مکانیکِ کوانتمی و یک مطالعه‌یِ مقدماتی‌یِ اتمِ هیدروژن [1]

پ. ا. ام. دیراک [a]

دانش‌جویِ ارشدِ پژوهشی‌یِ نمایش‌گاهِ 1851، کالجِ سَنت جان، کمبریج [b]

(فرستاده شده توسطِ آر. اچ. فاوْلِر [c]، عضوِ انجمن ـ سلطنتی [d] ــ دریافت 22 ژانویه 1926.)

§۱. قوانینِ جبری‌یِ حاکم بر متغیرهایِ دینامیکی.

هرچند نظریه‌یِ الکترودینامیکِ کلاسیک در توصیفِ خیلی از پدیده‌هایِ اتمی موفقیت‌هایِ بزرگی داشته، در بعضی نکاتِ بنیادی کاملاً ناموفق است. مدت‌ها این طور تصور می‌شد که راهِ فرار از این مشکل در این حقیقت است که یکی از فرض‌هایِ اساسی‌یِ نظریه‌یِ کلاسیک غلط است، و اگر این فرض را کنار بگذاریم و آن را با فرضِ کلی‌تری جای‌گزین کنیم، نظریه‌یِ اتمی به نحوی طبیعی نتیجه خواهد شد. امّا، تا همین اواخر هیچ کس ایده‌ای در موردِ این که این فرض چه می‌تواند باشد نداشت.

مقاله‌یِ جدیدی [1] از هایزنبرگ [e] کلیدِ جوابِ به این سؤال را فراهم می‌کند و پایه‌هایِ یک نظریه‌یِ کوانتمی‌یِ جدید را می‌سازد. بنا بر نظریه‌یِ هایزنبرگ، اگر x و y دو تابع از مختصه‌ها و تکانه‌هایِ یک سیستمِ دینامیکی باشند، در حالتِ کلی xy با yx برابر نیست. به جایِ قاعده‌یِ جابه‌جایی بودنِ ضرب، متغیرهایِ کانونیکِ سیستمی با u درجه‌یِ آزادی، q_r ها و p_r ها $(r = 1 \ldots u)$، شرایطِ کوانتمی‌ای را برآورده می کنند که توسطِ مؤلف به شکلِ زیر داده شده اند [2].

$$\left.\begin{aligned} q_r\,q_s - q_s\,q_r &= 0 \\ p_r\,p_s - p_s\,p_r &= 0 \\ q_r\,p_s - p_s\,q_r &= 0 \quad (r \neq s) \\ q_r\,p_r - p_r\,q_r &= ih \end{aligned}\right\} \tag{1}$$

که i جذرِ -1 و h یک ثابتِ بنیادی است برابرِ با $(2\pi)^{-1}$ برابرِ ثابتِ پلانکِ معمولی. این معادله‌ها برایِ محاسبه‌یِ $xy - yx$ وقتی x و y توابعی از p ها و q ها هستند کافی هستند، و بنا بر این می‌توانند

[1] این مقاله ترجمه‌ای است از

P. A. M. Dirac, "Quantum Mechanics and a Preliminary Investigations of the Hydrogen Atom", *Proceedings of the Royal Society of London, Series A*, Vol. 110, No. 755 (Mar. 1, 1926), pp. 561-579.

در حروف چینی‌یِ مقاله سعی شده نمادگذاری‌یِ نویسنده تاحدِّ امکان حفظ شود؛ در متنِ اصلی ارجاع‌ها به شکلِ پانوشت بوده‌اند، اما در ترجمه در پایانِ مقاله آمده‌اند. ترجمه‌یِ امیر آقامحمّدی

جای‌گزینِ قاعده‌یِ ضربِ کلاسیکی‌یِ جابه‌جایی شوند. به نظر می‌رسد آن‌ها ساده‌ترین فرض‌هایی هستند که می‌توان کرد و نظریه‌ای به دست آورد که بشود با آن کار کرد.

این حقیقت که متغیرهایی که برایِ توصیفِ یک سیستمِ دینامیکی به کار می‌روند قاعده‌یِ جابه‌جایی را برآورده نمی‌کنند به این معنی است که به معنیِ لغویِ کلمه که در ریاضیات استفاده می‌شود این‌ها عدد نیستند. برایِ تمیز دادنِ این دو نوع عدد ما متغیرهایِ کوانتمی را q ـ عدد، و عدد هایِ ریاضیاتِ کلاسیک را، که قاعده‌یِ ضربِ جابه‌جایی را برآورده می‌کنند، c ـ عدد می‌نامیم، در حالی که واژه‌یِ عددِ تنها را برایِ نامیدن هم q ـ عدد هم c ـ عدد به کار می‌بریم. وقتی که $xy = yx$ است می‌گوییم x با y جابه‌جا می‌شود.

فعلاً کسی تصویری از q ـ عدد ندارد. کسی نمی‌تواند بگوید یک q ـ عدد بزرگ‌تر یا کوچک‌تر از دیگری است. همه‌یِ چیزی که در موردِ q ـ عددها می‌شود گفت این است که اگر z_1 و z_2 دو q ـ عدد، یا یک q ـ عدد و یک c ـ عدد باشند، عددهایِ $z_1 + z_2$، $z_1\, z_2$، و $z_2\, z_1$ وجود دارند که در حالت کلی q ـ عدد اند، اما ممکن است c ـ عدد باشند. کسی از چه‌گونگی‌یِ ساخته‌شدنِ این عددها چیزی نمی‌داند جز این‌که آن ها همه‌یِ قواعدِ جبرِ معمولی، جز قاعده‌یِ ضربِ جابه‌جایی را برآورده می‌کنند، یعنی

$$\begin{gathered} z_1 + z_2 = z_2 + z_1, \\ (z_1 + z_2) + z_3 = z_1 + (z_2 + z_3), \\ (z_1 z_2) z_3 = z_1 (z_2 z_3), \\ z_1(z_2 + z_3) = z_1 z_2 + z_1 z_3, \quad (z_1 + z_2) z_3 = z_1 z_3 + z_2 z_3, \end{gathered}$$

و اگر

$$z_1\, z_2 = 0$$

باشد، آن وقت

$$z_1 = 0 \quad \text{یا} \quad z_2 = 0;$$

اما در حالتِ کلی

$$z_1\, z_2 \neq z_2\, z_1,$$

مگر این‌که z_1 یا z_2، c ـ عدد باشند. می‌توان عددهایِ دیگری، مثلِ x، با معادله‌هایی بینِ x و z ها تعریف کرد، مثلاً $z = x^2$، که $z^{\frac{1}{2}}$ را تعریف می‌کند و یا $x\, z = 1$ که z^{-1} را تعریف می‌کند. ممکن است بیش از یک مقدار برایِ x ی که در معادله‌ای صدق می‌کند وجود داشته باشد، که البته برایِ $x\, z = 1$ چنین نیست. زیرا اگر $x_1\, z = 1$ و $x_2\, z = 1$ باشد در این‌صورت $(x_1 - x_2) z = 0$ که اگر $z \neq 0$ باشد می‌دهد $x_1 = x_2$.

تابعِ $f(z)$ از یک q ـ عددِ z را نمی‌توان به طریقی مشابهِ تعریفِ تابعی از یک متغیرِ c ـ عددِ حقیقی تعریف کرد، بلکه فقط می‌توان با یک رابطه‌یِ جبری که $f(z)$ و (z) را به هم مربوط می‌کند

تعریف کرد. وقتی این رابطه شاملِ هیچ q ـ عدد ی که با z و $f(z)$ جابه‌جا نشود نیست، می‌توان $\partial f/\partial z$ را بدونِ ابهام و با همان روابطِ جبری‌یِ z هایِ c ـ عدد تعریف کرد، مثلاً اگر $f(z) = z^n$ باشد، $\partial f/\partial z = nz^{n-1}$ است که n یک c ـ عدد است.

