

WERNER HEISENBERG ÉS A MÁTRIXMECHANIKA

László István

Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem, Elméleti Fizika Tanszék, Budapest

E-mail: laszlo@eik.bme.hu

Amikor az egyetemen a kvantummechanikát tanuljuk, először a Schrödinger-egyenlettel és rajta keresztül a hullámmechanikával ismerkedünk meg. A mátrixmechanika vázlatos ismertetésére szinte a bevezető kurzus vége felé kerül sor az operátorok mátrixelemeinek ismertetésével a Hilbert-téren, amikor már megoldottuk az összes alapvető kvantummechanikai problémát. Ekkor adódik a kérdés, hogy Heisenberg hogyan tudta kitalálni a mátrixmechanikát anélkül, hogy ismerte volna az operátorok és a Hilbert-tér szerepét a kvantumos jelenségek leírására. Nem beszélve arról, hogy hogyan kerültek elő neki a mátrixok, amikor nem ismerte azok fogalmát sem. A következőkben ezekre a kérdésekre próbálunk választ adni.

A „régí kvantummechanika”

A kvantummechanika felfedezéséhez vezető út röviden a következő [1]. Max Planck a feketetest hőmérsékleti sugárzását annak feltételezésével tudta megmagyarázni 1900-ban, hogy az üregbe zárt ν frekvenciájú sugárzás energiája csak a $h\nu$ mennyiség egész számú többszöröse lehet, vagyis nem folytonos, hanem kvantált. Itt h a Planck-állandó. Így jött ki a kísérleti eredmény, és Planck reménykedett, hogy valamikor megtalálja a helyes magyarázatot. Ezt a gondolatot Albert Einstein 1905-ben alkalmazta a szabadon terjedő elektromágneses hullámokra, és a fényelektromos jelenséget úgy értelmezte, hogy a ν frekvenciájú fény $h\nu$ energiát ad át a fémbe zárt elektronnak. A $h\nu$ energiacsomag neve lett később a foton. Ezzel Einstein a fényt részecske tulajdonsággal ruházta fel, és ezért kapta Nobel-díját 1921-ben.

Niels Bohr 1922-ben kapott Nobel-díjat 1913-ban közölt munkájáért, amelyben úgy írta le a hidrogénatom elektromágneses sugárzását, hogy posztulálta, ha az elektron impulzusmomentuma a $\hbar = (h/2\pi)$ mennyiség egész számú többszöröse, akkor az atom, szemben a klasszikus elmélettel, nem sugároz. Ezeket a pályákat nevezte stacionárius pályáknak, és sugárzás kibocsátása vagy elnyelése akkor történik, amikor az elektron átke-

rül egyik stacionárius pályáról a másikra. A kisugárzott vagy elnyelt sugárzás ν frekvenciájára pedig igaz, hogy $h\nu$ megegyezik a két pálya energiájának a különbségével.

Amikor Louis de Broglie 1923-ban a hullám-részecske kettős természetet kiterjesztette az addigi részecskékre is, létrejött a *régí kvantummechanika*.

A régi kvantummechanikához tartoztak a Bohr-modellből kiolvasott, úgynevezett Kramers-szabályok. Ezek azt mondják meg, hogy hogyan kell megváltoztatni a klasszikus fizikai formulákat, hogy a kísérleti eredményeket le tudják írni. A Bohr–Kramers–Slater-elmélet [2] alapján feltételezték továbbá, hogy bár az atomok stacionárius állapotban nem sugároznak, de stacionárius állapotok közötti átmenetek során és „virtuális rezgéseket végezve” sugárzást bocsátanak ki, illetve nyelnek el.

A régi kvantummechanikának sikerült néhány atomi tulajdonságot megmagyarázni, de nem adott számot például a molekulák és a szilárdtestek elektromos vezetési tulajdonságairól, ráadásul tele volt *ad hoc* lépésnek tűnő mesterséges gondolattal, fogalommal.

Az „új kvantummechanika” születése: Heisenberg

A napjainkban is ismert *új kvantummechanikának* a megszületését Werner Heisenberg (1901–1976) 1925-ben közölt mátrixmechanikájától és Erwin Schrödinger (1887–1961) 1926-ban közölt hullámmechanikájától számítjuk. Megjelenésük után hamarosan bebizonyították, hogy a két kvantummechanika ugyanaz, csak más matematikai formában vannak megfogalmazva.

Werner Heisenberg Würzburgban született, és édesapja 1909-től a müncheni egyetemen bizantinológusként a közép- és újjörög nyelv tanára volt. Így fia már gimnazistakorában görögül olvasta Platónt. Heisenberg Sommerfeldnél doktorált 1923-ban. A doktori vizsga nem sikerült valami fényesre [3], mert az 1911-ben Nobel-díjjal jutalmazott Wien a kísérleti részre a lehető leggyengébb, de még nem a bukást jelentő jegyet adta, viszont Sommerfeld az elméleti rész kidolgozása miatt a lehető legjobbat. A disszertáció témája igen nehéz volt: „Folyadékok áramlásának stabilitása és turbulenciája”. Heisenberg apja megkérte James Franckot, az 1925. év Nobel-díjasát, hogy tanítsa meg fiának a kísérleti fizikát. Néhány laboratóriumi látogatás után Franck kijelentette, hogy szerinte az lesz a legjobb, ha patronáltja elméleti fizikus lesz.

