\mathbf{y}_n;\ \mathbf{x}_1\ldots\mathbf{x}_n) = 0 \end{gathered} \tag{12}$$

и функции $\mathbf{y}_l(\mathbf{x}_1\ldots\mathbf{x}_n)$. Чтобы получить именно функции $\mathbf{y}_l$ описанной выше формы, которые удовлетворяют уравнениям (12), надо лишь представить $\mathbf{y}_l$ в виде рядов по возрастающим степеням произведений $\mathbf{x}_k$, а затем путем подстановки в (12) определить коэффициенты ряда. Обнаруживается, что всегда дано столько же уравнений, сколько имеется неизвестных. Конечно, число уравнений и неизвестных больше, чем при использовании метода неопределенных коэффициентов в обычном числовом анализе с *коммутативным* умножением. В каждом из уравнений (12), после подстановки рядов для $\mathbf{y}_l$ и собирания соответствующих членов, получается кроме слагаемого $C'\mathbf{x}_1\mathbf{x}_2$ также и слагаемое $C''\mathbf{x}_2\mathbf{x}_1$ и должны обращаться в нуль как $C'$, так $C''$ (не только $C' + C''$). Зато, однако, в разложении каждого $\mathbf{y}_l$ встречаются два члена $\mathbf{x}_1\mathbf{x}_2$ и $\mathbf{x}_2\mathbf{x}_1$ с двумя коэффициентами, которыми можно располагать.

§ 2. Символическое дифференцирование. В дальнейшем часто используется вычислительная операция, которую мы рассмотрим здесь подробнее и которую следует считать *дифференцированием* матричной функции. Однако следует заметить, что эта операция только в некоторых отношениях обладает свойствами, сходными со свойствами дифференцирования в обычном анализе. Например, здесь правило дифференцирования произведения или правило дифференцирования функции от функции в общем случае уже больше не выполняется. Только в случаях, когда **все** рассматриваемые матрицы взаимно *переставимы*, сохраняются все правила дифференцирования обычного анализа.

Пусть

$$\mathbf{y}=\prod_{m=1}^{s}\mathbf{x}_{l_m}=\mathbf{x}_{l_1}\mathbf{x}_{l_2}\ldots\mathbf{x}_{l_s}. \tag{13}$$

Мы определяем:

$$\frac{\partial\mathbf{y}}{\partial\mathbf{x}_k}=\sum_{r=1}^{s}\delta_{l_rk}\prod_{m=r+1}^{m=s}\mathbf{x}_{l_m}\prod_{m=1}^{m=r-1}\mathbf{x}_{l_m}=\begin{cases}\delta_{jk}=0 \text{ для } j\neq k,\\ \delta_{kk}=1.\end{cases} \tag{14}$$

Словами это правило выражается так. Представим, что в рассматриваемом произведении все сомножители выписываются в *отдельности* (так, например, пишется не $\mathbf{x}_1^3\mathbf{x}_1^2$, а $\mathbf{x}_1\mathbf{x}_1\mathbf{x}_1\mathbf{x}_2\mathbf{x}_2$); выделяют какой-либо один сомножитель $\mathbf{x}_k$ и составляют произведение всех сомножителей, следующих за ним, и всех сомножителей, ему предшествующих (в той же последовательности). Сумма всех образованных таким образом членов есть частная производная произведения по этому $\mathbf{x}_k$.

Некоторые примеры могут пояснить этот прием:

$$\mathbf{y}=\mathbf{x}_n,\qquad \frac{d\mathbf{y}}{d\mathbf{x}}=n\mathbf{x}^{n-1},$$

$$\mathbf{y}=\mathbf{x}_1^n\mathbf{x}_2^n,\qquad \frac{\partial\mathbf{y}}{\partial\mathbf{x}_1}=\mathbf{x}_1^{n-1}\mathbf{x}_2^m+\mathbf{x}_1^{n-2}\mathbf{x}_2^m\mathbf{x}_1+\ldots+\mathbf{x}_2^m\mathbf{x}_1^{n-1},$$

$$\mathbf{y}=\mathbf{x}_1^2\mathbf{x}_2\mathbf{x}_1\mathbf{x}_3,\quad \frac{\partial\mathbf{y}}{\partial\mathbf{x}_1}=\mathbf{x}_1\mathbf{x}_2\mathbf{x}_1\mathbf{x}_3+\mathbf{x}_2\mathbf{x}_1\mathbf{x}_3\mathbf{x}_1+\mathbf{x}_3\mathbf{x}_1^2\mathbf{x}_2.$$

Если мы потребуем дальше

$$\frac{\partial(\mathbf{y}_1+\mathbf{y}_2)}{\partial\mathbf{x}_k}=\frac{\partial\mathbf{y}_1}{\partial\mathbf{x}_k}+\frac{\partial\mathbf{y}_2}{\partial\mathbf{x}_k}, \tag{15}$$

то производная $\partial\mathbf{y}/\partial\mathbf{x}$ определяется для наиболее общей аналитической функции $\mathbf{y}$.

В силу этого определения, а также определения диагональной суммы (9), справедливо соотношение

$$\frac{\partial D(\mathbf{y})}{\partial\mathbf{x}(nm)}=\frac{\partial\mathbf{y}}{\partial\mathbf{x}_k}(mn), \tag{16}$$

причем в правой части здесь стоит $mn$-элемент матрицы $\partial\mathbf{y}/\partial\mathbf{x}_k$. Это соотношение может быть использовано и для определения производной $\partial\mathbf{y}/\partial\mathbf{x}_k$. Для доказательства (16), очевидно, достаточно рассмотреть функцию $\mathbf{y}$ вида (13). Согласно (14) и (3),

$$\frac{\partial\mathbf{y}}{\partial\mathbf{x}_k}(mn)=\sum_{r=1}^{s}\delta_{l_rk}\sum_{\tau}\prod_{p=r+1}^{s}x_{l_p}(\tau_p\tau_{p+1})\prod_{p=1}^{r-1}x_{l_p}(\tau_p\tau_{p+1}), \tag{17}$$

$$\tau_{r+1}=m,\ \tau_{s+1}=\tau_1,\qquad \tau_r=n.$$

С другой стороны, из (3) и (9) должно вытекать

$$\frac{\partial D(\mathbf{y})}{\partial x_k(mn)}=\sum_{r=1}^{s}\delta_{l_rk}\sum_{\tau}\prod_{p=1}^{r-1}x_{l_p}(\tau_p\tau_{p+1})\prod_{p=r+1}^{s}x_{l_p}(\tau_p\tau_{p+1}), \tag{17'}$$

$$\tau_1=\tau_{s+1},\quad \tau_r=n,\quad \tau_{r+1}=m.$$

Сравнение (17) и (17′) дает (16).

Здесь следует сразу же подчеркнуть один важный для последующего факт, который вытекает из (14): *частные производные произведения инвариантны относительно циклической перестановки сомножителей.* В силу (16) эта теорема должна вытекать также и из (10).

В заключение этой подготовки мы должны еще несколько слов сказать о функциях от *двух* переменных $\mathbf{g}(\mathbf{pq})$. Для

$$\mathbf{y} = \mathbf{p}^s\mathbf{q}^r \tag{18}$$

в соответствии с (14) будет

$$\frac{\partial \mathbf{y}}{\partial \mathbf{p}} = \sum_{l=1}^{s-1} \mathbf{p}^{s-1-l}\mathbf{q}^r\mathbf{p}^l, \quad \frac{\partial \mathbf{y}}{\partial \mathbf{q}} = \sum_{j=1}^{r-1} \mathbf{q}^{r-1-j}\mathbf{p}^s\mathbf{q}^j. \tag{18'}$$

Наиболее общую подлежащую рассмотрению функцию $\mathbf{g}(\mathbf{pq})$ следует согласно § 1 представлять как линейную комбинацию членов вида

$$\mathbf{z} = \prod_{j=1}^{k} (\mathbf{p}^{s_j}\mathbf{q}^{r_j}). \tag{19}$$

Введя сокращение

$$\mathbf{P}_l = \prod_{j=l+1}^{k} (\mathbf{p}^{s_j}\mathbf{q}^{r_j}) \prod_{j=1}^{l-1} (\mathbf{p}^{s_j}\mathbf{q}^{r_j}), \tag{20}$$

производные можно написать в виде

$$\begin{aligned} \frac{\partial \mathbf{z}}{\partial \mathbf{p}} &= \sum_{l=1}^{k} \sum_{m=0}^{s_l-1} \mathbf{p}^{s_l-1-m}\mathbf{q}^{r_l}\mathbf{P}_l\mathbf{p}^m, \\ \frac{\partial \mathbf{z}}{\partial \mathbf{q}} &= \sum_{l=1}^{k} \sum_{m=0}^{r_l-1} \mathbf{q}^{r_l-1-m}\mathbf{P}_l\mathbf{p}^{s_l}\mathbf{q}^m. \end{aligned} \tag{21}$$

Из этих уравнений можно вывести важное следствие. Рассмотрим матрицы:

$$\mathbf{d}_1 = \mathbf{q}\frac{\partial \mathbf{z}}{\partial \mathbf{q}} - \frac{\partial \mathbf{z}}{\partial \mathbf{q}}\mathbf{q}, \quad \mathbf{d}_2 = \mathbf{p}\frac{\partial \mathbf{z}}{\partial \mathbf{p}} - \frac{\partial \mathbf{z}}{\partial \mathbf{p}}\mathbf{p}. \tag{22}$$

Согласно (21),

$$\mathbf{d}_1 = \sum_{l=1}^{k} (\mathbf{q}^{r_l}\mathbf{P}_l\mathbf{p}^{s_l} - \mathbf{P}_l\mathbf{p}^{s_l}\mathbf{q}^{r_l}), \quad \mathbf{d}_2 = \sum_{l=1}^{k} (\mathbf{p}^{s_l}\mathbf{q}^{r_l}\mathbf{P}_l - \mathbf{q}^{r_l}\mathbf{P}_l\mathbf{p}^{s_l}),$$

и отсюда следует

$$\mathbf{d}_1 + \mathbf{d}_2 = \sum_{l=1}^{k} (\mathbf{p}^{s_l}\mathbf{q}^{r_l}\mathbf{P}_l - \mathbf{P}_l\mathbf{p}^{s_l}\mathbf{q}^{r_l}).$$

Здесь всегда второй член одного слагаемого компенсируется первым членом последующего, а также взаимно уничтожаются первый и последний члены всей суммы. Следовательно,

$$\mathbf{d}_1 + \mathbf{d}_2 = 0. \tag{23}$$

Это соотношение справедливо, в силу его линейности относительно $\mathbf{z}$, не только для выражения $\mathbf{z}$ в виде (19), но равным образом и для любых аналитических функций $\mathbf{g}(\mathbf{pq})$ *).