برایِ آن که بتوانیم نتایجی قابلِ‌مقایسه با آزمایش از نظریه‌مان بگیریم، باید راهی برایِ نمایشِ q ـ عددها بر حسبِ c ـ عددها داشته باشیم، تا بتوانیم این c ـ عددها را با مقادیرِ آزمایشی مقایسه کنیم. این نمایش باید چنان باشد که اگر c ـ عددهایِ نمایش‌دهنده‌یِ x و y را داشته باشیم، بتوانیم c ـ عددهایِ نمایش‌دهنده‌یِ $x+y$، xy، و yx را حساب کنیم. اگر یک q ـ عددِ x تابعی از مختصه‌ها و تکانه‌هایِ یک سیستمِ چندگانه‌دوره‌ای باشد، و خودش هم چندگانه‌دوره‌ای باشد، در این صورت نشان داده خواهد شد که مجموعه‌یِ همه‌یِ مقادیرش برایِ همه‌یِ مقدارهایِ متغیرهایِ کنشِ سیستم را می‌توان با یک دسته مؤلفه‌هایِ هم‌آهنگ از نوعِ $x(nm) \cdot \exp \cdot i\omega(nm)t$ نمایش داد، که $x(nm)$ و $\omega(nm)$ c ـ عدد هستند، و هر کدام مربوط اند به دو دسته از متغیرهایِ کنش که با برچسب‌هایِ n و m نشان داده می‌شوند و t، که c ـ عدد است، زمان است. در مقاله‌هایِ قبلی‌یِ نظریه، [3]، این نمایش به عنوانِ تعریفِ q ـ عدد آمده است. امّا ارجح به نظر می‌رسد که قاعده‌هایِ جبریِ بالا و شرایطِ (1) را به عنوانِ تعریفِ q ـ عدد بگیریم و از آن‌ها نتیجه بگیریم که یک q ـ عدد را وقتی می‌توان به این شکل با c ـ عددها نمایش داد که خواصِ دوره‌ایِ لازم را داشته باشد. به این ترتیب q ـ عدد هنوز هم بامعنی است و وقتی چندگانه‌دوره‌ای نباشد هم می‌توان آن را برایِ تحلیل به کار برد، هرچند هنوز راهی برایِ نمایش‌دادنَش با c ـ عددها نیست.

§۲. عبارت‌هایِ کروشه‌یِ پواسون.

اگر x و y دو عدد باشند، ما کروشه‌یِ پواسونِ آن‌ها، $[x, y]$ را با

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

تعریف می‌کنیم. خواص زیر، که بلافاصله از تعریفِ این کروشه‌یِ پواسون نتیجه می‌شود، آن را مشابهِ کروشه‌یِ پواسونِ مکانیکِ کلاسیک می‌کند.

(i) هیچ ارتباطی با دسته‌یِ خاصی از تبدیلاتِ کانونیک ندارد.

(ii) از قواعدِ زیر تبعیت می‌کند

$$\begin{aligned}[x_1 + x_2, y] &= [x_1, y] + [x_2, y],\\ [x_1 x_2, y] &= x_1[x_2, y] + [x_1, y]x_2,\\ [x, y] &= -[y, x].\end{aligned}$$

(iii) اتحادِ

$$[[x, y], z] + [[y, z], x] + [[z, x], y] = 0.$$

را برآورده می‌کند.

(iv) کروشه‌پواسون‌هایِ مقدماتی با استفاده از (1) با

$$\begin{aligned} &[p_r, p_s] = 0 \qquad\qquad [q_r, q_s] = 0, \\ &[q_r, p_s] = 0 \quad (r \neq s) \quad \text{یا} \quad 1\ (r = s), \end{aligned}$$

داده می‌شود و هم‌چنین

$$[p_r, c] = [q_r, c] = 0,$$

که c یک c ـ عدد است.

اگر x و y توابعی داده‌شده از p ها و q ها باشند، با کاربردِ مکرّرِ قاعده‌یِ (ii)، می‌توان کروشه پواسونِ $[x, y]$ را بر حسبِ کروشه‌پواسن‌هایِ مقدماتی، که در (iv) ظاهر شده‌اند، بیان و به این ترتیب محاسبه کرد. اغلب ساده‌تر است که به‌جایِ استفاده‌یِ مستقیم از (2) یک کروشه‌پواسون را به این طریق محاسبه کنیم. مثلاً برایِ محاسبه‌یِ $[q^2, p^2]$ داریم

$$[q^2, p^2] = q[q, p^2] + [q, p^2]q,$$

و

$$[q, p^2] = p[q, p] + [q, p]p = 2p,$$

و بنا بر این

$$[q^2, p^2] = 2qp + 2pq.$$

در مواردِ خاص، زحمتِ محاسبه‌یِ کروشه‌هایِ پواسونِ تابع‌هایی از p ها و q ها خیلی کم می‌شود ـــ وقتی که کروشه‌یِ پواسونِ کلاسیک، یعنی $\sum_r \left(\dfrac{\partial x}{\partial q_r} \dfrac{\partial y}{\partial p_r} - \dfrac{\partial y}{\partial q_r} \dfrac{\partial x}{\partial p_r} \right)$ را بتوان مستقیماً

به نظریه‌یِ کوانتمی بُرد، و این وقتی است که ابهامی در ترتیبِ ضربِ عامل‌ها نباشد. مثلاً درجا می‌توانیم بگوییم

$$[f(x), x] = 0,$$

وقتی که $f(x)$ شاملِ هیچ عددی نباشد که با x ناجابه‌جایی است، و هم‌چنین

$$[f(q_r), p_r] = \partial f/\partial q_r, \qquad (3)$$

وقتی که $f(q_r)$ شاملِ هیچ عددی نباشد که با q_r ناجابه‌جایی است.

شرطِ کانونیک بودنِ دسته‌متغیرهایِ Q_r و P_r این طور تعریف می‌شود که از روابطی که Q_r ها و P_r ها را به q_r ها و p_r ها (که فرض می‌شود کانونیک هستند) مربوط می‌کند، بشود روابطِ زیر را به دست آورد.

$$[Q_r, Q_s] = 0 \qquad [P_r, P_s] = 0,$$
$$[Q_r, P_s] = 0 \quad (r \neq s) \quad \text{یا} \quad 1\ (r = s).$$

می‌توان کروشه‌پواسونِ دو تابعِ Q_r و P_r را، یا مستقیماً با متغیرهایِ Q_r و P_r محاسبه کرد، یا ابتدا این متغیرها را بر حسبِ q_r ها و p_r ها جاگذاری کرد. می‌توان رابطه‌هایی را که Q_r ها و P_r ها را به q_r ها و p_r ها مربوط می‌کند، به فرمِ

$$Q_r = bq_rb^{-1}, \qquad P_r = bp_rb^{-1},$$

درآورد که b یک q ـ عدد است که تبدیل‌ها را تعیین می‌کند، اما به نظر نمی‌رسد این فرمول ارزشِ کاربردی‌یِ زیادی داشته باشد.

یک سیستمِ دینامیکی، در نظریه‌یِ کلاسیک، با یک همیلتونی‌یِ H که تابعِ خاصی از p ها و q ها است تعیین می‌شود، و معادله‌هایِ حرکت را به صورتِ زیر می‌توان نوشت

$$\dot{x} = [x, \mathrm{H}]. \qquad (4)$$

فرض می‌کنیم در نظریه‌هایِ کوانتمی هم معادله‌هایِ حرکت به همان شکلِ (4) است، که حالا دیگر H یک q ـ عدد است که فعلاً تابعی نامعلوم از p ها و q ها است. وقتی یک q ـ عدد چندگانه دوره‌ای باشد، نمایش اش با c ـ عددها باید چنان باشد که اگر x با مؤلفه‌هایِ هم‌آهنگِ $x\,(nm) \exp \cdot i\omega\,(nm)t$ نمایش داده شود، مؤلفه‌هایِ $\dot{x}$، که با (4) تعریف می‌شود، $i\omega\,(nm) x\,(nm) \exp \cdot i\omega\,(nm)t$ باشد.

§۳. چند قضیه‌یِ جبری‌یِ مقدماتی.

در تمامِ توصیف‌هایِ قبلی از پدیده‌هایِ طبیعی، دو ریشه‌یِ $1-$ همیشه نقشِ متقارنی دارند. حضورِ ریشه‌یِ $1-$ در معادلاتِ بنیادی‌یِ (1) به این معنی است که در نظریه‌یِ حاضر چنین نیست. برایِ سهولتِ ریاضی ما تحلیلِ خودمان را با استفاده از یک ریشه‌یِ $1-$، مثلاً j ادامه می‌دهیم، j ای که مستقل از i ای است که در (1) آمده است، به این معنی که با جای‌گزینی‌یِ $j-$ به جایِ j، و نه تغییرِ علامتِ i، از هر رابطه‌ای می‌توان معادله‌یِ دیگری به دست آورد. از این دو معادله می‌توانیم با جابه‌جا کردنِ ترتیبِ عامل‌هایِ ضرب و در همان حال تبدیلِ h به $h-$ دو معادله‌یِ دیگر به دست آوریم. اگر این اعمال را رویِ معادله‌یِ (1) انجام دهیم جواب‌هایِ درست می‌دهد، پس هر چه که از معادله‌یِ (1) به دست آمده باشد نیز تحتِ این عمل جوابِ درست می‌دهد. برایِ اجتناب از داشتنِ دو نمادِ i و j، هر دو به عنوانِ ریشه‌هایِ $1-$، می‌گیریم $i = j$ و قواعدِ بالا را به صورتِ زیر تغییر می‌دهیم: — از هر معادله معادله‌یِ دیگری با تبدیلِ i به $i-$ در هر جایی از معادله و در همان زمان تبدیلِ h به $h-$ به دست می‌آید، یا می توانیم ترتیبِ عامل‌هایِ ضرب را عوض کنیم و h را به $h-$ تبدیل کنیم، یا دو عملِ قبلی را با هم انجام دهیم، که تقلیل پیدا می‌کند به عوض کردنِ ترتیبِ عامل‌هایِ ضرب و تبدیلِ i به $i-$. عملِ سوم رویِ هر عددی چیزی می‌دهد که ما آن را موهومی‌یِ مزدوجِ عدد می‌نامیم. یک عدد حقیقی است اگر با موهومی‌یِ مزدوجش برابر باشد.