Heisenberg attól tartott, hogy gyenge vizsgája miatt Max Born nem fogja őt asszisztensként alkalmazni, mint Pauli utódja. Born látva Wien trükkös kérdéseit,



László István fizikus, címzetes egyetemi tanár a BME Fizikai Intézet Elméleti Fizika Tanszékén, az MTA doktora. Kutatási területe a molekulafizika, fullerének, nanocsövek, kémiai gráfelmélet és szoros kötésű molekuladinamikai számítások.

felfogadta őt, és később így emlékezett róla: „Úgy nézett ki, mint egy parasztfiú, rövid nadrágban, szőke hajjal, fényes tekintettel és elragadó megjelenéssel. Feladatait komolyabban vette, mint Pauli, és nagy segítség volt nekem. Hihetetlen gyorsasága és pontossága lehetővé tette számára, hogy hatalmas munkát tudott elvégezni különösebb erőfeszítés nélkül” [4]. Born első feladatként az anomális Zeeman-effektus problémáját adta Heisenbergnek, amit ő sikeresen megoldott. Kortársai furcsának tartották, hogy $\frac{1}{2}$ értékű kvantumszámot vezetett be. Itt, Göttingenben habilitált 1924-ben, és több alkalommal dolgozott 1924–26-ban Niels Bohr asszisztenseként a koppenhágai egyetemen.

Heisenberg első cikke a mátrix-mechanikáról

Heisenbergnek a mátrixmechanikáról szóló első cikke 1925-ben jelent meg, melynek címe *Kinematikai és mechanikai összefüggések kvantumelméleti áttértelezéséről* [5, 6]. Erről a közleményről a következőt írta Steven Weinberg, aki 1979-ben kapott Nobel-díjat az elektromágnességet és a gyenge kölcsönhatást egyesítő elektromágneses kölcsönhatás elméletének a kidolgozásáért: „Ha az ember misztikusnak találja, amit Heisenberg tett, nincs egyedül. Én már több alkalommal megpróbáltam elolvasni azt a cikket, amit Heisenberg írt visszatérve Helgolandra, és bár úgy gondolom, hogy értem a kvantummechanikát, sohasem értettem meg motivációit, melyek a cikkében található matematikai lépéseket indokolták. Az elméleti fizikusok legsikeresebb munkáikban a következő szerepek egyikét játszik: ők vagy bölcsek vagy mágusok... Általában könnyű megérteni a bölcs fizikusokat, de a mágus fizikusok cikkei gyakran érthetetlenek. Ilyen értelemben Heisenberg 1925-ös cikke tiszta mágia” [7]. Jammer megállapítja [8], hogy az átmenet a régi kvantummechanikából az újba rendkívül gyors volt, és nem egyetlen gondolatfolyamat volt, nem is „felfelé haladó lépcső”, hanem „összefüggő síkatorok szövevénye”.

MacKinnon feltételezte [9], hogy Heisenberg 1925 júniusában és júliusában, amikor híres cikkéhez készítette a számításokat, valójában a virtuálisoszillátor-modellt próbálta alkalmazni a hidrogénatomra. Feltételezését Heisenberg Kronighoz 1925. június 5-én írt levelével indokolja. Ebben a levélben van egy ábra [9, 10], amely szerint a K Coulomb-erőt számolta ki egy P pontban, melytől a távolságra merőlegesen rezgett egy dipólusoszillátor. Heisenberg itt megmutatta, hogy az oszcillátor $x(t)$ kitérésének Fourier-együtthatóival ki lehet fejezni a K erő Fourier-sorát az oszcillátor kitérésének függvényében. Ez egy tipikus gondolat a virtuális rezgéseket tartalmazó Bohr–Kramers–Slater-elmélet szellemében. MacKinnon szerint Heisenbergnek nem sikerült a hidrogénatom spektrumát megmagyarázni. Ekkor egyszerűsítette a feladatot, és csak a rezgésekkel foglalkozott. Miután elvégezte a számításokat, akkor vette észre, hogy

egy általános módszert talált az új kvantummechanikára. Valószínű, ez a feltételezés nem lehet távol a valóságtól, mert MacKinnon cikke végén köszönetet mondott Heisenbergnek, hogy elolvasta annak egyik változatát. Ha nem értett volna egyet az abban foglaltakkal, bizonyára tiltakozott volna. Maga Heisenberg is írja Pauli tiszteletére írt emlékcikkében [11], hogy „Először 1925 tavaszán próbáltam meg a hidrogén spektrumának intenzitási képletéhez eljutni a Kepler-pálya Fourier-sorának tanulmányozásával, hogy könnyebben kitalálhassam a helyes kvantumelméleti intenzitásképleteket. A Kepler-probléma túl nehéznek bizonyult ehhez, de felmerült az ötlet, hogy az *átmeneti elemek összessége* éppúgy reprezentálja az elektron koordinátáit, mint a klasszikus fizikában a Fourier-sor”.

Heisenberg cikkének elején kijelenti, hogy „a formális szabályokkal szemben, melyeket általában a kvantumelméletben megfigyelhető mennyiségek (pl. a hidrogénatom energiája) kiszámítására használnak, az a súlyos kifogás emelhető, hogy e számítási szabályok lényeges alkotóelemként olyan mennyiségek között fennálló összefüggéseket tartalmaznak, amelyek – úgy látszik – elvileg megfigyelhetetlenek (mint pl. az elektron helye, keringési ideje)” [5, 6].