*) В более общем виде для функций от $r$ переменных

$$\sum_r \left(\mathbf{x}_r \frac{\partial \mathbf{g}}{\partial \mathbf{x}_r} - \frac{\partial \mathbf{g}}{\partial \mathbf{x}_r}\mathbf{x}_r\right) = 0.$$

В заключение этого краткого изложения матричного анализа мы еще докажем теорему: *любое матричное уравнение*

$$\mathbf{F}(\mathbf{x}_1\mathbf{x}_2\ldots\mathbf{x}_r) = 0$$

*остается верным, если во всех матричных аргументах* $\mathbf{x}_j$ *произвести одну и ту же перестановку всех строк и всех столбцов.* Очевидно, для этого достаточно показать, что для двух матриц $\mathbf{a}$, $\mathbf{b}$, которые в силу такой операции переходят в $\mathbf{a}'$, $\mathbf{b}'$, имеют место инварианты

$$\mathbf{a}' + \mathbf{b}' = (\mathbf{a} + \mathbf{b})', \quad \mathbf{a}'\mathbf{b}' = (\mathbf{ab})',$$

где правые части представляют матрицы, получающиеся из $\mathbf{a} + \mathbf{b}$ и $\mathbf{ab}$ путем указанных перестановок.

Мы проведем это доказательство путем замены операции перестановки умножением на соответствующую матрицу *).

Перестановку мы запишем в виде

$$\begin{pmatrix} 0 & 1 & 2 & 3\ldots \\ k_0 & k_1 & k_2 & k_3\ldots \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} n \\ k_n \end{pmatrix}.$$

Ей мы сопоставим *матрицу перестановки*

$$(\mathbf{p} = (p(nm)), \quad p(nm) = \begin{cases} 1 & \text{при } m = k_n, \\ 0 & \text{при других значениях.} \end{cases}$$

Транспонированная к $\mathbf{p}$ матрица будет

$$\tilde{\mathbf{p}} = (\tilde{p}(nm)), \quad \tilde{p}(nm) = \begin{cases} 1 & \text{при } n = k_m, \\ 0 & \text{при других значениях.} \end{cases}$$

Перемножая обе матрицы, получаем

$$\mathbf{p}\tilde{\mathbf{p}} = \Big(\sum_k p(nk)\,\tilde{p}(km)\Big) = (\delta_{nm}) = \mathbf{1},$$

так как оба сомножителя $p(nk)$ и $\tilde{p}(km)$ только тогда одновременно отличны от нуля, когда $k = k_n = k_m$, следовательно, когда $n = m$. Отсюда $\tilde{\mathbf{p}}$ обратно $\mathbf{p}$:

$$\tilde{\mathbf{p}} = \mathbf{p}^{-1}.$$

Пусть $\mathbf{a}$ будет любой матрицей, тогда

$$\mathbf{pa} = \Big(\sum_k p(nk)\,a(km)\Big) = (a(k_n, m))$$

есть матрица, которая получается из $\mathbf{a}$ перестановкой $\begin{pmatrix} n \\ k_n \end{pmatrix}$ строк, и аналогично

$$\mathbf{ap}^{-1} = \Big(\sum_k a(nk)\,\tilde{p}\,km)\Big) = (a(n, k_m))$$

есть матрица, которая получается перестановкой столбцов. Таким образом, одна и та же перестановка строк и столбцов дает матрицу

$$\mathbf{a}' = \mathbf{pap}^{-1}.$$

---

*) Избранный здесь способ доказательства обладает тем преимуществом, что он позволяет понять тесную связь перестановок с важным классом более общих преобразований матриц. Однако о справедливости рассматриваемой теоремы можно заключить и непосредственно, заметив, что в определениях, как *равенства*, так и *сложения* и *умножения* матриц, не используются соотношения последовательности для строк и соответственно для столбцов.

Отсюда сразу же следует

$$\mathbf{a}' + \mathbf{b}' = \mathbf{p}(\mathbf{a} + \mathbf{b})\mathbf{p}^{-1} = (\mathbf{a} + \mathbf{b})',$$
$$\mathbf{a}'\mathbf{b}' = \mathbf{pabp}^{-1} = (\mathbf{ab})',$$

чем и доказывается наше утверждение.

Таким образом, видно, что посредством матричных уравнений какая-либо последовательность или какой-либо порядок элементов никогда не могут быть определены.

Впрочем, очевидно, справедливо гораздо более общее положение, что каждое матричное уравнение инвариантно относительно пребразований вида

$$\mathbf{a}' = \mathbf{bab}^{-1},$$

где $\mathbf{b}$ означает *произвольную* матрицу. Правда, позднее мы увидим, что для матричных дифференциальных уравнений правильность этого уже не вытекает непосредственно.

## II. ДИНАМИКА

§ 3. Основные законы. Динамическая система должна описываться посредством *координаты* $\mathbf{q}$ и *импульса* $\mathbf{p}$. Они должны быть выражены матрицами

$$\mathbf{q} = (q\,(nm)e^{2\pi i\nu(nm)t}), \quad \mathbf{p} = (p\,(nm)\,e^{2\pi i\nu(nm)t}) \tag{24}$$

При этом через $\nu\,(nm)$ обозначаются квантовотеоретические частоты, относящиеся к переходам между состояниями с *квантовыми числами* $m$ и $n$. Матрицы (24) должны быть *эрмитовыми*, так как при транспонировании (bei Transposition) матриц каждый элемент должен перейти в свой сопряженный, причем это должно выполняться для всех действительных значений $t$. Следовательно, имеем

$$q\,(nm)\,q\,(mn) = |\,q\,(nm)\,|^2 \tag{25}$$

и

$$\nu\,(nm) = -\,\nu\,(mn). \tag{26}$$

Если $\mathbf{q}$ есть *декартова* координата, то величина (25) определяет *вероятности* *) перехода $n \rightleftarrows m$.

Далее мы потребуем, чтобы выполнялось соотношение

$$\nu\,(jk) + \nu\,(kl) + \nu\,(lj) = 0. \tag{27}$$

Вместе с (26) это может быть выражено так: существуют такие величины $W_n$, что

$$h\nu\,(nm) = W_n - W_m. \tag{28}$$

Из этого следует, учитывая (2) и (3), что функция $\mathbf{g}(\mathbf{pq})$ всегда сохраняет вид

$$\mathbf{g} = (g\,(nm)\,e^{2\pi i\nu(nm)t}), \tag{29}$$

а именно при этом матрица $(g\,(nm))$ получается из матриц $(q\,(nm))$, $(p(nm))$ путем именно такого же процесса, каким $\mathbf{g}$ получается из $\mathbf{q}$, $\mathbf{p}$. Поэтому для выражения (24) мы можем впредь избрать более краткий способ написания

$$\mathbf{q} = (q\,(nm)), \quad \mathbf{p} = (p\,(nm)). \tag{30}$$

*) См. по этому поводу § 8.

В качестве *производной по времени* матрицы $\mathbf{g} = (g\,(nm))$ мы получим, вспомнив еще раз (24) и (29), матрицу

$$\dot{\mathbf{g}} = 2\pi i\,(\nu\,(nm) g\,(nm)). \tag{31}$$

Если, как мы примем, $\nu\,(nm) \neq 0$, при $n \neq m$, то $\dot{\mathbf{g}} = 0$ означает, что $\mathbf{g}$ является диагональной матрицей с $g\,(nm) = \delta_{nm}\, g\,(nn)$.

Дифференциальное уравнение $\dot{\mathbf{g}} = \mathbf{a}$ инвариантно относительно процесса, при котором строки и столбцы всех матриц, так же как и числа $W_n$, подвергаются одной и той же перестановке (Permutation). Чтобы убедиться в этом, мы рассмотрим диагональную матрицу

$$\mathbf{W} = (\delta_{nm} W_n);$$

тогда

$$\mathbf{Wg} = \Big(\sum_k \delta_{nk} W_n g\,(km)\Big) = (W_n g\,(nm)),$$

$$\mathbf{gW} = \Big(\sum_k g\,(nk)\,\delta_{km} W_k\Big) = (W_m g\,(nm)),$$

следовательно, согласно (31),

$$\dot{\mathbf{g}} = \frac{2\pi i}{h}\,((W_n - W_m)\,g\,(nm)) = \frac{2\pi i}{h}\,(\mathbf{Wg} - \mathbf{gW}).$$

Теперь, если $\mathbf{p}$ есть матрица перестановки, то преобразованная матрица

$$\mathbf{W}' = \mathbf{pWp}^{-1} = (\delta_{n_k m} W_{n_k})$$

является диагональной с переставленными $W_n$ по диагонали. Поэтому получается

$$\mathbf{pgp}^{-1} = \frac{2\pi i}{h}\,(\mathbf{W}'\mathbf{g}' - \mathbf{g}'\mathbf{W}') = \dot{\mathbf{g}}',$$

где $\mathbf{g}' = \mathbf{pgp}^{-1}$, а $\dot{\mathbf{g}}'$ означает производную по времени от $\mathbf{g}'$, образованную, согласно правилу (31), с переставленными $W_n$.

Строки и столбцы матрицы $\dot{\mathbf{g}}$ испытывают, следовательно, такую же перестановку, как и строки и столбцы матрицы $\mathbf{g}$, откуда и следует наше утверждение.

Следует обратить внимание на то, что соответствующий закон *не* имеет места для любого пребразования вида $\mathbf{a}' = \mathbf{bab}^{-1}$; в самом деле, при любом преобразовании $\mathbf{W}'$ уже не является диагональной матрицей. Несмотря на эту трудность, нам представляется неизбежным детальное исследование этих общих преобразований, потому что оно обещает проникновение в более глубокие взаимосвязи новой теории; мы вернемся к этому позднее *).