بقیه‌یِ این بخش اختصاص دارد به چند قاعده‌یِ ساده‌یِ تحلیلی که در ادامه به کار خواهند آمد.

وقتی معکوسِ کمیتی را، که حاصلِ‌ضربِ دو کمیت است، محاسبه می‌کنیم باید ترتیبِ معکوسِ آن‌ها را عوض کنیم، مثلاً

$$\frac{1}{xy} = \frac{1}{y} \cdot \frac{1}{x}. \tag{5}$$

درستی‌یِ این رابطه را می‌توانیم با ضرب کردنِ دو طرف، از راست یا چپ، در xy تحقیق کنیم.

برایِ مشتق‌گیری از معکوسِ یک کمیت مثلِ x به طریقِ زیر عمل می‌کنیم:—

$$\frac{d}{dt}\left(\frac{1}{x} \cdot x\right) = \frac{d}{dt}(1) = [1, \mathrm{H}] = 0.$$

$$0 = \frac{d}{dt}\left(\frac{1}{x} \cdot x\right) = \frac{d}{dt}\left(\frac{1}{x}\right) \cdot x + \frac{1}{x}\dot{x}.$$

با تقسیمِ بر x از سمتِ راست نتیجه می‌شود

$$\frac{d}{dt}\left(\frac{1}{x}\right) = -\frac{1}{x}\, \dot{x}\, \frac{1}{x}.$$

وقتی n یک c ـ عدد باشد، بسطِ دو جمله‌ای برایِ $(1+x)^n$، مثلِ جبرِ معمولی است. هم‌چنین می‌توانیم e^x را با همان بسطِ توانی که در جبرِ معمولی داریم تعریف کنیم. قاعده‌یِ معمولی‌یِ در موردِ نما دیگر درست نیست، مثلاً e^{x+y} در حالتِ کلی با $e^x\, e^y$، جز در حالتی که x و y جابه‌جایی هستند مساوی نیست.

اگر (αq) به معنی‌یِ $\sum_r(\alpha_r q_r)$ باشد، که در آن α_r ها $(r=1\ldots u)$ c ـ عدد باشند، از (3) می‌بینیم

$$[e^{i(\alpha q)}, p_r] = i\alpha_r e^{i(\alpha q)}.$$

بنا بر این، چون

$$e^{i(\alpha q)}p_r - p_r e^{i(\alpha q)} = ih[e^{i(\alpha q)}, p_r],$$

داریم

$$e^{i(\alpha q)}p_r = (p_r - i\alpha_r h)e^{i(\alpha q)}.$$

در حالتِ کلی‌تر اگر $f(q_r,p_r)$ تابعی از q ها و p ها باشد

$$\left.\begin{aligned} e^{i(\alpha q)}f(q_r,p_r) &= f(q_r, p_r-\alpha_r h)e^{i(\alpha q)},\\ f(q_r,p_r)e^{i(\alpha q)} &= e^{i(\alpha q)}f(q_r,p_r+\alpha_r h). \end{aligned}\right\} \qquad (6)$$

برایِ اثباتِ این نتیجه، می‌بینیم که اگر این معادله‌ها برایِ هر دو تابعِ f، مثلاً f_1، f_2 درست باشند، آن وقت برایِ f_1+f_2 و $f_1\,f_2$ هم درست اند. این را برایِ $f=p_r$ ثابت کرده‌ایم و برایِ $f=q_r$ هم چون q ها با هم جابه جایی هستند به وضوح درست است. بنا بر این اگر f یک چندجمله‌ای از p ها و q ها باشد درست است، و بنا بر این در حالتِ کلی ما آن را درست می‌گیریم.

رابطه‌یِ (6) قاعده‌یِ جابه‌جایی‌یِ هر تابعی از p ها و q ها را با کمیت‌هایی به شکلِ $e^{i(\alpha q)}$ می‌دهد. این‌ها برایِ نظریه‌یِ دستگاه‌هایِ چندگانه‌دوره‌ای اهمیتِ زیادی دارند. البته برایِ هر دسته متغیرِ کانونیک، Q_r و P_r روابطِ متناظری هست.

§۴. سیستم‌هایِ چندگانه‌دوره‌ای.

در نظریه‌یِ کوانتمی یک سیستمِ دینامیکی چندگانه‌دوره‌ای است اگر برایش یک دسته متغیرِ یک‌نواخت‌ساز J_r و ω_r با خواصِ زیر وجود داشته باشد:—

(i) متغیرهایِ کانونیک باشند، یعنی

$$[\mathrm{J}_r, \mathrm{J}_s] = 0, \qquad [\omega_r, \omega_s] = 0,$$
$$[\omega_r, \mathrm{J}_s] = 0 \quad (r \neq s) \;\text{یا}\; 1 \quad (r = s).$$

(ii) همیلتونی‌یِ H تنها تابعی از J ها باشد.[2]

(iii) p ها و q هایِ اصلی که سیستم را توصیف می‌کنند توابعی چندگانه‌دوره‌ای از ω ها با دوره‌یِ 2π هستند، که شرط ش این است که p یا q را بشود به یکی از شکل‌هایِ زیر بسط داد

$$\sum_\alpha C_\alpha \exp\, i(\alpha_1\omega_1 + \alpha_2\omega_2 + \cdots + \alpha_n\omega_n) = \sum_\alpha C_\alpha \exp\, i\,(\alpha\omega)$$

یا

$$\sum_\alpha \exp\, i(\alpha_1\omega_1 + \alpha_2\omega_2 + \cdots + \alpha_n\omega_n) C'_\alpha = \sum_\alpha \exp\, i\,(\alpha\omega) C'_\alpha.$$

که C_α ها و C'_α ها فقط توابعی از J ها هستند و α ها اعدادِ صحیح هستند. مابرایِ خلاصه‌نویسی ω ها را 2π برابر و J ها را $1/2\pi$ برابرِ متغیرهایِ یک‌نواخت‌ساز در حالتِ معمولی گرفته‌ایم.

بلافاصله از (ii) داریم

$$\dot{\mathrm{J}}_r = [\mathrm{J}_r, \mathrm{H}] = 0$$

و با استفاده از (3)

$$\dot{\omega}_r = [\omega_r, \mathrm{H}] = \partial\mathrm{H}/\partial\mathrm{J}_r.$$

پس کمیت‌هایِ $\dot{\omega}_r$ ثابت هستند، و می‌شود آن‌ها را بسامد نامید. البته کمیت‌هایِ دیگری هم برای بسامد نامیده شدن نام‌زد هستند. داریم

$$\frac{d}{dt}e^{i(a\omega)} = [e^{i(a\omega)}, \mathrm{H}] = \frac{e^{i(a\omega)}\mathrm{H} - \mathrm{H}e^{i(a\omega)}}{ih}.$$

[2] بر اساسِ تعریفِ جدیدِ J ها، لازم نیست H همان تابعی از J ها که در حالتِ کلاسیک بود باشد.

با اعمالِ (6) به J ها و ω ها

$$e^{i(a\omega)}\mathrm{H}(\mathrm{J}_r) = \mathrm{H}(\mathrm{J}_r - \alpha_r h)e^{i(a\omega)},$$

و

$$\mathrm{H}(\mathrm{J}_r)e^{i(a\omega)} = e^{i(a\omega)}\mathrm{H}(\mathrm{J}_r - \alpha_r h).$$

بنا بر این

$$\frac{d}{dt}e^{i(a\omega)} = i(\alpha\omega)e^{i(a\omega)} = ie^{i(a\omega)}(\alpha\omega)',$$

که در آن

$$\left.\begin{aligned}(\alpha\omega)h &= \mathrm{H}(\mathrm{J}_r) - \mathrm{H}(\mathrm{J}_r - \alpha_r h),\\ (\alpha\omega)'h &= \mathrm{H}(\mathrm{J}_r + \alpha_r h) - \mathrm{H}(\mathrm{J}_r),\end{aligned}\right\} \qquad (7)$$

کمیت‌هایِ $\acute{\omega}_r$ مربوط به بسامدهایِ شعاعیِ نظریه‌یِ بور [f] هستند در حالی که $(\alpha\omega)$ و $(\alpha\omega)'$، برایِ α یِ صحیح، مربوط به بسامدهایِ گذار هستند. باید به یاد داشته باشیم که ω_r، $(\alpha\omega)$ و $(\alpha\omega)'$ q ـ عدد هستند، و بنابراین، نمی‌توان آن‌ها را با بسامدهایِ بور که c ـ عدد هستند برابر گذاشت. این‌ها توابعی از J هایِ کنونی، که q ـ عدد اند، هستند هستند؛ همان توابعی که بسامد هایِ بور از J هایِ خودشان، ، که c ـ عدد اند، بودند.