A megfigyelhető mennyiségek közti alapösszefüggésként Heisenberg a Bohr-féle frekvenciafeltételre épít. Ennek értelmében amikor az elektron egy n -edik stationárius pályáról (energiája $W(n)$) egy $(n - \alpha)$ -edik stationárius pályára (energiája $W(n - \alpha)$) megy át (ahol n és $n - \alpha$ egész szám), akkor sugárzást bocsát ki, aminek $\nu(n, n - \alpha)$ frekvenciáját, azaz $\omega(n, n - \alpha)$ körfrekvenciáját így adjuk meg:

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

Itt és a továbbiakban is Heisenberg jelöléseit alkalmazzuk, kivéve a gót betűket, melyeket a megfelelő latin betűkkel helyettesítünk.

A Bohr-féle frekvenciafeltétel akkora szakítást jelent a klasszikus mechanikával, hogy a klasszikus mechanika érvényessége megszűnik a legegyszerűbb kvantumelméleti problémák (atomi tulajdonságok) tárgyalása esetén is. A klasszikus mechanikával való kapcsolatra mégis szükség van, e tekintetben Heisenberg Born cikkére [12] hivatkozik, ahol a szerző csak úgy tudja a korrespondenciaelvel megkapni a helyes kvantummechanikai kifejezéseket, ha a nagy kvantumszámok esetén szükséges deriválásokat kis kvantumszám estén differenciáhányaddal helyettesíti [8, 12]. Vagyis

$$\frac{\partial \Phi(n)}{\partial n} \leftrightarrow \frac{\Phi(n + \alpha) - \Phi(n)}{\alpha}, \quad (2)$$

ahol Φ valamely kvantumszámtól függő mennyiség.

Heisenberg az atom sugárzásának leírását célozta az új kvantumelméleti mechanika megalkotásával, a Kramers-féle diszperziós elméletre alapozva. Kramers [13] a Bohr–Kramers–Slater-elmélet [2] alapján az atomok

polarizációjára kapott egy kifejezést, miközben az atomról feltételezte, hogy különböző frekvenciájú oszcillátorokból épül fel. A klasszikus fizika törvényei alapján kiszámolta a polarizációt, majd az oszcillátorok frekvenciáit az (1) Bohr-féle frekvenciafeltétellel helyettesítette, ügyelve a korrespondenciaelvre, azaz arra, hogy nagy kvantumszámok esetén megkapja a klasszikus formulát.

Heisenberg a továbbiakban megadja, hogy a klasszikus fizikában hogyan néz ki a mozgó elektron sugárzása a hullámmódozatban. Vagyis

$$\mathbf{E} = \frac{e}{r^3 c^2} \mathbf{r} \times (\mathbf{r} \times \mathbf{v}) \quad (3)$$

és

$$\mathbf{H} = \frac{e}{r^2 c^2} \dot{\mathbf{v}} \times \mathbf{r} \quad (4)$$

az elektromos és a mágneses térerősség első rendben. Ezekhez a következő közelítésben további tagok járulnak, például

$$\frac{e}{rc^3} \dot{v}v, \quad (5)$$

illetve magasabb rendben

$$\frac{e}{rc^4} \dot{v}v^2 \quad (6)$$

alakú tagok. Az elektron töltése e , v a sebessége és r a távolsága a kiszemelt ponttól, ahol a sugárzást megadjuk.

Ezután következik néhány mondat, amelyek problémát okozhatnak első olvasásra. „A klasszikus elméletben az (5)–(6) magasabb rendű közelítések egyszerűen kiszámíthatók, ha az elektron mozgása, illetve annak Fourier-előállítására adott, így tehát valami hasonlót várunk a kvantumelméletben is. [...] A kérdés a legegyszerűbb alakban így fogalmazható meg: Legyen adott az $x(t)$ klasszikus mennyiség helyére lépő kvantummechanikai mennyiség! Mely kvantummechanikai mennyiség foglalja el ekkor $x(t)^2$ helyét?” Itt Heisenberg sejteti gondolatmenetének indokait, miközben néhány mondattal korábban azt tanácsolta, hogy fel kell adni reményünket az eddig meg nem figyelt mennyiségek – mint az elektron helye – megfigyelésére, és csak megfigyelhető mennyiségek között fennálló összefüggésekkel foglalkozunk. Most mégis az $x(t)$ és $x(t)^2$ klasszikus mennyiség helyére lépő kvantummechanikai mennyiségeket keresi?

Heisenbergnek, miközben Kramers-szel elkészítette közös cikküket [14], támadhatott az a gondolata, hogy ha a klasszikus E elektromos tér Fourier-sora

$$E(n, t) = \sum_{\alpha=-\infty}^{\infty} E_{\alpha}(n) e^{i\omega(n)\alpha t}, \quad (7)$$

akkor ennek kvantummechanikai alakja a Kramers-elmélet [11] szerint

$$E(n, t) = \sum_{\alpha=-\infty}^{\infty} E(n, n-\alpha) e^{i\omega(n, n-\alpha)t}. \quad (8)$$

Az $|E(n, n-\alpha)|^2$ pozitív α esetén a sugárzás kibocsátásának, negatív α esetén pedig sugárzás elnyelésének az intenzitása. Heisenberg nem írja fel a (8) egyenletet, mert szerinte ennek nincs értelme, de végig úgy számolt,

mintha felírta volna minden n -re. Helyette azt mondja, hogy az

$$E(n, n-\alpha) e^{i\omega(n, n-\alpha)t} \quad (9)$$

mennyiségek sokasága fejezze ki az elektromos tér kvantummechanikai alakját. Most persze egy kicsit előreszaladtunk. Kollégáihoz írt levelei alapján valószínű, hogy Heisenberg ekkor még nem látta ilyen világosan a kvantumos mennyiségek előállításának szabályát, de cikkét könnyebben megértjük, ha a fentieket előrebo csátjuk.