Для случая функции Гамильтона вида

$$\mathbf{H} = \frac{1}{2m}\,\mathbf{p}^2 + \mathbf{U}\,(\mathbf{q})$$

мы, вслед за Гейзенбергом, примем, что *уравнения движения* такие же, как и классические, так что в соответствии с символикой § 2 мы можем записать

$$\begin{aligned} \dot{\mathbf{q}} &= \frac{\partial \mathbf{H}}{\partial \mathbf{p}} = \frac{1}{m}\,\mathbf{p}, \\ \dot{\mathbf{p}} &= -\frac{\partial \mathbf{H}}{\partial \mathbf{q}} = -\frac{\partial \mathbf{U}}{\partial \mathbf{q}}. \end{aligned} \tag{32}$$

*) Ср. выходящее в скором времени продолжение этой статьи.

Опираясь на принцип соответствия, следует попытаться определить соответствующие уравнения движения и для общего случая любой функции Гамильтона **H** (**pq**). Это необходимо при учете релятивистской механики и особенно характера движения электронов под воздействием магнитных полей. Действительно, в последнем случае функция **H** в декартовых координатах уже не может быть представлена как сумма двух функций, из которых одна зависит только от импульсов, а другая только от координат.

В классической теории уравнения движения выводятся из принципа действия

$$\int_{t_0}^{t_1} L\,dt = \int_{t_0}^{t_1} \{p\dot{q} - H(pq)\}\,dt = \mathrm{Extremum}. \qquad (33)$$

Представим себе, что в (33) подставлено разложение $L$ в ряд Фурье и примем, что отрезок времени $t_1 - t_0$ достаточно велик, тогда вклад в интеграл дает только постоянный член разложения $L$. Форма, которую при этом принимает принцип действия, подсказывает следующий переход в квантовой механике:

*Диагональная сумма* $D(\mathbf{L}) = \sum_k L\,(kk)$ *должна достигать экстремума*

$$D\,(\mathbf{L}) = D\,(\mathbf{p}\dot{\mathbf{q}} - \mathbf{H}(\mathbf{pq})) = \mathrm{Extremum}, \qquad (34)$$

*и притом путем надлежащего выбора* **p** *и* **q** *при сохраняющем* $\nu(nm)$.

Отсюда, приравнивая производные от $D$ (**L**) по элементам матриц **p** и **q** нулю, получаются уравнения движения

$$2\pi i\nu\,(nm)\,q\,(nm) = \frac{\partial D\,(\mathbf{H})}{\partial p\,(mn)},$$

$$2\pi i\nu\,(mn)\,p\,(mn) = \frac{\partial D\,(\mathbf{H})}{\partial q\,(mn)}.$$

Из (26), (31) и (16) вытекает, что эти уравнения движения, вообще говоря, могут быть записаны в *каноническом* виде

$$\dot{\mathbf{q}} = \frac{\partial \mathbf{H}}{\partial \mathbf{p}}, \quad \dot{\mathbf{p}} = -\frac{\partial \mathbf{H}}{\partial \mathbf{q}}. \qquad (35)$$

В качестве квантового условия Гейзенберг применяет соотношения, установленные Томасом *) и Куном **). Уравнение «классической» квантовой теории

$$J = \oint p\,dq = \int_0^{1/\nu} p\dot{q}\,dt$$

при использовании разложения $p$ и $q$ в ряд Фурье

$$p = \sum_{\tau=-\infty}^{\infty} p_\tau e^{2\pi i\nu\tau t}, \qquad q = \sum_{\tau=-\infty}^{\infty} q_\tau e^{2\pi i\nu\tau t}$$

может быть преобразовано в уравнение

$$1 = 2\pi i \sum_{\tau=-\infty}^{\infty} \tau \frac{\partial}{\partial J}(q_\tau p_{-\tau}). \qquad (36)$$

---

*) W. Thomas, Naturwissenschaften 13, 627 (1925).
**) W. Kuhn, Zs. Phys. 33, 408 (1925).

Если при этом $p = m\dot{q}$, то $p_\tau$ могут быть выражены через $q_\tau$ и, таким образом, можно получить то классическое уравнение, преобразование которого, по принципу соответствия, в разностное уравнение дает соотношение Томаса и Куна. Так как в данном случае не следует делать предположение $\mathbf{p} = m\dot{\mathbf{q}}$, то мы должны уравнение (36) непосредственно превратить в разностное уравнение.

Должно иметься соответствие выражений

$$\sum_{\tau=-\infty}^{\infty} \tau \frac{\partial}{\partial J}(q_\tau p_{-\tau}),$$

$$\frac{1}{h}\sum_{\tau=-\infty}^{\infty}(q(n+\tau, n)\,p(n, n+\tau) - q(n, n-\tau)\,p(n-\tau, n));$$

при этом здесь те $q\,(nm)$, $p\,(nm)$, которые содержат отрицательный индекс, следует положить равными нулю. В силу этого мы получаем, в качестве преобразованного выражения (36), по принципу соответствия, квантовое условие

$$\sum_k (p\,(nk)\,q\,(kn) - q\,(nk)\,p\,(kn)) = \frac{h}{2\pi i}. \tag{37}$$

Оно представляет бесконечно много уравнений, а именно по одному для каждого $n$.

В частности, для $\mathbf{p} = m\dot{\mathbf{q}}$ получается

$$\sum_k \nu\,(kn)\,|\,q\,(nk)\,|^2 = \frac{h}{8\pi^2 m}.$$

что, как легко установить, совпадает с гейзенберговской формой квантового условия или с уравнением Томаса — Куна. Соотношение (37) следует рассматривать как целесообразное обобщение этого уравнения.

Помимо этого из (37) видно, что диагональная сумма $D$ (**pq**) по необходимости бесконечна. Ибо иначе из (10) вытекало бы, что $D$ (**pq**) — — $D$ (**qp**) $= 0$, тогда как (37) приводит к $D$ (**pq**) — $D$ (**qp**) $= \infty$. Следовательно, рассматриваемые матрицы никогда не бывают конечными *).

§ 4. Следствия. Закон сохранения энергии и условие частот. Основные законы новой механики полностью даны в предыдущем параграфе. Все другие законы квантовой механики, имеющие всеобщее значение, должны быть *доказаны*, исходя из них. В качестве таких подлежащих доказательству законов в первую очередь следует рассмотреть закон *сохранения энергии и условие частот Бора*. Закон сохранения энергии утверждает, что если **H** — энергия, то $\dot{\mathbf{H}} = 0$, или что **H** является *диагональной* матрицей. Тогда диагональные члены $H\,(nn)$ матрицы **H** будут истолковываться, согласно Гейзенбергу, как *энергии различных состояний* систем, а условие частот Бора требует, чтобы

$$h\nu\,(nm) = H\,(nn) - H\,(mm)$$

или

$$W_n = H\,(nn) + \text{const}.$$

Рассмотрим величину

$$\mathbf{d} = \mathbf{pq} - \mathbf{qp}.$$

*) Они не принадлежат и к классу «ограниченных» бесконечных матриц, которые до сих пор почти исключительно рассматривались математиками.

Согласно (11) и (35),

$$\dot{\mathbf{d}} = \dot{\mathbf{p}}\mathbf{q} + \mathbf{p}\dot{\mathbf{q}} - \dot{\mathbf{q}}\mathbf{p} - \mathbf{q}\dot{\mathbf{p}} = \mathbf{q}\frac{\partial \mathbf{H}}{\partial \mathbf{q}} - \frac{\partial \mathbf{H}}{\partial \mathbf{q}}\mathbf{q} + \mathbf{p}\frac{\partial \mathbf{H}}{\partial \mathbf{p}} - \frac{\partial \mathbf{H}}{\partial \mathbf{p}}\mathbf{p}.$$

Следовательно, согласно (22) и (23), $\dot{\mathbf{d}} = 0$ и $\mathbf{d}$ — диагональная матрица. Но диагональные элементы матрицы $\mathbf{d}$ определяются именно квантовым условием (37). Используя единичную матрицу $\mathbf{1}$, определенную соотношением (6), и обобщая, мы получаем уравнение

$$\mathbf{pq} - \mathbf{qp} = \frac{h}{2\pi i}\mathbf{1}, \tag{38}$$

которое мы называем *«уточненным квантовым условием»* и на котором основаны все дальнейшие заключения.

Из формы этого уравнения следует сделать вывод: если из соотношения (38) выведено уравнение ($A$), то оно остается справедливым и тогда, когда $\mathbf{p}$ и $\mathbf{q}$ переставляются и одновременно $h$ заменяется на $-h$. Поэтому, например, из двух уравнений

$$\mathbf{p}^n\mathbf{q} = \mathbf{q}\mathbf{p}^n + n\frac{h}{2\pi i}\mathbf{p}^{n-1}, \tag{39}$$

$$\mathbf{q}^n\mathbf{p} = \mathbf{p}\mathbf{q}^n - n\frac{h}{2\pi i}\mathbf{q}^{n-1} \tag{39'}$$

только одно нуждается в доказательстве на основе (38), которое легко реализовать посредством индукции.