فرض کنید x را بتوان به صورتِ زیر بسط داد.

$$x = \sum_\alpha x_\alpha e^{i(\alpha\omega)} = \sum_\alpha e^{i(\alpha\omega)}x'_\alpha, \qquad (8)$$

که در این جا α ها اعدادِ صحیح و x_α ها و x'_α ها فقط تابع‌هایی از J ها هستند. از (6) داریم

$$x'_\alpha(\mathrm{J}_r) = x_\alpha(\mathrm{J}_r + \alpha_r h).$$

همین‌طور

$$\dot{x} = \sum_\alpha x_\alpha i\,(\alpha\omega)e^{i(\alpha\omega)} = \sum_\alpha e^{i(\alpha\omega)}i\,(\alpha\omega)'x'_\alpha \qquad (9)$$

اگر x ها و J ها حقیقی باشند و اگر $\bar{x}_\alpha$ معرفِ مزدوجِ موهومی‌یِ x_α باشد، با برابر قراردادنِ مزدوجِ موهومیِ دو طرفِ (8) خواهیم داشت

$$x = \sum_\alpha e^{-i(\alpha\omega)}\bar{x}_\alpha(\mathrm{J}_r) = \sum_\alpha \bar{x}_\alpha(\mathrm{J}_r + \alpha_r h)e^{-i(\alpha\omega)}$$

با مقایسه‌ی این رابطه با (8) می‌بینیم

$$\bar{x}_{\alpha}(\mathrm{J}_r + \alpha_r h) = x_{-\alpha}(\mathrm{J}_r).$$

اگر نمادگذاری‌ِمان را عوض کنیم این رابطه واضح‌تر می‌شود. به جایِ $x_{\alpha}(\mathrm{J}_r)$ بنویسیم $x(\mathrm{J}, \mathrm{J} - \alpha h)$.

آن وقت

$$\bar{x}(\mathrm{J} + \alpha h, \mathrm{J}) = x(\mathrm{J}, \mathrm{J} + \alpha h)$$

که نشان می‌دهد بین رابطه‌هایی که دامنه‌یِ $x(\mathrm{J}, \mathrm{J} - \alpha h)$ را به دو دسته متغیرِ صریح ش مربوط می‌کند، یک جور تقارن هست. حالا بسطِ ما برایِ x هست

$$x = \sum_{\alpha} x(\mathrm{J}, \mathrm{J} - \alpha h) e^{i(\alpha\omega)} = \sum_{\alpha} e^{i(\alpha\omega)} x(\mathrm{J} + \alpha h, \mathrm{J}).$$

رابطه‌هایِ (7) برایِ بسامدهایِ گذار می‌گویند که بهتر است بگذاریم

$$(\alpha\omega)(\mathrm{J}) = \omega(\mathrm{J}, \mathrm{J} - \alpha h),$$

و

$$(\alpha\omega)'(\mathrm{J}) = \omega(\mathrm{J} + \alpha h, \mathrm{J}).$$

بنابراین از (9) خواهیم داشت

$$\dot{x} = \sum x(\mathrm{J}, \mathrm{J} - \alpha h)\ i\omega(\mathrm{J}, \mathrm{J} - \alpha h) e^{i(\alpha\omega)} = \sum e^{i(\alpha\omega)}\ i\omega(\mathrm{J} + \alpha h, \mathrm{J}) x(\mathrm{J} + \alpha h, \mathrm{J}). \quad (10)$$

فرض کنید y را هم به صورتِ زیر بسط دهیم

$$y = \sum_{\beta} y(\mathrm{J}, \mathrm{J} - \beta h) e^{i(\beta\omega)}.$$

آن وقت با استفاده‌یِ دوباره از (6)، و این حقیقت که ω ها جابه‌جایی هستند،

$$\begin{aligned} xy &= \sum_{\alpha\beta} x(\mathrm{J},\mathrm{J}-\alpha h)e^{i(\alpha\omega)}y(\mathrm{J},\mathrm{J}-\beta h)e^{i(\beta\omega)} \\ &= \sum_{\alpha\beta} x(\mathrm{J},\mathrm{J}-\alpha h)\cdot y(\mathrm{J}-\alpha h,\mathrm{J}-\alpha h-\beta h)e^{i[(\alpha+\beta)\omega]}, \end{aligned}$$

یا این که دامنه‌یِ xy با فرمول زیر داده می‌شود.

$$xy(\mathrm{J},\mathrm{J}-\gamma h) = \sum_{\alpha} x(\mathrm{J},\mathrm{J}-\alpha h)\cdot y(\mathrm{J}-\alpha h,\mathrm{J}-\gamma h). \tag{11}$$

این معادله‌ها راهی برایِ نمایشِ q ـ عددها بر حسبِ c ـ عددها عرضه می‌کند. فرض کنید در عبارت‌هایِ $x(\mathrm{J},\mathrm{J}-\alpha h)$ و $\omega(\mathrm{J},\mathrm{J}-\alpha h)$ به عنوانِ تابع‌هایی فقط از J ها، به جایِ هر J_r ی c ـ عددِ $n_r h$ را جاگذاری کنیم و c ـ عددِ به دست می‌آمده را $x(n,n-\alpha)$ و $\omega(n,n-\alpha)$ بنامیم. می‌توانیم مجموعه‌یِ همه‌یِ c ـ عددهایِ $x(n,n-\alpha)\exp\cdot i\omega(n,n-\alpha)t$ را، که در آن‌ها کافی است (امّا لازم نیست) n دنباله‌ای از مقدارها که پی‌درپی به اندازه‌یِ واحد اختلاف دارند باشد، به عنوانِ نمایشی برایِ مقادیرِ c ـ عددِ x برایِ همه‌یِ مقادیرِ q ـ عددِ J_r در نظر بگیریم. معادله‌یِ (10) نشان می‌دهد که

$$\dot{x}(n,n-\alpha) = i\omega(n,n-\alpha)x(n,n-\alpha),$$

در حالی که معادله‌یِ (11) می‌گوید

$$xy(n,n-\gamma) = \sum_{\alpha} x(n,n-\alpha)y(n-\alpha,n-\gamma),$$

که همان قاعده‌یِ ضربِ هایزنبرگ است. گذشته از این، روشن است که داریم

$$(x+y)(n,n-\alpha) = x(n,n-\alpha)+y(n,n-\alpha).$$

به این ترتیب نمایشِ ما شرط‌هایِ ذکر شده در §۱ و §۲ را برآورده می‌کند، که اثباتی برایِ کافی بودنِ این دسته‌یِ گسسته از n ها است.

با انتخابِ مقادیرِ مختلف برایِ c ـ عددهایِ η_r، مثلاً برایِ n_r هایِ غیرِ صحیح، نمایش‌هایِ متفاوتی برایِ q ـ عددهایِ x با c ـ عددهایِ $x(nm)\exp\cdot i\omega(nm)t$ به دست می‌آید. هر چند تنها یکی

از این نمایش‌ها اهمیتِ فیزیکی دارد، که همانی است که (با فرضِ وجود) برایِ آن هر $x(nm)$ ای برایِ m_r ِکوچک‌تر از یک مقدارِ معین، مثلاً n_{0r}، صفر می‌شود، و حالت‌هایِ نرمالِ نظریه‌یِ بور را برایِ $n_r \geq n_{0r}$ می‌سازد. این مستلزمِ آن است که در بسطِ x، وقتی به جای هر J_r ی c ـ عددِ $(n_{0r} + m_r h)$ جاگذاری شود، هر ضریبی از $x(\mathrm{J}, \mathrm{J} - \alpha h)$ صفر شود ــ m_r ها اعدادی صحیح‌اند که کوچک‌تر از صفر نیستند و حداقل یکی از آن‌ها کوچک‌تر از α_r ِ مربوطه است.

§۵. حرکتِ مداری در اتمِ هیدروژن.

در این‌جا لازم است فرض‌هایی در موردِ شکلِ همیلتونی‌یِ اتمِ هیدروژن بکنیم[3]. می‌توانیم فرض کنیم که شکل آن همان است که در فیزیکِ کلاسیک از مختصات x، و y، و تکانه‌هایِ متناظرِشان p_x، و p_y بود، یعنی

$$\mathrm{H} = \frac{1}{2m}(p_x^2 + p_y^2) - \frac{e^2}{(x^2+y^2)^{\frac{1}{2}}},$$

که e و m، c ـ عدد هستند.