Tehát Heisenberg, amikor azt mondja, hogy az új kvantummechanikában nem foglalkozunk olyan mennyiségekkel, melyeket nem figyelhetünk meg, ezen azt érti, hogy ezeket valami kvantummechanikai mennyiségekkel kell helyettesíteni, és amivel felhagyunk, ezek klasszikus értelmezése. Ezt abból látjuk, ahogyan felépíti kvantummechanikáját. Először veszi az adott mennyiség klasszikus alakját, azt Fourier-sorba fejti, majd a Kramers-szabályok és az (1) Bohr-féle frekvenciafeltétel alapján elkészíti a megfelelő kvantummechanikai mennyiséget.

Ha tehát csak egydimenziós rendszerekkel foglalkozunk, akkor

$$x(n, t) = \sum_{\alpha=-\infty}^{\infty} a_{\alpha}(n) e^{i\omega(n)\alpha t} \quad (10)$$

fejezi ki a mozgást klasszikus értelemben. A (10) Fourier-sorhoz a kvantummechanikában rendeljük hozzá az

$$a(n, n-\alpha) e^{i\omega(n, n-\alpha)t} \quad (11)$$

mennyiségek sokaságát. Heisenberg itt megjegyzi, hogy a (8) egyenletnek megfelelő alak azért nem értelmes, mert az n és az $n-\alpha$ mennyiségek egyenrangúak (11)-ben. Vagyis a (10)-ben n rögzített, és $n-\alpha$ változik, szemben a (11)-gyel, ahol mindkét index változik. Ennek ellenére a (11) matematikai tulajdonságait a (10) matematikai tulajdonságaiból olvassa le, és amikor $x(t)$ -ről beszél, akkor gondolatban felírja (10)-et minden n -re. Ez is arra utal, hogy Heisenberg eredetileg a Bohr–Kramers–Slater-elmélet alapján az n -edik nívó körüli virtuális rezgéseket írta fel. Így, ha az $x(t)^2$ Fourier-sorára igaz, hogy

$$x(n, t)^2 = \sum_{\alpha=-\infty}^{\infty} \sum_{\gamma=-\infty}^{\infty} a_{\alpha}(n) e^{i\omega(n)\alpha t} a_{\gamma}(n) e^{i\omega(n)\gamma t}, \quad (12)$$

és ha $\beta = \alpha + \gamma$, akkor

$$x(n, t)^2 = \sum_{\beta=-\infty}^{\infty} b_{\beta}(n) e^{i\omega(n)\beta t}, \quad (13)$$

és így

$$b_{\beta}(n, t) e^{i\omega(n)\beta t} = \sum_{\alpha=-\infty}^{\infty} a_{\alpha}(n) a_{\beta-\alpha}(n) e^{i\omega(n)(\alpha+\beta-\alpha)t}. \quad (14)$$

A (12)–(14) egyenletekből Heisenberg „mágus” azt olvasta ki, hogy az $x(t)^2$ kvantummechanikai mennyiségét a következő módon kaphatjuk meg $x(t)$ kvantummechanikai mennyiségéből:

$$\begin{aligned} b(n, n-\beta) e^{i\omega(n, n-\beta)t} \\ = \sum_{\alpha=-\infty}^{\infty} a(n, n-\alpha) a(n-\alpha, n-\beta) e^{i\omega(n, n-\beta)t}. \end{aligned} \quad (15)$$

Itt Heisenberg feltételezte, hogy igaz az

$$\omega(n, n - \beta) = \omega(n, n - \alpha) + \omega(n - \alpha, n - \beta) \quad (16)$$

Bohr-féle frekvenciafeltétel. Ezzel elérte, hogy a kvantummechanikai mennyiségekre ugyanazok az algebrai összefüggések érvényesek, mint a klasszikus mennyiségekre. Rájött arra is, hogy a (15) egyenlettel definiált szorzás nem kommutatív.

A (11) és (15) kvantummechanikai mennyiségek definiálása után látszik, hogy $x(t)$ (11) kvantummechanikai mennyiségének ismeretében annak idő szerinti deriválásiával megkapjuk a $v = \dot{x}(t)$ klasszikus sebesség

$$i\omega(n, n - \alpha)a(n, n - \alpha)e^{i\omega(n, n - \alpha)t} \quad (17)$$

kvantumos alakját, és az (5)–(6) mennyiségek kvantumos alakjának hozzáadásával az elektromos tér kvantumos alakja megmarad a (9) egyenlettel felírt alakban.

Dinamika

Heisenberg az

$$\ddot{x} + f(x) = 0 \quad (18)$$

mozgásegyenlet kvantummechanikai megoldásával foglalkozik, és feltételezi, hogy a mozgás periodikus. Bohr után feltételezi továbbá, hogy a mozgásra igaz az

$$\oint p dq = \oint m \dot{x} dx = J = nh \quad (19)$$

kvantumfeltétel. Az egyedüli változtatás Bohr eredeti gondolatmenetéhez képest, hogy az $x(t)$ és a $v = \dot{x}(t)$ klasszikus mennyiségek helyett a (11) és (17) kvantummechanikai mennyiségeket alkalmazza a Kramers-szabályok figyelembevételével.