Мы выведем теперь закон сохранения энергии и условие частот, как они были сформулированы выше, сперва для случая

$$\mathbf{H} = \mathbf{H}_1(\mathbf{p}) + \mathbf{H}_2(\mathbf{q}).$$

Согласно сказанному в § 1, мы можем здесь $\mathbf{H}_1(\mathbf{p})$ и $\mathbf{H}_2(\mathbf{q})$ заменить формально через степенные ряды:

$$\mathbf{H}_1 = \sum_s a_s\mathbf{p}^s, \qquad \mathbf{H}_2 = \sum_s b_s\mathbf{q}^s.$$

Формулы (39) и (39') позволяют в таком случае установить, что

$$\begin{aligned} \mathbf{Hq} - \mathbf{qH} &= \frac{h}{2\pi i}\frac{\partial \mathbf{H}}{\partial \mathbf{p}}, \\ \mathbf{Hp} - \mathbf{pH} &= -\frac{h}{2\pi i}\frac{\partial \mathbf{H}}{\partial \mathbf{q}}, \end{aligned} \tag{40}$$

а сравнение с уравнениями движения (35) дает

$$\begin{aligned} \dot{\mathbf{q}} &= \frac{2\pi i}{h}(\mathbf{Hq} - \mathbf{qH}), \\ \dot{\mathbf{p}} &= \frac{2\pi i}{h}(\mathbf{Hp} - \mathbf{pH}). \end{aligned} \tag{41}$$

Если теперь матрицу $\mathbf{Hg} - \mathbf{gH}$ обозначить кратко через $\begin{vmatrix} \mathbf{H} \\ \mathbf{g} \end{vmatrix}$, то получим

$$\begin{vmatrix} \mathbf{H} \\ \mathbf{ab} \end{vmatrix} = \begin{vmatrix} \mathbf{H} \\ \mathbf{a} \end{vmatrix}\mathbf{b} + \mathbf{a}\begin{vmatrix} \mathbf{H} \\ \mathbf{b} \end{vmatrix}, \tag{42}$$

а отсюда в общем случае для $\mathbf{g} = \mathbf{g}(\mathbf{pq})$ должно следовать

$$\dot{\mathbf{g}} = \frac{2\pi i}{h}\begin{vmatrix} \mathbf{H} \\ \mathbf{g} \end{vmatrix} = \frac{2\pi i}{h}(\mathbf{Hg} - \mathbf{gH}). \tag{43}$$

Для доказательства нужно только вычислить $\mathbf{g}$ с помощью (11), (11′), как функцию от $\mathbf{p}$, $\mathbf{q}$ и $\dot{\mathbf{p}}$, $\dot{\mathbf{q}}$, а также вычислить $\left|\begin{matrix}\mathbf{H}\\ \mathbf{g}\end{matrix}\right|$ с помощью (42), как функцию от $\mathbf{p}$, $\mathbf{q}$ и $\left|\begin{matrix}\mathbf{H}\\ \mathbf{p}\end{matrix}\right|$, $\left|\begin{matrix}\mathbf{H}\\ \mathbf{q}\end{matrix}\right|$, и применить затем (41). Если, в частности, положить в (43) $\mathbf{g} = \mathbf{H}$, то получается

$$\dot{\mathbf{H}} = 0. \tag{44}$$

После того как закон сохранения энергии тем самым доказан и установлено, что $\mathbf{H}$ диагональная матрица, соотношение (41) принимает вид

$$h\nu\,(nm)\,q\,(nm) = (H\,(nn) - H\,(mm))\,q\,(nm),$$
$$h\nu\,(nm)\,p\,(nm) = (H\,(nn) - H\,(mm))\,p\,(nm),$$

откуда следует условие частот.

Если мы перейдем теперь к функциям Гамильтона более общего вида $\mathbf{H}^* = \mathbf{H}^*(\mathbf{pq})$, то легко показать на примерах, в частности на примере $\mathbf{H}^* = \mathbf{p}^2\mathbf{q}$, что в общем случае соотношение $\dot{\mathbf{H}}^* = 0$ не будет выполняться. Однако можно видеть, что функция Гамильтона $\mathbf{H} = (\mathbf{p}^2\mathbf{q} + \mathbf{q}\mathbf{p}^2)/2$ приводит к тому же самому уравнению движения, как и $\mathbf{H}^*$, и что $\dot{\mathbf{H}}$ опять будет равно нулю. В соответствии с этим мы формулируем закон сохранения энергии и условие частот следующим образом: *Для каждой функции* $\mathbf{H}^* = \mathbf{H}^*(\mathbf{pq})$ *существует функция* $\mathbf{H} = \mathbf{H}(\mathbf{pq})$, *такая, что* $\mathbf{H}^*$ *и* $\mathbf{H}$ *в качестве функций Гамильтона дают те же самые уравнения движения, и что* $\mathbf{H}$ *для этих уравнений движения играет роль постоянной во времени энергии, удовлетворяющей условию частот.*

Согласно приведенному выше рассмотрению, достаточно показать, что задаваемая функция $\mathbf{H}$ кроме соотношений

$$\frac{\partial \mathbf{H}}{\partial \mathbf{p}} = \frac{\partial \mathbf{H}^*}{\partial \mathbf{p}}, \quad \frac{\partial \mathbf{H}}{\partial \mathbf{q}} = \frac{\partial \mathbf{H}^*}{\partial \mathbf{q}} \tag{45}$$

удовлетворяет еще уравнениям (40). Согласно § 1, $\mathbf{H}^*$ представляется формально как сумма произведений степеней $\mathbf{p}$ и $\mathbf{q}$ и, в силу линейности уравнений (40), (45) относительно $\mathbf{H}$, $\mathbf{H}^*$, мы можем просто для каждого отдельного слагаемого в $\mathbf{H}^*$ указать соответствующее слагаемое в $\mathbf{H}$. Следовательно, нам надо рассмотреть только случай

$$\mathbf{H}^* = \prod_{j=1}^{k} (\mathbf{p}^{s_j}\mathbf{q}^{r_j}). \tag{46}$$

Согласно замечанию в § 2, уравнения (45) выполняются, если $\mathbf{H}$ взять в виде линейной комбинации тех произведений степеней $\mathbf{p}$ и $\mathbf{q}$, которые получаются из $\mathbf{H}^*$ путем циклической перестановки сомножителей, при этом необходимо только сумму коэффициентов положить равной единице. Труднее ответить на вопрос, как следует выбрать эти коэффициенты так, чтобы выполнялись и уравнения (40). Возможно, было бы достаточно здесь исследовать случай $k = 1$, т. е.

$$\mathbf{H}^* = \mathbf{p}^s\mathbf{q}^r. \tag{47}$$

Формула (39) может быть обобщена *):

$$\mathbf{p}^m\mathbf{q}^n - \mathbf{q}^n\mathbf{p}^m = m\,\frac{h}{2\pi i}\sum_{l=0}^{n-1}\mathbf{q}^{n-1-l}\mathbf{p}^{m-1}\mathbf{q}^l. \tag{48}$$

Для $n = 1$ это снова переходит в соотношение (39); в общем виде соотношение (48) следует из того, что в силу (39) выполняется соотношение

$$\mathbf{p}^m\mathbf{q}^{n+1} - \mathbf{q}^{n+1}\mathbf{p}^m = (\mathbf{p}^m\mathbf{q}^n - \mathbf{q}^n\mathbf{p}^m)\,\mathbf{q} + m\frac{h}{2\pi i}\mathbf{q}^n\mathbf{p}^{m+1}.$$

Перестановка $\mathbf{p}$ и $\mathbf{q}$ с изменением знака $h$ дает новую формулу

$$\mathbf{p}^m\mathbf{q}^n - \mathbf{q}^n\mathbf{p}^m = n\,\frac{h}{2\pi i}\sum_{j=0}^{m-1}\mathbf{p}^{m-1-j}\mathbf{q}^{n-1}\mathbf{p}^j. \tag{48'}$$

Сравнивая с (48), получаем

$$\frac{1}{s+1}\sum_{l=0}^{s}\mathbf{p}^{s-l}\mathbf{q}^r\mathbf{p}^l = \frac{1}{r+1}\sum_{j=0}^{r}\mathbf{q}^{r-j}\mathbf{p}^s\mathbf{q}^j. \tag{49}$$

Теперь мы утверждаем: согласно (47), $\mathbf{H}^*$ соответствует

$$\mathbf{H} = \frac{1}{s+1}\sum_{l=0}^{s}\mathbf{p}^{s-l}\mathbf{q}^r\mathbf{p}^l. \tag{50}$$

Нам нужно доказать только соотношения (40), при этом мы должны вспомнить формулу (18′) из § 2.

Согласно (50),

$$\mathbf{Hp} - \mathbf{pH} = \frac{1}{s+1}\,(\mathbf{q}^r\mathbf{p}^{s+1} - \mathbf{p}^{s+1}\mathbf{q}^r)$$

и по (48) это равносильно второму уравнению (40).

Используя (49), мы получаем далее

$$\mathbf{Hq} - \mathbf{qH} = \frac{1}{r+1}\,(\mathbf{p}^s\mathbf{q}^{r+1} - \mathbf{q}^{r+1}\mathbf{p}^s),$$

что, согласно (48′), равносильно первому уравнению (40). Тем самым требуемое доказательство проведено полностью.

В то время как в классической механике закон постоянства энергии $\dot{H} = 0$ можно непосредственно усмотреть из канонических уравнений, закон сохранения энергии $\dot{\mathbf{H}} = 0$ в квантовой механике, как мы видим, не лежит на поверхности.

Насколько не тривиально доказательство этого закона на основе сделанных предположений, становится ясным, если попытаться, при-

---

*) Другое обобщение дается посредством формул

$$\mathbf{p}^m\mathbf{q}^n = \sum_{j=0}^{m,\,n} j!\binom{m}{j}\binom{n}{j}\left(\frac{h}{2\pi i}\right)^j\mathbf{q}^{n-j}\mathbf{p}^{m-j},$$

$$\mathbf{q}^n\mathbf{p}^m = \sum_{j=0}^{m,\,n} j!\binom{m}{j}\binom{n}{j}\left(-\frac{h}{2\pi i}\right)^j\mathbf{p}^{m-j}\mathbf{q}^{n-j},$$

где $j$ возрастает до меньшего из чисел $m$, $n$.

меняя классический прием, доказать постоянство $\mathbf{H}$ путем непосредственного вычисления $\dot{\mathbf{H}}$. С этой целью сначала с помощью (11), (11′) представляют $\dot{\mathbf{H}}$ как функцию $\mathbf{p}, \mathbf{q}$ и $\dot{\mathbf{p}}, \dot{\mathbf{q}}$, после чего для $\dot{\mathbf{p}}, \dot{\mathbf{q}}$ нужно подставить значения $-\partial\mathbf{H}/\partial\mathbf{q}, \partial\mathbf{H}/\partial\mathbf{p}$. Тогда $\dot{\mathbf{H}}$ получается как функция от $\mathbf{p}$ и $\mathbf{q}$. Уравнение (38) и выведенная из него формула, приведенная в подстрочном замечании на предыдущей странице, позволяют представить эту функцию в виде суммы членов вида $a\mathbf{p}^s\mathbf{q}^r$ и доказать, что коэффициент $a$ в каждом таком члене обращается в нуль. Это вычисление для наиболее общего случая, рассматриваемого выше другим способом, столь чрезмерно запутано *), что оно представляется едва ли выполнимым. Если, несмотря на это, оказывается возможным доказать закон сохранения энергии и условие частот в столь общей форме, то такой результат нам кажется серьезным основанием для надежды, что данная теория действительно отражает глубокие физические законы.