با استفاده از روابطِ

$$x = r\cos\theta, \qquad y = r\sin\theta$$

که در آن‌ها $\cos\theta$ و $\sin\theta$ مشابهِ نظریه‌یِ کلاسیک بر حسبِ $e^{i\theta}$ تعریف می‌شوند، به مختصّه‌هایِ قطبیِ متداولِ r و θ می‌رویم. تکانه‌هایِ p_r و k که مزدوجِ r و θ هستند با رابطه‌هایِ

$$\begin{aligned} p_r &= \frac{1}{2}(p_x\cos\theta + \cos\theta p_x) + \frac{1}{2}(p_y\sin\theta + \sin\theta p_y) \\ k &= xp_y - yp_x \end{aligned}$$

داده می‌شوند.

برایِ آن که ثابت کنیم که آیا r، θ، p_r، و k که به این صورت تعریف می‌شوند کانونیک هستند، باید همه‌یِ کروشه‌پواسون‌هایِ دو به دویِ آن‌ها حساب کنیم. بلافاصله می‌بینیم x و y و r و θ با هم جابه‌جا می‌شوند. هم‌چنین از (3) نتیجه می‌شود

$$[r, p_x] = [(x^2+y^2)^{\frac{1}{2}}, p_x] = x/(x^2+y^2)^{\frac{1}{2}} = \cos\theta,$$

و همین‌طور

$$[r, p_y] = \sin\theta,$$

[3] اتمِ هیدروژن با مکانیکِ جدید توسطِ پائولی در مقاله‌ای که هنوز چاپ نشده بررسی شده.

بنا بر این

$$
\begin{aligned}
[r, k] &= x[r, p_y] - y[r, p_x] \\
&= x \sin\theta - y \cos\theta = 0,
\end{aligned}
$$

و

$$
\begin{aligned}
[r, p_r] &= \frac{1}{2}[r, p_x]\cos\theta + \frac{1}{2}\cos\theta[r, p_x] + \frac{1}{2}[r, p_y]\sin\theta + \frac{1}{2}\sin\theta[r, p_y] \\
&= \cos^2\theta + \sin^2\theta = 1.
\end{aligned}
$$

به علاوه

$$
\begin{aligned}
& r[e^{i\theta}, k] = [re^{i\theta}, k] = [x + iy, xp_y - yp_x] \\
& = ix[y, p_y] - y[x, p_x] = ix - y = ire^{i\theta},
\end{aligned}
$$

پس

$$
[e^{i\theta}, k] = ie^{i\theta}.
$$

به طور مشابهی، بقیّه‌یِ رابطه‌ها، یعنی $[e^{i\theta}, p_r] = 0$، $[k, p_r] = 0$ را هم با استفاده از جبرِ کوانتمی‌یِ مقدماتی می‌توان به دست آورد.

اگر p_x و p_y را بر حسبِ p_r، و k حل کنیم، خواهیم دید که

$$
\begin{aligned}
& p_x + ip_y = (p_r + ik_2/r)e^{i\theta} = e^{i\theta}(p_r + ik_1/r), \\
& p_x - ip_y = (p_r - ik_1/r)e^{-i\theta} = e^{-i\theta}(p_r - ik_2/r),
\end{aligned}
$$

که در این جا

$$
k_1 = k + \frac{1}{2}h, \qquad k_2 = k - \frac{1}{2}h,
$$

و بنابراین با به‌کارگیریِ (6)

$$k_2 e^{i\theta} = e^{i\theta} k_1, \qquad k_1 e^{-i\theta} = e^{-i\theta} k_2.$$

و به این ترتیب داریم

$$\begin{aligned} p_x^2 + p_y^2 &= (p_x - ip_y)(p_x + ip_y) = (p_r - ik_1/r)(p_r + ik_1/r) \\ &= p_r^2 + \frac{k_1^2}{r^2} + ik_1(p_r \frac{1}{r} - \frac{1}{r} p_r). \end{aligned} \tag{12}$$

حالا

$$p_r \frac{1}{r} - \frac{1}{r} p_r = \frac{1}{r}(rp_r - p_r r)\frac{1}{r} = \frac{ih}{r^2}.$$

از این رو

$$p_x^2 + p_y^2 = p_r^2 + \frac{k_1^2 - k_1 h}{r^2} = p_r^2 + \frac{k_1 k_2}{r^2},$$

و

$$\mathrm{H} = \frac{1}{2m}(p_r^2 + \frac{k_1 k_2}{r^2}) - \frac{e^2}{r}. \tag{13}$$

اگر از ابتدا فرض کرده بودیم که همیلتونی همان تابعی از مختصه‌هایِ قطبی است که در کلاسیک بود، به جای این رابطه می‌دیدیم

$$\mathrm{H} = \frac{1}{2m}\left(p_r^2 + \frac{k^2}{r^2}\right) - \frac{e^2}{r}. \tag{13'}$$

تنها راهی که می‌توانیم بفهیم کدام یک از این دو فرض درست است این است که با هر دو محاسبه کنیم و ببینیم نتایجِ کدام یک با تجربه می‌خواند.

با هر دو همیلتونی معادله‌های حرکت می‌شوند

$$\dot{r} = [r, \mathrm{H}] = p_r/m,$$
$$\dot{k} = [k, \mathrm{H}] = 0,$$

$$\dot{\theta} = [\theta, \mathrm{H}] = k/(mr^2),$$

که مثلِ حالتِ کلاسیک می‌دهد $p_r = m\dot{r}$، $k =$ ثابت، $mr^2\dot{\theta} = k$ و بالاخره با

$$\dot{p}_r = [p_r, \mathrm{H}] = \frac{k_1 k_2}{mr^3} - \frac{e^2}{r^2} \qquad \text{با } (13) \tag{14}$$

$$= \frac{k^2}{mr^3} - \frac{e^2}{r^2} \qquad \text{با } (13') \tag{14'}$$

سعی می‌کنیم ثابت‌هایِ حرکتی به شکلِ

$$1/r = a_0 + a_1 e^{i\theta} + a_2 e^{-i\theta} \tag{15}$$

بیابیم که در آن‌ها a_0، a_1، و a_2 ثابت اند. این‌ها متناظر اند با معادله‌یِ حرکتِ بیضوی‌یِ کلاسیک

$$l/r = 1 + \epsilon \cos(\theta - \alpha)$$

که در آن l وترِ قائم، و ϵ خروج از مرکز است.

آهنگِ تغییراتِ $e^{i\theta}$ باهر کدام از H ها به صورتِ زیر داده می‌شود

$$\begin{aligned}
\frac{d}{dt}e^{i\theta} &= [e^{i\theta}, \mathrm{H}] = [e^{i\theta}, k^2]\frac{1}{2mr^2} \\
&= \left\{k[e^{i\theta}, k] + [e^{i\theta}, k]k\right\}/(2mr^2) \\
&= \left\{kie^{i\theta} + ie^{i\theta}k\right\}/(2mr^2) \\
&= \frac{i}{m}e^{i\theta}\frac{k_1}{r^2} = \frac{i}{m}\frac{k_2}{r^2}e^{i\theta}.
\end{aligned}$$

با تغییرِ علامتِ i و h می‌بینیم

$$\frac{d}{dt}e^{-i\theta} = -\frac{i}{m}e^{-i\theta}\frac{k_2}{r^2} = -\frac{i}{m}\frac{k_1}{r^2}e^{-i\theta}.$$

بنا بر این اگر از (15) مشتق بگیریم می‌بینیم

$$-\frac{1}{r}\dot{r}\frac{1}{r} = \frac{i}{m}\left(a_1 e^{i\theta}k_1 - a_2 e^{-i\theta}k_2\right)\frac{1}{r^2},$$

یا

$$-\frac{1}{r}p_r r = -i\left(a_1 e^{i\theta}k_1 - a_2 e^{-i\theta}k_2\right),$$

که با استفاده از

$$p_r - \frac{1}{r}\cdot p_r r = ih/r,$$

می‌شود

$$\begin{aligned} p_r &= -i\left(a_1 e^{i\theta}k_1 - a_2 e^{-i\theta}k_2\right) + ih/r \\ &= -i\left(a_1 e^{i\theta}k_1 - a_2 e^{-i\theta}k_2\right) + ih\left(a_0 + a_1 e^{i\theta} + a_2 e^{-i\theta}\right) \\ &= i\left(a_0 h - a_1 e^{i\theta}k_2 - a_2 e^{-i\theta}k_1\right). \end{aligned} \tag{16}$$

اینک دوباره مشتق بگیریم. نتیجه می‌شود

$$\begin{aligned} m\dot{p}_r &= a_1 e^{i\theta}k_1k_2/r^2 + a_2 e^{-i\theta}k_2k_1/r^2 \\ &= (\frac{1}{r} - a_0)\frac{k_1k_2}{r^2} = \frac{k_1k_2}{r^3} - \frac{a_0k_1k_2}{r^2}, \end{aligned}$$

که اگر بگیریم $a_0 = me^2/(k_1k_2)$، با معادله‌حرکتِ (14) سازگار است ولی با (14’) سازگار نیست.