Foglalkozzunk először a kvantumfeltétellel! Feltételezve a periodikus mozgást, klasszikusan írhatjuk:

$$x(n, t) = \sum_{\alpha=-\infty}^{\infty} a_{\alpha}(n) e^{i\omega(n)\alpha t}. \quad (20)$$

Ezt az alakot behelyettesítve (19)-be adódik, hogy

$$\oint m \dot{x} dx = 2\pi m \sum_{\alpha=-\infty}^{\infty} |a_{\alpha}(n)|^2 \alpha^2 \omega(n) = nh. \quad (21)$$

Heisenberg szerint (21) jobb oldala az n -től való függés miatt nem felel meg a korrespondenciaelvnek, ezért ennek n szerinti deriváltját veszi, vagyis

$$2\pi m \sum_{\alpha=-\infty}^{\infty} \alpha \frac{d}{dn} (|a_{\alpha}(n)|^2 \alpha \omega(n)) = h. \quad (22)$$

Áttérve a kinematikai részben definiált kvantummechanikai változókra (22)-ből kapjuk, hogy

$$2\pi m \sum_{\alpha=-\infty}^{\infty} \alpha \frac{d}{dn} (|a_{\alpha}(n, n - \alpha)|^2 \omega(n, n - \alpha)) = h. \quad (23)$$

A bal oldal deriváltját (2) szerint átalakítva kapjuk a Bohr-féle kvantumfeltétel alakjára, hogy

$$4\pi m \sum_{\alpha=0}^{\infty} \left[|a(n + \alpha, n)|^2 \omega(n + \alpha, n) - |a(n, n - \alpha)|^2 \omega(n, n - \alpha) \right] = h. \quad (24)$$

Ezután Heisenberg legegyszerűbb példaként az anharmonikus oszcillátor kvantummechanikai problémájával foglalkozik. Itt a klasszikus (18) egyenlet alakja

$$\ddot{x} + \omega_0^2 x + \lambda x^3 = 0. \quad (25)$$

Ennek elkészíti a kvantummechanikai alakját a (11) kvantummechanikai alaknak és idő szerinti második deriváltjának behelyettesítésével. A kapott egyenlet és a (24) Bohr-féle kvantumfeltétel segítségével λ szerint perturbációs számítást alkalmazva kapja az $a(n, n - \tau)$ átmeneti együtthatókat.

Az irodalomban többen próbálták rekonstruálni Heisenberg gondolatmenetét, például Tomonaga [15], Mehra és Rechenberg [16], valamint Aitchison, MacManus és Snyder [17]. Ezen utóbbi szerzők véleménye szerint azért nehéz Heisenberg eredeti cikkét megérteni, mert nem ismerjük azokat a számításokat, melyeket elvégzett, ezért közlik a szerintük fontos számításokat. Az átmeneti együtthatók ismeretében Heisenberg kiszámítja az

$$\frac{m\dot{x}^2}{2} + m\omega_0^2 \frac{x^2}{2} + \frac{m\lambda}{4} x^4 = w \quad (26)$$

teljes energiát a (11) kvantummechanikai mennyiségek felhasználásával, és azt kapja, hogy a λ^2 nagyságrendű tagokig az energia diagonális elemeinek értéke

$$w = \frac{\left(n + \frac{1}{2}\right) h \omega_0}{2\pi} + \lambda \frac{3 \left(n^2 + n + \frac{1}{2}\right) h^2}{64\pi^2 \omega_0^2 m} - \lambda^2 \frac{h^3}{512\pi^3 \omega_0^5 m^2} \left(17n^3 + \frac{51}{2}n^2 + \frac{59}{2}n + \frac{21}{2}\right), \quad (27)$$

majd megjegyzi, hogy néhány nem diagonális energiaelemre nulla értéket kapott, de nem tudja bebizonyítani, hogy minden nem diagonális elem nulla. A $\lambda = 0$ értékre megkapjuk a harmonikus oszcillátor kvantummechanikai energiáját a nullponti energiával együtt.

Fontos megjegyezni, hogy akkor még nem lehetett tudni, hogy mi a kvantummechanikai helyes energia. Heisenberg onnan gondolta, hogy jó nyomon jár, hogy a kapott (27) kifejezés megegyezett a Kramers–Born-féle módszerrel kapott értékkel [12].

Heisenberg első cikkének közvetlen hatása

Born és Jordan cikke

Amint a kézirat elkészült, 1925. július 11-én vagy 12-én, Heisenberg odaadta azt Bornnak, hogy mondjon róla véleményt, alkalmas-e publikálásra [4]. Közben megjegyezte, hogy keményen dolgozott rajta, de néhány alapvető megfontolásnál tovább nem jutott. Born megígérte, hogy megnézi, mit tud tenni, de mivel fáradt volt, csak néhány nap múlva kezdett vele foglalkozni. Későbbi visszaemlékezésében így foglalja össze Heisenberg kéziratának tartalmát:

„Amikor néhány nap múlva elkezdtem olvasni, elbűvölőnek tartottam. Heisenberg bevezette az átmeneti amplitúdó fogalmát, és kifejlesztett egy rájuk vonatkozó számítási módszert analógiában a klasszikus rezgő rendszerekkel és azok harmonikus komponenseivel (Fourier-sorok). [...] Ezután javasolta, hogy felejtünk el mindent a sorokról, és csak az átmeneti amplitúdókat tekintsük, és a rájuk talált szorzási szabályt. [...] A legmerészebb lépése az volt, hogy átmeneti amplitúdót rendelt a q koordináthoz és a p impulzushoz is. Mély benyomást keltettek bennem Heisenberg megfontolásai, melyek nagy lépést jelentettek abban a tudományos programban, amin dolgoztunk.” [3]

Abban az időben írta Einsteinnek: „Heisenberg hamarosan megjelenő munkája nagyon misztikusnak tűnik, de biztos, helyes és mély...” [3].