В заключение следует отметить здесь еще один результат, который легко получается из формул этого параграфа: *Уравнения* (35), (37) *могут быть заменены* (38) *и* (44) (*где* $\mathbf{H}$ *означает энергию*); *при этом частоты должны определяться из условия частот.*

К важным применениям, к которым приводит это положение мы переходим в продолжении настоящей работы.

## III. ИССЛЕДОВАНИЕ АНГАРМОНИЧЕСКОГО ОСЦИЛЛЯТОРА

Ангармонический осциллятор

$$\mathbf{H} = \frac{1}{2}\mathbf{p}^2 + \frac{\omega_0^2}{2}\mathbf{q}^2 + \frac{1}{3}\lambda\mathbf{q}^3 \tag{51}$$

подробно рассматривался уже Гейзенбергом. Несмотря на это, здесь ему посвящено новое исследование с целью установить для этого случая *наиболее общее* решение основных уравнений. Если основные уравнения теории действительно полны и больше не требуют никакого дополнения, то абсолютные значения $|q(nm)|$, $|p(nm)|$ элементов матриц $\mathbf{q}$ и $\mathbf{p}$ должны определяться ими *однозначно*, и важно доказать это на примере (51). Напротив, следует ожидать, что относительно фаз $\varphi_{nm}$, $\psi_{nm}$ в выражениях

$$q(nm) = |q(nm)|\, e^{i\varphi_{nm}},$$
$$p(nm) = |p(nm)|\, e^{i\psi_{nm}}$$

сохраняется еще неопределенность. Для статистики, например, для взаимодействия квантованных атомов с внешними полями излучения, имеет фундаментальное значение точное установление степени этой неопределенности.

§ 5. Гармонический осциллятор. Исходным пунктом нашего рассмотрения является теория гармонического осциллятора; при малых $\lambda$ можно рассматривать движение, соответствующее уравнению (51), как возмущение гармонических колебаний, обладающих энергией

$$\mathbf{H} = \frac{1}{2}\mathbf{p}^2 + \frac{\omega_0^2}{2}\mathbf{q}^2. \tag{52}$$

И в этой простой задаче к соображениям Гейзенберга необходимо сделать дополнение. Гейзенберг получает на основе принципа соответствия

---

*) Для случая $\mathbf{H} = (1/2m)\,\mathbf{p}^2 + \mathbf{U}(\mathbf{q})$ оно выполняется сразу же с помощью (39′)

важный вывод о форме решения; в то время как в классической задаче имеется только *одна* гармоническая компонента, Гейзенберг вводит матрицу, в которой учитываются только переходы между соседними состояниями, следовательно, имеющую форму

$$\mathbf{q}=\begin{pmatrix} 0 & q^{(01)} & 0 & 0 & 0\ldots \\ q^{(10)} & 0 & q^{(12)} & 0 & 0\ldots \\ 0 & q^{(21)} & 0 & q^{(23)} & 0\ldots \\ \ldots & \ldots & \ldots & \ldots & \ldots \end{pmatrix}. \tag{53}$$

Наша задача состоит в том, чтобы построить всю теорию самостоятельно, не прибегая к помощи классической теории на основе принципа соответствия. Поэтому мы исследуем, нельзя ли форму (53) матрицы вывести из самых основных уравнений, или если это невозможно, то какие дополнительные требования следует поставить.

Из сказанного в § 3 об инвариантности относительно перестановок строк и столбцов сразу же видно, что точная форма матрицы (53) никогда не может быть определена из основных уравнений; действительно, если строки и столбцы переставляют одинаковым образом, то канонические уравнения и квантовое условие остаются инвариантными, следовательно, тем самым находят новое, внешне отличающееся решение. Но все эти решения естественно отличаются только по способу написания, т. е. по нумерации элементов. Мы можем доказать, что путем одной только перенумерации элементов решение всегда может быть приведено к форме (53). Уравнение движения

$$\ddot{\mathbf{q}}+\omega_0^2\mathbf{q}=0 \tag{54}$$

гласит для элементов

$$(\nu^2(nm)-\nu_0^2)\,q(nm)=0, \tag{55}$$

где

$$\omega_0=2\pi\nu_0, \qquad h\nu(nm)=W_n-W_m.$$

Из уточненного квантового условия

$$\mathbf{pq}-\mathbf{qp}=\frac{h}{2\pi i}\,\mathbf{1} \tag{56}$$

следует, что для каждого $n$ должно существовать такое $n'$, что $q\,(nn')\neq 0$; действительно, если бы имелось $n$, для которого бы все $q\,(nn')=0$, то диагональный член от $\mathbf{pq}-\mathbf{qp}$ был бы равен нулю, что противоречит квантовому условию. Поэтому из (55) следует, что всегда существует такое $n'$, для которого

$$|W_n-W_{n'}|=h\nu_0.$$

Но так как в наших основных принципах принималось, что при $n\neq m$ всегда $W_n\neq W_m$, то могут существовать самое большее *два* таких индекса $n'$ и $n''$, потому что соответствующие величины $W_{n'}$, $W_{n''}$ являются решениями квадратного уравнения

$$(W_n-x)^2=h^2\nu_0^2;$$

если действительно существуют *два* таких индекса $n'$, $n''$, то для соответствующих частот следует

$$\nu\,(nn')=-\nu\,(nn''). \tag{57}$$

Теперь из (56) вытекает, что

$$\sum_k \nu(kn)\,|q(nk)|^2 = \nu(n'n)\,\{|q(nn')|^2 - |q(nn'')|^2\} = \frac{h}{8\pi^2}, \tag{58}$$

а энергия (52) будет

$$H(nm) = \frac{1}{2}4\pi^2 \sum_k \{-\nu(nk)\,\nu(km)\,q(nk)\,q(km) + \nu_0^2 q(nk)\,q(km)\} =$$

$$= 2\pi^2 \sum_k q(nk)\,q(km)\,\{\nu_0^2 - \nu(nk)\,\nu(km)\}.$$

В частности, для $m = n$ имеет место

$$H(nn) = W_n = 4\pi^2\nu_0^2\,(|q(nn')|^2 + |q(nn'')|^2). \tag{59}$$

Далее возможны три случая:

а) $n''$ нет, а $W_{n'} > W_n$;

б) $n''$ нет, а $W_{n'} < W_n$;

в) $n''$ есть.

В случае б) мы рассматриваем теперь $n'$ вместо $n$; к нему относятся самое большее два индекса $(n')'$ и $(n')''$, и один из них должен быть равен $n$. Тем самым мы возвращаемся к одному из случаев а) или в) и потому можем случай б) отбросить.

В случае а) $\nu(n'n) = +\nu_0$ и из (58) следует

$$\nu_0\,|q(nn')|^2 = \frac{h}{8\pi^2}, \tag{60}$$

следовательно, согласно (59),

$$W_n = H(nn) = 4\pi^2\nu_0^2\,|q(nn')|^2 = \frac{1}{2}\nu_0 h.$$

В силу предположения $W_n \neq W_m$ при $n \neq m$ получается, таким образом, самое большее *один* индекс, для которого имеет место случай а).

Если такое $n_0$ существует, то мы можем задать ряд чисел

$$n_0,\ n_1,\ n_2,\ n_3,\ \ldots,$$

таким образом, что

$$(n_k)' = n_{k+1} \quad \text{и} \quad W_{k+1} > W_k.$$

Тогда каждый раз

$$(n_{k+1})'' = n_k.$$

Следовательно, для $k > 0$ из (58) и (59) получается

$$H(n_k n_k) = 4\pi^2\nu_0^2\,\{|q(n_k,\ n_{k+1})|^2 + |q(n_k,\ n_{k-1})|^2\}, \tag{61}$$

$$\frac{1}{2}h = 4\pi^2\nu_0\,\{|q(n_k,\ n_{k+1})|^2 - |q(n_k,\ n_{k-1})|^2\}. \tag{62}$$

Из (60) и (62) следует

$$|q(n_k,\ n_{k+1})|^2 = \frac{h}{8\pi^2\nu_0}(k+1) \tag{63}$$

и тогда из (61)

$$W_{n_k} = H(n_k,\ n_k) = \nu_0 h\left(k + \frac{1}{2}\right). \tag{64}$$

Теперь мы еще посмотрим, возможно ли, что нет такого $n$, для которого справедлив случай а). Мы могли бы тогда, начиная с любого $n_0$, образовать $n_0' = n_1$ и $n_0'' = n_{-1}$; к каждому из них образовать снова $n_1' = n_2$,

$n_1'' = n_0$ и $n'_{-1} = n_0$, $n''_{-} = n_{-2}$ и т. д. Таким способом мы получаем числовой ряд

$$\ldots n_{-2},\ n_{-1},\ n_0,\ n_1,\ n_2,\ \ldots, \tag{65}$$

и это дает уравнения (61) и (62) для каждого $k$ между $-\infty$ и $+\infty$. Но это невозможно, так как, согласно (62), величины $x_k = |q(n_{k+1}, n_k)|^2$ образуют ряд равноотстоящих чисел и так как они положительны, то должно иметься наименьшее. Мы снова можем обозначить соответствующий индекс через $n_0$ и тем самым возвращаемся к предыдущему случаю; таким образом, и здесь справедливы формулы (63), (64).

Далее видно: любое число $n$ должно содержаться среди чисел $n_k$, потому что иначе можно было бы образовать новый ряд (65) с числом $n$ в качестве начального члена, при этом снова будет справедлива формула (60). Начальные члены обоих рядов имели бы, следовательно, то же самое значение $W_n = H(nn)$, что невозможно.