با یک تغییرِ جزیی در (15) به سادگی می‌توانیم یک ثابتِ‌حرکت برایِ (14’) به دست آوریم. از r، θ، p_r، و k به r، θ'، p_r، و k' تغییرِ متغیّر می‌دهیم. در این جا

$$k' = (k^2 + \frac{1}{4}h^2)^{1/2}, \qquad \theta' = \theta k'/k.$$

این متغیّرهایِ جدید کانونیک اند، زیرا

$$[\theta', k'] = [\theta, k']\frac{k'}{k} = \frac{k}{(k^2 + \frac{1}{4}h^2)^{\frac{1}{2}}}\frac{k'}{k} = 1,$$

و بگیرید

$$1/r = a_0 + a_1 e^{i\theta'} + a_2 e^{-i\theta'}. \tag{15'}$$

درست مثلِ قبل عمل می‌کنیم، و می‌رسیم به

$$\frac{d}{dt}\ e^{i\theta'}=\frac{i}{m}e^{i\theta'}\frac{k_1'}{r^2},\qquad \frac{d}{dt}\ e^{-i\theta'}=-\frac{i}{m}e^{i\theta'}\frac{k_2'}{r^2},$$

که در آن

$$k_1'=k'+\frac{1}{2}h,\qquad k_2'=k'-\frac{1}{2}h,$$

و علاوه بر آن

$$m\dot{p}_r=\frac{k_1'k_2'}{r^2}-\frac{a_0k_1'k_2'}{r^2}=\frac{k^2}{r^3}-\frac{a_0k^2}{r^2},$$

که اگر بگیریم $a_0=me^2/k^2$، در توافقِ با $(14')$ است.

به این ترتیب با همیلتونیِ $(13')$ مدارِ الکترون بیضی‌ای است که محورِ آن می‌چرخد. اگر مختصاتِ دکارتی را بر حسبِ سریِ فوریه‌یِ چندگانه بسط بدهیم، به دو متغیرِ زاویه نیاز داریم که دو بسامدِ مداری می‌دهند. پس ناگزیر بی‌نهایت سطحِ انرژیِ دوگانه داریم که با تجربه ناسازگار است (وقتی که ساختارِ نسبیّتیِ فوقِ‌ریزِ اتمِ هیدروژن را نادیده بگیریم). پس فرضِ $(13')$ برایِ همیلتونی پذیرفتنی نیست.

بنابراین ما همیلتونی را به صورتِ (13) می‌گیریم، که حرکتی تبهگن می‌دهد، و به محاسبه‌یِ بسامدها می‌پردازیم.

§٦. تعیینِ ثابت‌هایِ انتگرال‌گیری.

اینک معادله‌یِ مدار با (15) یا

$$1/r=\frac{me^2}{k_1k_2}+a_1e^{i\theta}+a_2e^{-i\theta}, \tag{17}$$

داده می‌شود و از (16)

$$p_r=i\left(\frac{me^2h}{k_1k_2}-a_1e^{i\theta}k_2+a_2e^{-i\theta}k_1\right). \tag{18}$$

باید شکلِ ثابت‌هایِ انتگرال، a_1 و a_2 را به دست آوریم.

چون k با r و p_r جابه‌جا می‌شود، از (17) و (18) نتیجه می‌شود که با $a_1e^{i\theta}+a_2e^{-i\theta}$ و $(a_1e^{i\theta}k_2-a_2e^{-i\theta}k_1)$ هم جابه‌جا می‌شود. پس k باید با $a_1e^{i\theta}$ و $a_2e^{-i\theta}$ هم جابه‌جا شود.

از (17) و (18) می‌بینیم

$$\frac{k_1}{r}+ip_r\ =\ \frac{me^2}{k_1k_2}k_1+a_1e^{i\theta}k_1+a_2e^{-i\theta}k_1-\frac{me^2h}{k_1k_2}+a_1e^{i\theta}k_2-a_2e^{-i\theta}k_1,$$

$$= \frac{me^2}{k_1} + 2ka_1 e^{i\theta},$$

$$= \frac{me^2}{k_1} + 2c_1 e^{i\theta}, \tag{19}$$

که در این جا $a_1 = k^{-1}c_1$ است. با ضرب کردنِ این معادله از چپ در $e^{i\theta}$ و از راست در $e^{-i\theta}$ و استفاده از این که $e^{i\theta}f(k_1)e^{-i\theta} = f(k_2)$ است، می‌بینیم

$$k_2/r + ip_r = me^2/k_2 + 2e^{i\theta}c_1. \tag{20}$$

پس

$$c_1 e^{i\theta} - e^{i\theta}c_1 = \frac{1}{2}\frac{k_1 - k_2}{r} - \frac{1}{2}me^2\left(\frac{1}{k_1} - \frac{1}{k_2}\right) = \frac{1}{2}\frac{h}{r} + \frac{me^2 h}{2k_1k_2}. \tag{21}$$

به همین صورت اگر $a_2 = k^{-1}c_2$ باشد، می‌توان نشان داد که

$$c_2 e^{-i\theta} - e^{-i\theta}c_2 = -\frac{1}{2}\frac{h}{r} - \frac{me^2 h}{2k_1k_2}, \tag{22}$$

بنا بر این

$$c_1 e^{i\theta} + c_2 e^{-i\theta} = e^{i\theta}c_1 + e^{-i\theta}c_2.$$

پس چون k با $c_1 e^{i\theta}$ و $c_2 e^{-i\theta}$ جابه‌جا می‌شود

$$\frac{1}{r} = \frac{me^2}{k_1k_2} + \frac{1}{k}\left(c_1 e^{i\theta} + c_2 e^{-i\theta}\right) = \frac{me^2}{k_1k_2} + \left(e^{i\theta}c_1 + e^{-i\theta}c_2\right)\frac{1}{k}. \tag{23}$$

البته، مستقیماً با استفاده از معادلاتِ حرکت هم می‌توانستیم یک ثابتِ حرکت به شکلِ

$$1/r = a_0' + e^{i\theta}a_1' + e^{-i\theta}a_2'.$$

به دست آوریم. رابطه‌ی (23) ارتباطِ بینِ a' ها و a ها را نشان می‌دهد. با استفاده از (21) و (22) دو شکلِ اضافیِ دیگر برایِ $1/r$ را به آسانی می‌توان به دست آورد:—

$$\frac{1}{r} = \frac{me^2}{k_1^2} + \frac{1}{k_1}\left(c_1 e^{i\theta} + e^{-i\theta}c_2\right) = \frac{me^2}{k_2^2} + \frac{1}{k_2}\left(e^{i\theta}c_1 + c_2 e^{-i\theta}\right). \tag{24}$$

معادله‌هایِ

$$\frac{k_2}{r} - ip_r = \frac{me^2}{k_2} + 2c_2 e^{-i\theta}, \tag{25}$$

و

$$\frac{k_1}{r} - ip_r = \frac{me^2}{k_1} + 2e^{-i\theta} c_2, \tag{26}$$

را می‌توان به همان طریقی که (19) و (20) به دست آمدند، به دست آورد. با ضرب‌کردنِ معادله‌یِ (19) را در (26) ضرب می‌کنیم. سمتِ چپِ نتیجه با استفاده از (12) و (13) عبارت است از

$$\left(\frac{k_1}{r} + ip_r\right)\left(\frac{k_1}{r} - ip_r\right)$$

$$= k_1 k_2/r^2 + p_r^2,$$

$$= 2m(\mathrm{H} + e^2/r),$$

سمتِ راستِ آن با استفاده از (24) می‌شود

$$\frac{m^2e^4}{k_1^2} + 2\frac{me^2}{k_1}\left(c_1 e^{i\theta} + e^{-i\theta} c_2\right) + 4c_1c_2 = \frac{2me^2}{r} - \frac{m^2e^4}{k_1^2} + 4c_1 2c_2.$$

بنا بر این

$$2mH = 4c_1c_2 - m^2e^4/k_1^2.$$

به همین صورت، با ضرب‌کردنِ معادله‌یِ (20) در (25) به دست می‌آوریم

$$2mH = 4c_1c_2 - m^2e^4/k_2^2.$$

بگیرید

$$2m\mathrm{H} = -m^2e^4/\mathrm{P}^2.$$

که البته P با k، c_1 و c_2 جابه‌جا می‌شود. در این صورت داریم

$$\left.\begin{aligned} c_1c_2 &= \frac{1}{4}m^2e^4\left(\frac{1}{k_1^2} - \frac{1}{\mathrm{P}^2}\right) = \frac{1}{4}m^2e^4\frac{\epsilon_1^2}{k_1^2}, \\ c_2c_1 &= \frac{1}{4}m^2e^4\left(\frac{1}{k_2^2} - \frac{1}{\mathrm{P}^2}\right) = \frac{1}{4}m^2e^4\frac{\epsilon_2^2}{k_2^2}, \end{aligned}\right\} \tag{27}$$