Miután Born elküldte Heisenberg kéziratát publikálásra, elkezdett annak tartalmán gondolkodni. Az egyik reggel rájött, hogy itt valójában a mátrix fogalma lett bevezetve a kvantummechanikai mennyiségek leírására. Először Pauli kérte meg, hogy dolgozzanak együtt a felmerült problémák megoldásán. Pauli érdekesnek és fontosnak tartotta Heisenberg eredményeit, de nem annyira, hogy együttműködjön Bornnal a kérdés szerinte felesleges elmatematizálásában [3]. Érdekes, hogy akkor még mennyire szokatlan volt a mátrixok alkalmazása a fizikában. Végül Born Jordannal együttműködve dolgozott a cikkeken, átírták, kiegészítették és pontosították Heisenberg eredményeit [18].

A (11) jelölést

$$a(n, m) e^{i\omega(n, m)t} \quad (28)$$

alakban írták. Így a helykoordinátát és az impulzust a kvantummechanikában leíró q és p mátrixok mátrix-elemei a következők

$$q_{nm} = q(n, m) e^{i\omega(n, m)t} \quad (29)$$

és

$$p_{nm} = p(n, m) e^{i\omega(n, m)t} \quad (30)$$

Megmutatták továbbá, hogy a (24) Bohr-féle kvantumfeltétel ekvivalens a

$$pq - qp = (\hbar/2\pi) \mathbf{I} \quad (31)$$

felcserélési relációval, ahol $\mathbf{I}$ az egységmátrix. Ez egyúttal azt is mutatja, hogy a Bohr-modellben alkalmazott kvantumfeltétel milyen mély feltételezés volt.

Dirac cikke

Kapica, egy szovjet fizikus, amikor Rutherford laboratóriumában tartózkodott Cambridge-ben, szervezett egy szemináriumsorozatot, ahol kötetlenül mindenki hozzászólhatott és kérdezhetett. Ez volt a Kapica-klub [19]. Itt tartott Heisenberg előadást 1925 júliusában. Előadásának címe „Termozoológia és Zeemanbotanika” volt. Bár ennek témája a Zeeman-effektus, röviden beszélt legújabb, kvantummechanikai eredményeiről is. Dirac

nem vett részt az előadáson, de eljutott hozzá Heisenberg cikkének egy kéziratához. Először nem tűnt neki érdekesnek, azonban kb. két hét múlva rájött, hogy a kvantummechanika szempontjából fontos dolgokat tartalmaz [3]. Miután megértette Heisenberg gondolatmenetét, ő is bevezette a mátrixjelöléseket – anélkül, hogy megemlítené volna ezt a fogalmat. A kvantummechanikai mennyiségek szorzását Heisenberg-szorzásnak nevezte, és sok dologra rájött, amit Born és Jordan is felfedezett [18]. Új eredménye [20], hogy a Born-féle kvantumfeltétel általános alakja

$$\mathbf{AB} - \mathbf{BA} = \frac{i\hbar}{2\pi} \{A, B\} = \frac{i\hbar}{2\pi} \left(\sum_r \left(\frac{\partial A}{\partial q_r} \frac{\partial B}{\partial p_r} - \frac{\partial B}{\partial q_r} \frac{\partial A}{\partial p_r} \right) \right), \quad (32)$$

ahol $\mathbf{A}$ és $\mathbf{B}$ az A és B klasszikus fizikai mennyiségek kvantumos alakja és $\{A, B\}$ a Poisson-féle zárójeles kifejezés. Tehát

$$\begin{aligned} q_r q_s - q_s q_r &= 0, \\ p_r p_s - p_s p_r &= 0, \\ q_r p_s - p_s q_r &= \delta_{rs} \frac{i\hbar}{2\pi} \mathbf{I}. \end{aligned} \quad (33)$$

Ezeket most Heisenberg-féle felcserélési relációknak hívjuk.

A hárommemberes cikk

Born, Heisenberg és Jordan általánosította Heisenberg $f = 1$ szabadsági fokra vonatkozó alapfeltevéseit tetszőlegesen sok, $f > 1$ szabadsági fokú rendszerekre [21]. Kidolgozták a perturbációelméletet kvantummechanikai rendszerekre. Ők is belátták a (33) összefüggéseket. Kanonikus transzformációkat vezettek be, melyekre továbbra is fennállnak a (33) összefüggések. Megmutatták, hogy ha ez a transzformáció diagonális alakra hozza az energia kvantummechanikai alakját, akkor a diagonális mátrixelemek megegyeznek a kvantummechanikai rendszer energianívóival. Ezzel bevezették a sajátérték meghatározásának feladatát a kvantummechanikában. Felírták az impulzusmomentum mátrixát, és megoldották annak sajátérték-problémáit. Erre a cikkekre később mások úgy hivatkoztak, mint a hárommemberes munka (Dreimännerarbeit).