Тем самым доказано, что индексы 0, 1, 2, 3, ... могут быть так расположены в новую последовательность, что выполняются формулы (63), (64); тогда в этих новых индексах имеет решение гейзенберговская форма (53). Таким образом, она оказывается «нормальной формой» общего решения. Согласно (64), она имеет то свойство, что

$$W_{n_{k+1}} > W_{n_k}.$$

Если, наоборот, потребовать, чтобы $W_n = H(nn)$ всегда возрастало с увеличением $n$, то будет необходимо выполняться $n_k = k$; таким образом, этот принцип однозначно определяет нормальную форму. Но тем самым будет фиксироваться только способ написания и вычисление будет нагляднее выглядеть; в *физическом смысле* этим не дается ничего нового.

В этом состоит глубокое отличие по сравнению с применявшимся до сих пор полуклассическим определением стационарных состояний. Классически вычисляемые траектории примыкают друг к другу непрерывно, благодаря чему в выделенных в последующем квантовых траекториях с самого начала выступает определенная последовательность. Новая механика представляет собой истинную теорию прерывности, в силу того, что в ней не идет речь о последовательности квантовых состояний, определяемых физическим процессом, а квантовые числа в действительности представляют не что иное, как различающие индексы, которые можно упорядочить и нормировать согласно какой-либо практической точке зрения (например, соответственно возрастающим энергиям $W_n$).

§ 6. **Ангармонический осциллятор.** Уравнения движения

$$\ddot{\mathbf{q}} + \omega_0^2\mathbf{q} + \lambda\mathbf{q}^2 = 0 \tag{66}$$

дают совместно с квантовыми условиями следующую систему уравнений для элементов:

$$\begin{gathered}(\omega_0^2 - \omega^2(nm))\,q(nm) + \lambda\sum_k q(nk)\,q(km) = 0,\\ \sum_k \omega(nk)\,q(nk)\,q(kn) = -\frac{h}{4\pi}.\end{gathered} \tag{67}$$

Попытаемся решить ее путем разложений в ряд

$$\begin{aligned}\omega(nm) &= \omega^0(nm) + \lambda\omega^{(1)}(nm) + \lambda^2\omega^{(2)}(nm) + \ldots,\\ q(nm) &= q^0(nm) + \lambda q^{(1)}(nm) + \lambda^2 q^{(2)}(nm) + \ldots\end{aligned} \tag{68}$$

Для $\lambda = 0$ имеет место случай гармонического осциллятора, рассмотренный в предыдущем параграфе; мы запишем решение (53) в форме

$$q^0(nm) = a_n\delta_{n,m-1} + \bar{a}_m\delta_{n-1,m}, \tag{69}$$

где верхняя черта должна обозначать комплексно-сопряженную величину. Если образовать квадрат и более высокие степени матрицы $\mathbf{q}^0 = (q^0(nm))$, то появляются матрицы аналогичной формы, а именно суммы членов

$$(\xi)^{(p)}_{nm} = \xi_n\delta_{n,m-p} + \bar{\xi}_m\delta_{n-p,m}, \tag{70}$$

поэтому решение напрашивается в форме

$$\left.\begin{aligned} q^0(nm) &= (a)^{(1)}_{nm},\\ q^{(1)}(nm) &= (x)^{(0)}_{nm} + (x')^{(2)}_{nm},\\ q^{(2)}(nm) &= (y)^{(1)}_{nm} + (y')^{(3)}_{nm},\\ &\dots\dots\dots\dots \end{aligned}\right\} \tag{71}$$

причем всегда чередуются четные и нечетные значения индекса $p$.

В самом деле, если это подставить в приближенные уравнения

$$\lambda: \left\{\begin{aligned} &(\omega_0^2 - \omega^0(nm)^2)\,q^{(1)}(nm) - 2\omega^0(nm)\,\omega^{(1)}(nm)\,q^0(nk) + \\ &\qquad + \sum_k q^0(nk)\,q^0(km) = 0,\\ &\sum_k \{\omega^0(nk)\,(q^0(nk)\,q^{(1)}(kn) + q^{(1)}(nk)\,q^{(0)}(kn)) + \\ &\qquad + \omega^{(1)}(nk)\,q^0(nk)\,q^0(kn)\} = 0, \end{aligned}\right. \tag{72}$$

$$\lambda^2: \left\{\begin{aligned} &(\omega_0^2 - \omega^0(nm)^2)\,q^{(2)}(nm) - 2\omega^0(nm)\,\omega^{(1)}(nm)\,q^{(1)}(nm) - \\ &\qquad - (\omega^{(1)}(nm)^2 + 2\omega^0(nm)\,\omega^{(2)}(nm))\,q^0(nm) + \\ &\qquad + \sum_k (q^0(nk)\,q^{(1)}(km) + q^{(1)}(nk)\,q^0(km)) = 0,\\ &\sum_k \{\omega^0(nk)\,(q^0(nk)\,q^{(2)}(km) + q^{(1)}(nk)\,q^{(1)}(km)) + \\ &\qquad + q^{(2)}(nk)\,q^0(km) + \omega^{(1)}(nk)\,q^0(nk)\,q^{(1)}(km) + \\ &\qquad + q^{(1)}(nk)\,q^0(km)) + \omega^{(2)}(nk)\,q^0(nk)\,q^0(km)\} = 0 \end{aligned}\right. \tag{73}$$

и учесть правила перемножения

$$\begin{aligned} \sum_k \Omega_{nkm}\,(\xi)^{(p)}_{nk}\,(\eta)^{(q)}_{km} = {} & \Omega_{n,\,n+p,\,n+p+q}\,\xi_n\eta_{n+p}\delta_{n,\,m-p-q} + \\ & + \Omega_{n,\,n+p,\,n+p-q}\,\xi_n\bar{\eta}_{n+p-q}\delta_{n,\,m-p+q} + \\ & + \Omega_{n,\,n-p,\,n-p+q}\,\bar{\xi}_{n-p}\eta_{n-p}\delta_{n,\,m+p-q} + \\ & + \Omega_{n,\,n-p,\,n-p-q}\,\bar{\xi}_{n-p}\bar{\eta}_{n-p-q}\delta_{n,\,m+p+q}, \end{aligned} \tag{74}$$

то, приравнивая множители при $\delta_{n,\,m-s}$ в отдельности нулю, можно увидеть, что в силу соотношений (71) выполняются как раз все условия и что более высокие члены в (71) тождественно обращаются в нуль.

В частности, вычисление приводит к следующему:

Первое из уравнений (72) дает после подстановки выражений (71):

$$\left.\begin{aligned} 2\omega_0^2 x_n + |a_n|^2 + |a_{n-1}|^2 &= 0,\\ -3\omega_0^2 x_n' + a_n a_{n+1} &= 0,\\ \omega^{(1)}_{n,\,n-1} &= 0, \end{aligned}\right\} \tag{75}$$

второе выполняется идентично. Следовательно, получаем

$$\left.\begin{aligned} x_n &= -\frac{|a_n|^2+|a_{n-1}|^2}{2\omega_0^2}, \\ x'_n &= \frac{a_n a_{n+1}}{3\omega_0^2}. \end{aligned}\right. \tag{76}$$

Первое из уравнений (73) дает

$$\left.\begin{aligned} 2\omega_0 a_n \omega^{(2)}_{n,\,n+1} + 2a_n x_{n+1} + 2a_n x_n + \bar{a}_{n-1}x'_{n+1} + \bar{a}_{n+1}x'_n &= 0, \\ -8\omega_0^2 y'_n + a_n x'_{n+1} + a_{n+2}x'_n &= 0, \\ \omega^{(1)}_{n,\,n-2} &= 0. \end{aligned}\right\} \tag{77}$$

Второе уравнение не выполняется идентично, но дает уравнение для определения величин $y_n$:

$$a_n\bar{y}_n + \bar{a}_n y_n - a_{n-1}\bar{y}_{n-1} - \bar{a}_{n-1}y_{n-1} + 2\,|x'|^2 - \\ - 2\,|x'_{n-2}|^2 - \frac{\omega^{(2)}_{n,\,n+1}}{\omega_0}|a_n|^2 - \frac{\omega^{(2)}_{n,\,n-1}}{\omega_0}|a_{n-1}|^2 = 0. \tag{78}$$

Решение гласит:

$$\left.\begin{aligned} \omega^{(2)}_{n,\,n+1} &= \frac{1}{3\omega_0^3}\left(|a_{n+1}|^2+|a_{n-1}|^2+3\,|a_n|^2\right), \\ y'_n &= \frac{1}{12\omega_0^4}\,a_n a_{n+1} a_{n+2}. \end{aligned}\right. \tag{79}$$

Если далее ввести сокращение

$$\eta_n = a_n\bar{y}_n + \bar{a}_n y_n, \tag{80}$$

то $\eta$ определится из уравнения

$$\eta_n - \eta_{n-1} = \frac{1}{\omega_0^4}\left(|a_n|^4 - |a_{n-1}|^4 + \frac{1}{9}|a_n|^2|a_{n+1}|^2 - \frac{1}{9}|a_{n-1}|^2|a_{n-2}|^2\right). \tag{81}$$

Формулы (76) и (79) показывают, что величины $x_n$, $x'_n$, $y'_n$ выражаются через решение $a_n$ в нулевом приближении. Следовательно, их фазы определятся фазами гармонического осциллятора. Иначе представляется положение с величиной $y_n$, потому что хотя $\eta_n$ можно найти из (81) однозначно, но тогда $y_n$ из (80) полностью не определяется. Вероятно, что в следующем приближении получается дополнительное уравнение, определяющее $y_n$. Мы должны здесь оставить этот вопрос открытым, но хотели бы указать на его принципиальное значение для завершенности всей теории. В самом деле, с этим связаны все статистические вопросы о том, правильно ли наше предположение, что из фаз элементов $q$ $(nm)$ *одна* в каждой строке (или в каждом столбце) матрицы остается неопределенной.