که در آن‌ها

$$\epsilon_1 = \sqrt{1 - \frac{k_1^2}{\mathrm{P}^2}}, \qquad \epsilon_2 = \sqrt{1 - \frac{k_2^2}{\mathrm{P}^2}}.$$

خروج‌ازمرکزهایِ ϵ_1 و ϵ_2 ثابت اند، و با P، و k و با خودشان جابه‌جا می‌شوند.
بگیرید

$$c_1 = \frac{1}{2} m e^2 \epsilon_1 / k_1 \cdot e^{-i\chi}.$$

χ ثابت است و بنابراین با P جابه‌جا می‌شود. چون k با $c_1 e^{i\theta}$ و ϵ_1/k_1 جابه‌جا می‌شود، باید با $e^{-i\chi}e^{i\theta}$ هم جابه‌جا شود، بنا بر این

$$k e^{-i\chi} e^{i\theta} = e^{-i\chi} e^{i\theta} k = e^{-i\chi}(k-h) e^{i\theta}.$$

پس

$$k e^{-i\chi} = e^{-i\chi}(k-h)$$

این قاعده‌یِ جابه‌جاییِ $e^{-i\chi}$ و k نشان می‌دهد که χ مزدوجِ کانونیکِ k است. χ در نظریه‌یِ کلاسیک متناظر با زاویه‌یِ محورِ اصلی‌یِ بیضی با خطِ $\theta = 0$ است. حالا داریم

$$c_1 = \frac{1}{2} m e^2 \epsilon_1 / k_1 \cdot e^{-i\chi} = \frac{1}{2} m e^2 \cdot e^{-i\chi} \epsilon_2 / k_2.$$

و از (27)

$$c_2 = \frac{1}{2} m e^2 \, e^{i\chi} \epsilon_1 / k_1 = \frac{1}{2} m e^2 \epsilon_2 / k_2 \cdot e^{i\chi}.$$

به این ترتیب عبارتِ (17) برایِ $1/r$ به شکلِ زیر در می‌آید

$$\frac{1}{r} = \frac{m e^2}{k_1 k_2} \left\{ 1 + \frac{1}{2} \; \frac{k_2}{k} \; \epsilon_1 \; e^{-i\chi} e^{i\theta} + \frac{1}{2} \; \frac{k_1}{k} \; \epsilon_2 \; e^{i\chi} e^{-i\theta} \right\}. \tag{28}$$

§۷. محاسبه‌یِ بسامدها.

ساده‌ترین بسامدی که می‌توان به دست آورد بسامدِ مداری $\dot{\omega}$ است، که به دست آوردنش شبیهِ محاسبه‌یِ کلاسیکی‌یِ دوره است. رابطه‌یِ بینِ θ و متغیرِ زاویه ω به این صورت است

$$\theta = \omega + \sum b_n e^{ni\omega} = \omega + \sum {b_n}' e^{ni\theta},$$

که b ها ثابت اند. با مشتق‌گیری نتیجه می‌شود

$$\dot{\theta} = \dot{\omega} + \sum{}' b_n{}' \frac{ni}{m}(k - \frac{1}{2}nh)e^{ni\theta}\frac{1}{r^2}$$

که $\sum{}'$ به این معنی است که جمله‌یِ مربوط به $n = 0$ از جمع حذف شده. با ضرب کردن در r^2 از سمتِ راست، به دست می‌آوریم

$$\dot{\theta}r^2 = \dot{\omega}r^2 + \sum{}' b_n{}'' e^{ni\theta},$$

و چون $mr^2\dot{\theta} = k$ است، می‌دهد

$$r^2 = \frac{k}{m\dot{\omega}} - \sum{}' \frac{1}{\dot{\omega}}\, b_n{}'' e^{ni\theta}.$$

پس اگر r^2 را برحسبِ θ بسطِ فوریه دهیم به طوری که هر عاملِ $e^{ni\theta}$ سمتِ راستِ ضریبش باشد، جمله‌یِ ثابتِ شبیهِ حالتِ کلاسیک $k/(m\dot{\omega})$ خواهد شد.

از (28) داریم

$$\begin{aligned} r^2 &= \left\{ \frac{me^2}{k_1k_2}\left(1 + \frac{1}{2}\frac{k_2\epsilon_1}{k}e^{-i\chi}e^{i\theta} + \frac{1}{2}\frac{k_1\epsilon_2}{k}e^{i\chi}e^{-i\theta}\right)\right\}^{-2}, \\ &= \left\{\alpha_0 + \alpha_1 e^{-i\chi}e^{i\theta} + \alpha_2 e^{i\chi}e^{-i\theta}\right\}^{-2} \end{aligned}$$

سمتِ راست را می‌توانیم بسطِ دوجمله‌ای بدهیم. سری‌ای به دست می‌آید که شاملِ جمله‌هایی است که در آن‌ها $e^{i\theta}$ ها با α ها مخلوط شده‌اند، که به سادگی قابلِ محاسبه نیست. یک راهِ راضی‌کننده‌تر این است:

می‌توان نشان داد که r^n برابر است با عبارتی که از بسطِ $(\alpha_0 + \alpha_1 e^{-i\chi} + \alpha_2 e^{i\chi})^{-n}$ بر حسبِ توان‌هایِ $e^{i\chi}$ به دست می‌آید وقتی‌که بعد از هر جمله‌یِ $\beta_s e^{si\chi}$، که در آن β_s مستقل از χ است، توانی مناسبِ $e^{i\theta}$ یعنی $e^{-si\theta}$ را بگذاریم. برایِ اثبات این قضیه فرض می کنیم که برایِ یک n ی درست است و نشان می‌دهیم که برایِ $n+1$ هم درست است. مثلاً فرض کنید

$$\left(\alpha_0 + \alpha_1 e^{-i\chi} + \alpha_2 e^{i\chi}\right)^{-n} = \sum \beta_s e^{si\chi}, \tag{29}$$

و

$$r^n = \sum \beta_s e^{si\chi} e^{-si\theta}. \tag{30}$$

بگیرید

$$r^{n+1} = \sum \gamma_s e^{si\chi} e^{-si\theta},$$

در این صورت

$$\begin{aligned} r^n &= \sum \gamma_s e^{si\chi} e^{-si\theta} \frac{1}{r} = \sum \gamma_s e^{si\chi} \frac{1}{r} e^{-si\theta}, \\ &= \sum \gamma_s e^{si\chi} (\alpha_0 + \alpha_1 e^{-i\chi} e^{i\theta} + \alpha_2 e^{i\chi} e^{-i\theta}) e^{-si\theta}. \end{aligned}$$

با مقایسه با (30)، می‌بینیم که

$$\beta_s e^{si\chi} = \gamma_s e^{si\chi} \alpha_0 + \gamma_{s+1} e^{(s+1)i\chi} \alpha_1 e^{-i\chi} + \gamma_{s-1} e^{(s-1)i\chi} \alpha_2 e^{i\chi};$$

اما این دقیقاً همان شرطی است که

$$\sum \beta_s e^{si\chi} = \sum \gamma_s e^{si\chi} \left(\alpha_0 + \alpha_1 e^{-i\chi} + \alpha_2 e^{i\chi}\right).$$

(توجه کنید که جمله‌ای مثلِ $\gamma_{s+1} e^{(s+1)i\chi} \alpha_1 e^{-i\chi}$، با توجه به طبیعتِ ویژه‌یِ قاعده‌یِ جابه‌جاییِ α ها با $e^{i\chi}$ ها، برابر است با چیزی مستقل از χ ضرب‌در $e^{si\chi}$.) از این‌رو از (29)

$$\sum \gamma_s e^{si\chi} = \left(\alpha_0 + \alpha_1 e^{-i\chi} + \alpha_2 e^{i\chi}\right)^{-n-1},$$

که قضیه را اثبات می‌کند.