Pauli cikke

A hárommemberes cikknek és az összes többi, az új kvantummechanikát tárgyaló eddigi közleménynek volt egy zavaró hiányossága. Az új kvantummechanika módszereivel eddig még nem sikerült kiszámítani a hidrogénatom energiaszintjeit. Heisenberg első, a mátrixmechanikáról szóló publikációjában már megemlíti az ezzel kapcsolatos problémát [5]. Az okozta a nehézséget, hogy a hidrogénatomnál a kinetikus energia periodikus mozgásnak felel meg, de a k/r alakú potenciális energia nem periodikus. Így a kinetikus energiát Fourier-sorba fejthetjük, de a potenciális energia felírásához Fourier-in-

tegrálra lenne szükség. A kinetikus energia felírásához tehát diszkrét, a potenciális energiához pedig folytonos indexű mátrixokra lenne szükség. Ezt a problémát először Paulinak sikerült megoldania [22]. Azt használta ki, hogy a k/r potenciál esetén az

$$\mathbf{A} = \mathbf{p} \times \mathbf{L} - mk(\mathbf{r}/r) \quad (34)$$

Lenz-vektor is mozgásállandó. Itt $\mathbf{p}$, $\mathbf{L}$ és $\mathbf{r}$ a klasszikus impulzus-, impulzuszórántum- és helykoordináta-vektor. Heisenberg a következő szavakkal reagált az új eredményre: „Valószínűleg nem kell neked leírnom, hogy mennyire örülök a hidrogénatom új elméletének.” [3] A fizikusok többségét Pauli cikke győzte meg, hogy igaz a kvantummechanika új elmélete.

Schrödinger hullámmechanikája és a mátrixmechanika kapcsolata

Miközben folyt Heisenberg gondolatainak értelmezése és továbbfejlesztése, megjelent Schrödinger cikke, melyben egy teljesen más leírást adott a kvantummechanikai jelenségek tárgyalására [23]. Ez volt a hullámmechanika, és azon belül a Schrödinger-egyenlet megjelenése. A munka a következő gondolattal kezdődött: „Ebben a közleményben mindenekelőtt azt kívánom kimutatni a hidrogénatom legegyszerűbb (nem relativisztikus és perturbátlan) esetére, hogy a szokásos kvantumfeltétel helyettesíthető egy olyan követelménnyel, amelyben nincs szó *egész számokról*. Így sokkal természetesebb módon, a rezgő húr csomópontjainak számához hasonlóan adódik az egészszámúság.” Tehát, szemben a mátrixmechanikával, itt már az első közleményben megjelenik a hidrogénatom problémájának a megoldása. Schrödinger hamarosan közli következő cikkét, sokatmondó címmel: *A Heisenberg–Born–Jordan-féle kvantummechanika kapcsolata az enyémmel* [24]. Az egyik lábjegyzetben megjegyzi, hogy elméletének kidolgozására az ösztönzést de Broglie disszertációja [25] és Einstein végtelenül messzire tekintő megjegyzései adták, majd kitér arra, hogy miért nem hivatkozott korábban Heisenberg cikkére: „Nem tudok arról, hogy elméletem Heisenbergével bármiféle genetikus kapcsolatban állna. Elméletéről természetesen tudomásom volt, az azonban a transzcendes algebra igen nehézkesnek látszó módszerei és a szemléletesség hiánya folytán elriasztó, hogy azt ne mondjam: visszataszító hatást tett rám.” [24] Végül sikerült legyőznie ellenállását, és operátorok bevezetésével megmutatta, hogy a két elmélet matematikailag ekvivalens. Megmutatta, hogy a $\mathbf{q}_i$ hely- és $\mathbf{p}_i$ impulzusoperátoroknak ki kell elégíteniük a (33) felcserélési relációkat, és a többi operátor, köztük az energia operátora is – ami bizonyos feltételek esetén a $\mathbf{H}$ Hamilton-operátor – előállítható ezen operátoroknak a klasszikus fizikában megismert függvényei segítségével. A Heisenberg által bevezetett kvantummechanikai mennyiségek a megfelelő fizikai mennyiségekhez rendelt operátoroknak egy

teljes ortogonális függvényrendszeren vett mátrixai. Amikor korábban az adott klasszikus mennyiséghez rendelt kvantummechanikai mennyiségekről beszéltünk, beszélhettünk volna operátorokról is, de ezt Heisenberg még nem tudhatta.

Hátra van még, hogy belássuk, a Heisenberg által bevezetett mátrixok éppen a megfelelő kvantummechanikai operátorok mátrixai. A következőkben a napjainkban szokásos jelölést használjuk.

Az időtől függő Schrödinger-egyenlet teljes rendszerre a

$$\Psi_i = \Phi_i e^{-\frac{i}{\hbar} E_i t} \quad (35)$$

alakban írható, ahol Φ_i , illetve E_i a $\mathbf{H}\Phi = E\Phi$ sajátérték-probléma (időtől független Schrödinger-egyenlet) sajátfüggvénye és sajátértéke. Ha most $\mathbf{O}$ egy tetszőleges operátor, akkor a fenti bázison vett mátrixelemei

$$\begin{aligned} \langle \Phi_n | e^{-\frac{i}{\hbar} E_n t} \mathbf{O} | \Phi_m e^{-\frac{i}{\hbar} E_m t} \rangle \\ = O(n, m) e^{\frac{i}{\hbar} (E_n - E_m) t} \\ = O(n, m) e^{i\omega(n, m) t}. \end{aligned} \quad (36)$$

A (11), (28)–(30) egyenletekből látjuk, hogy Heisenberg a Fourier-sorokból a Kramers-szabályok alkalmazásával a fizikai mennyiségek mátrixait – anélkül, hogy tudta volna – éppen az energia-sajátfüggvények bázisán írta fel, és az $O(m, n)$ átmeneti mátrixelemeket a mozgásegyenletek és a felcserélési relációk segítségével kapta meg.