В заключение мы хотим привести явные формулы, которые получаются, если подставить решение для гармонического осциллятора, найденное ранее (§ 5). В нормальной форме оно, согласно (63), гласит:

$$a_n = \sqrt{C(n+1)}\,e^{i\varphi_n}, \qquad C = \frac{h}{4\pi\omega_0} = \frac{h}{8\pi^2\nu_0}. \tag{82}$$

Тем самым, согласно (76), (79), (81) получается

$$\left.\begin{aligned} x_n &= -\frac{C}{2\omega_0^2}(2n+1),\\ x'_n &= \frac{C}{3\omega_0^2}\sqrt{(n+1)(n+2)}\,e^{i(\varphi_n+\varphi_{n+1})},\\ y'_n &= \frac{\sqrt{C^3}}{12\omega_0^4}\sqrt{(n+1)(n+2)(n+3)}\,e^{i(\varphi_n+\varphi_{n+1}+\varphi_{n+2})}, \end{aligned}\right\} \quad (83)$$

$$\left.\begin{aligned} \omega_{n,\,n-1}^{(1)} &= 0,\\ \omega_{n,\,n-2}^{(1)} &= 0,\\ \omega_{n,\,n-1}^{(2)} &= -\frac{5}{3}\frac{C}{\omega_0^3}\,n; \end{aligned}\right\} \quad (84)$$

следовательно,

$$\eta_n-\eta_{n-1}=\frac{11}{9}\frac{C^2}{\omega_0^4}(2n+1), \quad \eta_n=a_n\bar{y}_n+\bar{a}_n y_n=\frac{11}{9}\frac{C^2}{\omega_0^4}(n+1)^2.$$

Если положить $y_n=|y_n|e^{i\psi_n}$, то будет

$$|y_n|\cos(\varphi_n-\psi_n)=\frac{\eta_n}{2|a_n|}=\frac{11}{18}\frac{\sqrt{C^3}}{\omega_0^4}\sqrt{(n+1)^3}. \quad (85)$$

В этом приближении относительно $y_n$ больше ничего нельзя сказать.

Мы выпишем, однако, заключительные формулы в предположении $\psi_n=\varphi_n$. В этом случае они имеют вид (за исключением членов более высокого порядка, чем второго, по отношению к $\lambda$)

$$\begin{aligned} \omega(n,\,n-1) &= \omega_0-\lambda^2\frac{5}{3}\frac{C}{\omega_0^3}n+\ldots,\\ \omega(n,\,n-2) &= 2\omega_0+\ldots; \end{aligned} \quad (86)$$

$$\left.\begin{aligned} q(n,\,n) &= -\lambda\frac{C}{\omega_0^2}(2n+1)+\ldots,\\ q(n,\,n-1) &= \sqrt{Cn}\,e^{i\varphi_{n-1}}\left(1+\lambda^2\frac{11}{18}\frac{Cn}{\omega_0^4}+\ldots\right),\\ q(n,\,n-2) &= \lambda\frac{C}{3\omega_0^2}\sqrt{n(n-1)}\,e^{i(\varphi_{n-1}+\varphi_{n-2})}+\ldots,\\ q(n,\,n-3) &= \lambda^2\frac{\sqrt{C^3}}{12\omega_0^4}\sqrt{n(n-1)(n-2)}\,e^{i(\varphi_{n-1}+\varphi_{n-2}+\varphi_{n-3})}+\ldots \end{aligned}\right\} \quad (87)$$

Мы также рассчитали энергию непосредственно и нашли:

$$W_n=h\nu_0\left(n+\frac{1}{2}\right)-\lambda^2\frac{5}{3}\frac{C^2}{\omega_0^2}\left(n(n+1)+\frac{17}{30}\right)+\ldots \quad (88)$$

Условие частот действительно выполняется, так как при учете (82) получается

$$\begin{aligned} W_n-W_{n-1} &= h\nu_0-\lambda^2\frac{2C^2}{\omega_0^2}n+\ldots = \frac{h}{2\pi}\omega(n,\,n-1),\\ W_n-W_{n-2} &= 2h\nu_0+\ldots \qquad\qquad\quad = \frac{h}{2\pi}\omega(n,\,n-2). \end{aligned}$$

С формулой (88) можно связать замечание Гейзенберга о том, что уже в членах наинизшего порядка имеется отклонение от классической теории, которое формально устраняется введением «полуцелого» квантового числа $n'=n+(1/2)$. Впрочем, наши выражения $\omega(n,\,n-1)$, согласно (86), и классические частоты совпадают *точно*. В самом деле, классическая энергия имеет вид *)

$$W_n^{(kl)} = h\nu_0 n - \lambda^2 \cdot \frac{5}{3} \frac{C^2}{\omega_0^2} n^2 + \ldots$$

Следовательно, классическая частота равна

$$\omega_{kl} = \frac{1}{h} \frac{\partial W_n^{(kl)}}{\partial n} = h\nu_0 - \lambda^2 \frac{5}{3} \frac{C^2}{\omega_0^2} n + \ldots = \omega_{qu}(n, n-1) = \frac{1}{h}\left(W_n^{(qu)} - W_{n-1}^{(qu)}\right).$$

Наконец мы проверили, что выражение (88) можно получить также из формулы теории возмущений Крамерса — Борна (с точностью до аддитивной постоянной).

## IV. ЗАМЕЧАНИЯ ПО ЭЛЕКТРОДИНАМИКЕ

Согласно Гейзенбергу, квадраты абсолютных значений $|q(nm)|^2$ элементов $\mathbf{q}$ для случая, когда $\mathbf{q}$ есть декартова координата, являются мерой *вероятностей скачков.* В заключение мы хотели бы здесь показать, каким образом можно получить обоснование данного предположения из более общих соображений. Для этого небходимо обсудить вопрос о том, как следует истолковать основные уравнения электродинамики в духе новой теории. Но мы хотели бы подчеркнуть, что излагаемые здесь соображения имеют лишь предварительный характер; они должны показать наш принципиальный подход к задаче. Исчерпывающее изложение затронутых здесь вопросов будет дано позднее, при этом прежде всего должно быть освещено отношение изложенной теории к теории квантов света.

Мы хотим здесь обсудить только такие вопросы, которые могут быть разрешены, не прибегая к точной форме квантовых условий для системы со многими степенями свободы. То, что это позволяет достаточно глубоко войти в электродинамику, можно видеть из следующих соображений. Полость, в которой происходят электромагнитные колебания, представляет собой систему с *бесконечно многими степенями свободы.* Несмотря на это, основные законы, развитые в предыдущих главах, которые ведь относятся только к системе с одной степенью свободы, достаточны для ее трактовки, потому что после разложения ее по собственным колебаниям она переходит в систему *несвязанных* осцилляторов. Едва ли может быть сомнение в том, как следует трактовать эту систему. При этом обнаруживается особое значение того обстоятельства, что основные электромагнитные уравнения линейны (принцип суперпозиции); в самом деле, из этого следует, что заменяющие поле осцилляторы *гармоничны*, а именно для гармонических осцилляторов— в противоположность поведению других систем —справедлив закон сохранения энергии независимо от квантовых условий. Из

$$\mathbf{H} = \frac{1}{2}(\mathbf{p}^2 + \omega_0^2 \mathbf{q}^2)$$

вытекает

$$\dot{\mathbf{H}} = \frac{1}{2}(\dot{\mathbf{p}}\mathbf{p} + \mathbf{p}\dot{\mathbf{p}} + \omega_0^2 \dot{\mathbf{q}}\mathbf{q} + \omega_0^2 \mathbf{q}\dot{\mathbf{q}}) = \frac{1}{2}\omega_0^2(-\mathbf{q}\mathbf{p} - \mathbf{p}\mathbf{q} + \mathbf{p}\mathbf{q} + \mathbf{q}\mathbf{p}) = 0.$$

В силу этого следует ожидать, что интегральные законы электродинамики вакуума (законы сохранения энергии и импульса) получаются совершенно общим образом из уравнений Максвелла, истолкованных матричным образом, но только без учета квантовых условий. Показывая это, мы

*) См.: M. B o r n, Vorlesungen über Atommechanik, Bd. 1, Brl., 1925, 4. Kap., § 42, S. 294. Чтобы согласовать с нашим выражением, в формуле (6) следует положить $a = 1/3$.

одновременно получаем средство обосновать гейзенбергово толкование смысла $|q(nm)|^2$.

§ 7. Уравнения Максвелла. Законы сохранения энергии и импульса. Мы хотим условиться, что здесь, как обычно, *векторы* всегда обозначаются готическими буквами, в то время как числа и матрицы по-прежнему выделяются светлым и жирным шрифтами. Единицы измерения мы выбираем в соответствии с учебником Абрагама *).

Электромагнитные процессы в вакууме могут быть представлены в виде суперпозиции плоских волн. В такой плоской волне мы будем рассматривать напряженности электрического и магнитного полей $\mathfrak{E}$ *и* $\mathfrak{H}$ как *матрицы*, элементами которых являются гармонически колеблющиеся плоские волны, следовательно, например, при соответствующем выборе системы координат

$$\mathfrak{E} = (\mathfrak{E}(nm)\, e^{2\pi i\nu(nm)[t-(x/c)]}). \tag{89}$$

Конечно, здесь должно быть учтено, что $n$, $m$, вообще говоря, больше не ограничиваются дискретным множеством значений, они обозначают не отдельные числа, а системы чисел (векторы).

Уравнения Максвелла остаются в виде матричных уравнений

$$\operatorname{rot}\mathfrak{H} - \frac{1}{c}\dot{\mathfrak{E}} = 0, \qquad \operatorname{rot}\mathfrak{E} + \frac{1}{c}\dot{\mathfrak{H}} = 0. \tag{90}$$

При этом дифференцирование по $x$, $y$, $z$, $t$ следует представлять себе выполненным в каждом отдельном элементе матрицы **).

Мы выведем теперь законы сохранения энергии и импульса; для этого необходимо предпослать некоторые замечания о перемножении векторных матриц.