Következmények

Heisenberg „a kvantummechanika megalkotásáért” Nobel-díjat kapott 1932-ben. Állítólag meglepődött, hogy egyedül kapta, nem pedig Bornnal és Jordannal megosztva. Born másik tanársegédje, Pauli is Nobel-díjat kapott 1945-ben, „az úgynevezett Pauli-féle kizárási elv felfedezéséért”. Vajon mit érezhetett Born professzor, amikor azt tapasztalta, hogy tanársegédjei sorra kapják a Nobel-díjakat? Végül ő is kapott egyet 1954-ben, „a hullámfüggvény statisztikus értelmezéséért”. Schrödinger Heisenberget követve és Dirackal megosztva kapta meg a Nobel-díjat 1933-ban, „az atomelmélet új, termékeny formájának felfedezéséért”. Az 1969-es Oppenheimer-díj átvételekor Dirac visszagondolva fiatal éveire így fogalmazott: „Az ezerkilencszázhuszonötten kezdődő néhány évet a fizika aranykorának lehet nevezni. Ebben az időben alapvető elgondolásaink igen gyorsan fejlődtek, és mindenki számára volt bőven tennivaló. Ma már világosan látjuk az ezen aranykor folyamán kimunkált gondolatok korlátait is. Mindannyian azt reméljük, hogy beköszönt majd egy új aranykor, amelyet valami igen nagy hatású gondolat fog elindítani, s mely majd újból a felgyorsult fejlődés korszaka lesz, nagy reményekkel és félelmekkel.” [26]

1. Simonyi Károly: A fizika kultúrtörténete. Akadémiai Kiadó, Ötödik, javított, bővített kiadás, 2011.
2. N. Bohr, H. A. Kramers, J. C. Slater: Über die Quantentheorie der Strahlung. *Zeitschrift für Physik*, 24 (1924) 69.
3. B. L. van der Waerden (ed.): Sources of Quantum Mechanics. Amsterdam, North-Holland, 1967.
4. D. Ch. Cassidy: Uncertainty: The life science of Werner Heisenberg. W. H. Freeman and Company, 1992.
5. W. Heisenberg: Über quantentheoretischer Umdeutung kinematischer und mechanischer Beziehungen. *Zeitschrift für Physik*, 33 (1925) 879. és *Magyar Fizikai Folyóirat*, 13 (1965) 447.
6. Jánossy Lajos (szerk.), Györgyi Géza (ford.): Kvantummechanika. Cikkgyűjtemény. Akadémiai Kiadó, Budapest, 1971.
7. S. Weinberg: Dreams of a final theory. New York, Pantheon, 1992.
8. M. Jammer: The conceptual development of quantum mechanics. New York, McGraw-Hill, 1966.
9. E. MacKinnon: Heisenberg, models and the rise of matrix mechanics. *Hist. Stud. Phys. Sci.*, 8 (1977) 137.
10. A. Blum, M. Jähner, Ch. Lehner, J. Renn: Translation as heuristics: Heisenberg's turn to matrix mechanics. *Studies in Hist. and Phil. of Mod. Phys.*, 60 (2017) 3.
11. W. Heisenberg: Erinnerungen an die Zeit der Entwicklung der Quantenmechanik. In: Theoretical physics in the twentieth century. A memorial volume to Wolfgang Pauli (ed. by M. Fierz, V. F. Weisskopf), Interscience Publishers Inc. New York, 1960.
12. M. Born: Über Quantenmechanik. *Zeitschrift für Physik*, 26 (1924) 379.
13. H. A. Kramers: The law of dispersion and Bohr's theory of spectra. *Nature*, 113 (1924) 673.
14. H. A. Kramers, W. Heisenberg: Über die Streuung von Strahlung durch Atome. *Zeitschrift für Physik*, 31 (1925) 681.
15. S.-I. Tomonaga: Quantum Mechanics. Volume 1, Old Quantum Theory, Amsterdam, North-Holland, 1962.
16. J. Mehra, H. Rechenberg: The Historical Development of Quantum Theory. Vol. 2. New York, Springer-Verlag, 1982.
17. I. J. R. Aitchison, D. A. MacManus, T. M. Snyder: Understanding Heisenberg's 'magical' paper of July 1925: A new look at the calculation details. *American Journal of Physics*, 72 (2004) 1370.
18. M. Born, P. Jordan: Zur Quantenmechanik. *Zeitschrift für Physik*, 34 (1925) 858. és *Magyar Fizikai Folyóirat*, 13 (1965) 530.
19. R. Rhodes: Az atombomba története. Park Könyvkiadó, 2013.
20. P. A. M. Dirac: The fundamental equations of quantum mechanics. *Proc. R. Soc. London A*, 109 (1925) 642. és *Magyar Fizikai Folyóirat*, 14 (1966) 171.
21. M. Born, W. Heisenberg, P. Jordan: Zur Quantenmechanik II. *Zeitschrift für Physik*, 35 (1926) 557. és *Magyar Fizikai Folyóirat*, 14 (1966) 35.
22. W. Pauli: Über das Wasserstoffspektrum vom Standpunkt der neuen Quantenmechanik. *Zeitschrift für Physik*, 36 (1926) 336. és *Magyar Fizikai Folyóirat*, 14 (1966) 272.
23. E. Schrödinger: Quantisierung als Eigenwertproblem. *Annalen der Physik*, 79 (1926) 361. és *Magyar Fizikai Folyóirat*, 2 (1954) 567.
24. E. Schrödinger: Über das Verhältnis der Heisenberg-Born-Jordanschen Quantenmechanik zu der meinen. *Annalen der Physik*, 79 (1926) 22. és *Magyar Fizikai Folyóirat*, 14 (1966) 359.
25. L. de Broglie: Recherches sur la théorie des quanta (Thèses, Paris 1924). *Annales de Physique*, 3 (1925) 22.
26. P. A. M. Dirac: A kvantumelmélet kibontakozása. *Fizikai Szemle*, 23 (1973) 289.