Мы определяем *скалярное произведение* как

$$(\mathfrak{A}\mathfrak{B}) = \mathfrak{A}\mathfrak{B} = \mathfrak{A}_x\mathfrak{B}_x + \mathfrak{A}_y\mathfrak{B}_y + \mathfrak{A}_z\mathfrak{B}_z, \tag{91}$$

а *векторное произведение* как

$$[\mathfrak{A}\mathfrak{B}]_x = \mathfrak{A}_y\mathfrak{B}_z - \mathfrak{A}_z\mathfrak{B}_y. \tag{92}$$

Так как произведение матриц не коммутативно, то соотношения

$$\mathfrak{A}\mathfrak{B} = \mathfrak{B}\mathfrak{A}, \quad [\mathfrak{A}\mathfrak{B}] = -[\mathfrak{B}\mathfrak{A}],$$

вообще говоря, *не будут* верными. Однако мы утверждаем

$$\operatorname{div}[\mathfrak{A}\mathfrak{B}] = (\operatorname{rot}\mathfrak{A}, \mathfrak{B}) - (\mathfrak{A}, \operatorname{rot}\mathfrak{B}). \tag{93}$$

Далее мы определяем *плотность энергии* $\mathbf{W}$ (как скалярную матрицу) как

$$\mathbf{W} = \frac{1}{8\pi}(\mathfrak{E}^2 + \mathfrak{H}^2). \tag{94}$$

Тогда, согласно (11), будет

$$2\pi\dot{\mathbf{W}} = \mathfrak{E}\dot{\mathfrak{E}} + \dot{\mathfrak{E}}\mathfrak{E} + \mathfrak{H}\dot{\mathfrak{H}} + \dot{\mathfrak{H}}\mathfrak{H}$$

и, согласно (90)

$$\frac{8\pi}{c}\dot{\mathbf{W}} = (\mathfrak{E}, \operatorname{rot}\mathfrak{H}) + (\operatorname{rot}\mathfrak{H}, \mathfrak{E}) - (\mathfrak{H}, \operatorname{rot}\mathfrak{E}) - (\operatorname{rot}\mathfrak{E}, \mathfrak{H}),$$

*) M. Abraham, Theorie der Elektrizität, Bd. 2. Lpz., 1914.

**) При известных условиях необходима другая трактовка электромагнитного поля, при которой пространственные координаты представляются не числами, а в свою очередь матрицами; это приводит к соответствующему изменению смысла пространственных производных в уравнениях Максвелла. Мы вернемся к этому в продолжении данной работы.

следовательно, согласно (93),

$$\dot{\mathrm{W}} + \operatorname{div}\mathfrak{S} = 0, \tag{95}$$

где

$$\mathfrak{S} = \frac{c}{8\pi}([\mathfrak{E}\mathfrak{H}] - [\mathfrak{H}\mathfrak{E}]). \tag{96}$$

Это есть *закон Пойнтинга* для матричной электродинамики; $\mathfrak{S}$ означает *вектор излучения*.

Подобным же образом можно вывести закон сохранения импульса; *напряжения Максвелла* определяется как

$$\begin{aligned} \mathrm{T}_{xx} &= \frac{1}{8\pi}(\mathfrak{E}_x^2 - \mathfrak{E}_y^2 - \mathfrak{E}_z^2) - (\mathfrak{H}_x^2 - \mathfrak{H}_y^2 - \mathfrak{H}_z^2), \\ \mathrm{T}_{yz} &= \frac{1}{8\pi}(\mathfrak{E}_y\mathfrak{E}_z + \mathfrak{E}_z\mathfrak{E}_y + \mathfrak{H}_y\mathfrak{H}_z + \mathfrak{H}_z\mathfrak{H}_y), \end{aligned} \tag{97}$$

а *плотность импульса* излучения как

$$\mathfrak{g} = \frac{1}{c^2}\mathfrak{S} = \frac{1}{8\pi c}([\mathfrak{E}\mathfrak{H}] - [\mathfrak{H}\mathfrak{E}]). \tag{98}$$

Затем таким же вычислением получают

$$\dot{\mathfrak{g}}_x = \frac{\partial \mathrm{T}_{xx}}{\partial x} + \frac{\partial \mathrm{T}_{xy}}{\partial y} + \frac{\partial \mathrm{T}_{xz}}{\partial z}. \tag{99}$$

Конечно, эти соотношения выигрывают в наглядности, если используют четырехмерный способ представления теории относительности. Систематическое изложение четырехмерного векторного анализа и теории относительности на основе матричной теории с ее некоммутативным перемножением будет дано в другом месте.

**§ 8. Шаровые волны. Излучение диполя.** Имея в виду нашу цель — вычисление излучения осциллятора, мы должны теперь рассмотреть *шаровые волны*.

Введем с этой целью *вектор Герца* $\mathfrak{Z}$ как векторную матрицу; из $\mathfrak{Z}$ получаются $\mathfrak{E}$ и $\mathfrak{H}$ согласно уравнениям

$$\mathfrak{E} = \operatorname{grad}\operatorname{div}\mathfrak{Z} - \frac{1}{c^2}\ddot{\mathfrak{Z}}, \qquad \mathfrak{H} = \frac{1}{c}\operatorname{rot}\dot{\mathfrak{Z}}. \tag{100}$$

В классической теории шаровая волна $\mathfrak{Z}$ пропорциональна

$$\frac{1}{r}e^{2\pi i\nu[t-(r/c)]}.$$

Далее известно *), что это выражение может быть записано как суперпозиция плоских волн на основе тождества

$$\frac{e^{i\varkappa r}}{r} = \frac{i\varkappa}{2\pi}\int e^{i\varkappa(\mathfrak{r}\,\mathfrak{s})}\,d\omega, \tag{101}$$

при этом $\mathfrak{r}$ — вектор-число от центра шаровой волны до точки приложения, $\mathfrak{f}$ — единичный вектор, $d\omega = d\mathfrak{j}_x, \ d\mathfrak{j}_y \ d\mathfrak{j}_z$. Таким образом, и в нашей теории можно образовать шаровую волну из плоских волн, представляемых матрицами в форме (89), выполнив интегрирование по направлениям нормалей к этим величинам:

$$\mathfrak{Z} = \left(e\mathfrak{q}\,(nm)\,\frac{1}{r}\,e^{2\pi i\nu(nm)[t-(r/c)]}\right); \tag{102}$$

*) См., например: P. Debye, Ann. d. Phys. 30, 755 (1909), формула (7''), с. 758.

при этом матрица $e\mathfrak{q} = (e\mathfrak{q}(nm))$ представляет собой электрический момент, который возбуждает волну.

Вычисления, ведущие отсюда к определению магнитного поля и излучения, те же самые, как и в классической теории, так как $\mathfrak{r}$, как вектор-число, коммутирует с любой матрицей. Получаем

$$\mathfrak{H} = -\frac{e}{c^2}\frac{1}{r^2}[\mathfrak{r}\ddot{\mathfrak{q}}], \quad \mathfrak{E} = \frac{e}{c^2}\frac{1}{r^3}[\mathfrak{r}[\mathfrak{r}\ddot{\mathfrak{q}}]], \tag{103}$$

откуда

$$\mathfrak{S} = \frac{e}{4\pi c^3}\frac{\mathfrak{r}}{r}[\mathfrak{r}\ddot{\mathfrak{q}}]. \tag{104}$$

Интегрирование по всем пространственным направлениям осуществляется так же, как и в классической теории. Для энергии, излучаемой в секунду, получается результат

$$\int \mathfrak{S}\, d\mathfrak{f} = \frac{2}{3}\frac{e^2}{c^3}\ddot{\mathfrak{q}}. \tag{105}$$

Чтобы получить среднее излучение, надо усреднить это выражение по времени; в результате этого получается диагональная матрица

$$\frac{2}{3}\frac{e^2}{c^3}\overline{\ddot{\mathfrak{q}}}. \tag{106}$$

Если осциллятор колеблется в определенном направлении, мы можем векторную матрицу $\mathfrak{q}$ заменить скалярной матрицей $\mathbf{q} = (q(nm))$. Тогда излучение будет

$$\frac{2}{3}\frac{e^2}{c^3}\overline{\ddot{\mathbf{q}}^2} = \frac{32\pi^4 e^2}{3c^3}\left(\sum_k \nu(nk)^4 |q(nk)|^2\right). \tag{107}$$

Мы не можем еще дать здесь полной теории излучения, из которой можно было бы с уверенностью заключить о сопоставлении отдельных членов этого ряда стационарным состояниям, для этого необходимо было бы точное исследование отдачи излучения на осциллятор, следовательно, была бы нужна теория затухания. Мы вернемся к этому позднее. Здесь мы только проверим, действительно ли излучение определяется величинами $|q(nk)|^2$; выражение (107) показывает, что это так, но одновременно мы видим, что выписанные величины не представляют полное спонтанное излучение, исходящее из стационарного состояния. В самом деле, спонтанные переходы всегда происходят только в состояния с меньшей энергией или, при соответствующей нумерации, в состояния с меньшим квантовым числом. Мы можем теперь установить чисто формальным образом, как это обстоятельство выражается в нашей теории; для этого мы образуем не среднее значение, а *диагональную сумму* матрицы излучения (105), что дает

$$D\left(\frac{2}{3}\frac{e^2}{c^3}\ddot{\mathbf{q}}^2\right) = \frac{32\pi^4 e^2}{3c^3}\sum_{nk}\nu(nk)^4|q(nk)|^2. \tag{108}$$

Здесь мы можем в правой части преобразовать сумму и написать

$$\frac{64\pi^4 e^2}{3c^3}\sum_n \sum_{k<n}\nu(nk)^4|q(nk)|^2. \tag{109}$$

Таким образом, достигнуто желаемое сопоставление; к каждому состоянию $m$ относится излучение, которое соответствует переходам во все состояния с $k < n$, каждому из них с интенсивностью, известной из классической теории. Это согласуется с опытом, если предположить, что индексы $n$ упорядочены по возрастающим энергиям $W_n$.

Таким образом, допущение Гейзенберга оправдано в вышеуказанном, ограниченном смысле.

Здесь следует также подчеркнуть, что это утверждение относительно вероятностей скачков независимо от предположения о невырожденности системы, т. е. о различии всех $W_n$. В заключение еще подчеркнем, что вместе с вероятностями переходов определяются также и *статистические веса* состояний, а именно каждому состоянию, соответствующему строке и столбцу или диагональному элементу матрицы W, должен быть приписан *одинаковый* статистический вес. Что этот результат (в своем обобщении на системы с многими степенями свободы) сам собою приводит к основному принципу бозе-эйнштейновской статистики световых квантов, будет показано позднее.

*Замечание при корректуре.* Объявленное ранее обобщение теории на системы со многими степенями свободы тем временем разработано нами совместно с В. Гейзенбергом и будет представлено как продолжение настоящей работы. Там будут более подробно освещены и различные уже затронутые здесь вопросы, которые за это время были выяснены дальше.