به این ترتیب مسئله‌یِ ما به تعیینِ جمله‌یِ مستقل از χ در بسطِ $(\alpha_0 + \alpha_1 e^{-i\chi} + \alpha_2 e^{i\chi})^{-2}$ تقلیل پیدا می‌کند. برایِ انجامِ این‌کار ما عبارتِ $(\alpha_0 + \alpha_1 e^{-i\chi} + \alpha_2 e^{i\chi})$ را تجزیه می‌کنیم. داریم

$$\begin{aligned} (\alpha_0 + \alpha_1 e^{-i\chi} + \alpha_2 e^{i\chi}) &= \frac{me^2}{2kk_1} \left(2\frac{k}{k_2} + \epsilon_1 e^{-i\chi} + \epsilon_2 \frac{k_1}{k_2} e^{i\chi}\right), \\ &= \frac{me^2}{2kk_1} \left\{ \left(1 + \frac{k_1}{\mathrm{P}}\right) + \frac{k_1}{k_2} \left(1 - \frac{k_2}{\mathrm{P}}\right) \right. \\ &\qquad \left. + \epsilon_1 e^{-i\chi} + e^{i\chi} \epsilon_1 \frac{k_1 + h}{k_1} \right\}, \\ &= \frac{me^2}{2kk_1} \left\{ \sqrt{1 + \frac{k_1}{\mathrm{P}}} + e^{i\chi} \frac{k_1 + h}{k_1} \sqrt{1 - \frac{k_1}{\mathrm{P}}} \right\} \\ &\qquad \left\{ \sqrt{1 + \frac{k_1}{\mathrm{P}}} + \sqrt{1 - \frac{k_1}{\mathrm{P}}} e^{-i\chi} \right\} \\ &= \frac{me^2}{2kk_1} \sqrt{1 + \frac{k_1}{\mathrm{P}}} \left\{ 1 + \frac{k_1}{k_2} \sqrt{\frac{\mathrm{P} - k_2}{\mathrm{P} + k_1}} e^{i\chi} \right\} \\ &\qquad \left\{ 1 + e^{-i\chi} \sqrt{\frac{\mathrm{P} - k_2}{\mathrm{P} + k_1}} \right\} \sqrt{1 + \frac{k_1}{\mathrm{P}}}. \end{aligned}$$

حالا باید $(\alpha_0+\alpha_1 e^{-i\chi}+\alpha_2 e^{i\chi})^{-1}$ را به شکلِ کسرهایِ پاره‌ای بنویسیم. اگر برایِ اختصار بگیریم

$$\begin{aligned}
(\mathrm{P}+k_1)^{\frac{1}{2}} &= \lambda_1, \qquad (\mathrm{P}+k_2)^{\frac{1}{2}} = \lambda_2,\\
(\mathrm{P}-k_1)^{\frac{1}{2}} &= \mu_1, \qquad (\mathrm{P}-k_2)^{\frac{1}{2}} = \mu_2,
\end{aligned}$$

و (5) را به یاد بیاوریم، خواهیم داشت

$$\begin{aligned}
(\alpha_0+\alpha_1 e^{-i\chi}+\alpha_2 e^{i\chi})^{-1} &= \frac{2\mathrm{P}}{me^2}\cdot\frac{1}{\lambda_1}\cdot\frac{1}{1+e^{-i\chi}\mu_2/\lambda_1}\cdot\frac{1}{1+k_1\mu_2/k_2\lambda_1 e^{i\chi}}\cdot\frac{kk_1}{\lambda_1},\\
&= \frac{2\mathrm{P}}{me^2}\cdot\frac{1}{\lambda_1}\cdot\frac{1}{e^{i\chi}+\mu_2/\lambda_1}\cdot e^{i\chi}\cdot\frac{1}{1+k_1\mu_2/k_2\lambda_1\cdot e^{i\chi}}\cdot\frac{kk_1}{\lambda_1}.
\end{aligned}$$

حالا به سادگی می‌شود نشان داد که

$$e^{i\chi} = \left(e^{i\chi}+\frac{\mu_2}{\lambda_1}\right)\frac{\lambda_1^2}{2k_1} - \frac{\lambda_1\mu_2}{2k_1}\left(1+\frac{k_1\mu_2}{k_2\lambda_1}e^{i\chi}\right).$$

پس

$$\begin{aligned}
(\alpha_0+\alpha_1 e^{-i\chi}+\alpha_2 e^{i\chi})^{-1} &= \frac{\mathrm{P}}{me^2}\frac{\lambda_1}{k_1}\frac{1}{1+k_1\mu_2/k_2\lambda_1\cdot e^{i\chi}}\frac{kk_1}{\lambda_1}\\
&\quad -\frac{\mathrm{P}}{me^2}\frac{1}{\lambda_1}\frac{1}{e^{i\chi}+\mu_2/\lambda_1}\mu_2 k. \qquad (31)
\end{aligned}$$

حالا باید سمتِ راست را مجذور کنیم، که چهار جمله می‌شود، و هر جمله را بسطِ دوجمله‌ای بدهیم، و جمله‌یِ مستقل از χ را از آن خارج کنیم. جمله‌یِ

$$\left[\frac{\mathrm{P}}{me^2}\frac{\lambda_1}{k_1}\frac{1}{1+k_1\mu_2/k_2\lambda_1\cdot e^{i\chi}}\frac{kk_1}{\lambda_1}\right]^2$$

به اندازه‌یِ $(\mathrm{P}k/me^2)^2$ سهم دارد. جمله‌یِ

$$\left[\frac{\mathrm{P}}{me^2}\frac{1}{\lambda_1}\frac{1}{e^{i\chi}+\mu_2/\lambda_1}\mu_2 k\right]^2$$

سهمی ندارد، زیرا $(e^{i\chi}+\mu_2/\lambda_1)^{-1} = e^{i\chi}(1+\mu_2/\lambda_1\cdot e^{-i\chi})^{-1}$ است، که وقتی بسط داده شود تنها شاملِ جمله‌هایِ به شکلِ e^{-nik} با $n>0$ است. بهترین راهِ محاسبه‌یِ سهمِ دو جمله‌یِ باقی‌مانده باز هم استفاده از کسرهایِ پاره‌ای است. به سادگی می‌توان نشان داد که

$$\frac{\mathrm{P}}{me^2}\frac{\lambda_1}{k_1}\frac{1}{1+k_1\mu_2/k_2\lambda_1\cdot e^{i\chi}}\frac{kk_1}{\lambda_1}\cdot\frac{\mathrm{P}}{me^2}\frac{1}{\lambda_1}\frac{1}{e^{i\chi}+\mu_2/\lambda_1}\mu_2 k$$

$$=-\frac{\mathrm{P}^2}{m^2e^4}\frac{\lambda_1}{k_1}\left\{\frac{1}{2}k_1\frac{1}{e^{i\chi}+\mu_2/\lambda_1}-\frac{1}{1+k_1\mu_2/k_2\lambda_1\cdot e^{i\chi}}\frac{1}{2}\frac{k_1\mu_2}{\lambda_1}\right\}\mu_2 k,$$

و

$$-\frac{\mathrm{P}}{me^2}\frac{1}{\lambda_1}\frac{1}{e^{i\chi}+\mu_2/\lambda_1}\mu_2 k\cdot\frac{\mathrm{P}}{me^2}\frac{\lambda_1}{k_1}\frac{1}{1+k_1\mu_2/k_2\lambda_1\cdot e^{i\chi}}\frac{kk_1}{\lambda_1}$$

$$=-\frac{\mathrm{P}^2}{m^2e^4}\frac{\lambda_1}{k_1}\left\{-\frac{\lambda_1^2\mu_1^2}{2k_1}\frac{1}{1+k_1\mu_2/k_2\lambda_1\cdot e^{i\chi}}+\frac{1}{e^{i\chi}+\mu_2/\lambda_1}\frac{\lambda_1\lambda_2^2\mu_2}{2k_1}\right\}\frac{kk_1}{\lambda_1}.$$

به این ترتیب سهمِ جمله‌یِ اول

$$\frac{\mathrm{P}^2}{m^2e^4}\frac{\lambda_1}{k_1}\cdot\frac{1}{2}\frac{k_1\mu_2}{\lambda_1}\cdot\mu_2 k=\frac{\mathrm{P}^2k}{2m^2e^4}(\mathrm{P}-k_2),$$

و سهمِ جمله‌یِ دوم

$$\frac{\mathrm{P}^2}{m^2e^4}\frac{1}{\lambda_1}\cdot\frac{\lambda_1^2\mu_1^2}{2k_1}\cdot\frac{kk_1}{\lambda_1}=\frac{\mathrm{P}^2k}{2m^2e^4}(\mathrm{P}-k_1).$$

بنابراین جمله‌یِ مستقل از χ در بسطِ $(\alpha_0+\alpha_1e^{-i\chi}+\alpha_2e^{i\chi})^{-2}$ سهمِ سه جمله است:

$$\frac{\mathrm{P}^2}{m^2e^4}+\frac{\mathrm{P}^2k}{2m^2e^4}(\mathrm{P}-k_2)+\frac{\mathrm{P}^2k}{2m^2e^4}(\mathrm{P}-k_1)=\frac{\mathrm{P}^3k}{m^2e^4}.$$

این اندازه‌یِ $k/m\dot{\omega}$ است. بنا بر این

$$\dot{\omega}=me^4/\mathrm{P}^3,$$

که همان تابعی از P است که در نظریه‌یِ کلاسیک بود. حالا از آن جا که $\mathrm{H}=-me^2/2\mathrm{P}^2$، داریم

$$\dot{\omega}=\partial\mathrm{H}/\partial\mathrm{P},$$

که ثابت می‌کند P مزدوجِ کانونیکِ ω است و بنابراین متغیرِ کنش است. بسامدهایِ گذار حالا با

$$\frac{\mathrm{H}(\mathrm{P}+nh)-\mathrm{H}(\mathrm{P})}{h}=\frac{me^2}{2h}\left\{\frac{1}{\mathrm{P}^2}-\frac{1}{(\mathrm{P}+nh)^2}\right\}\qquad(32)$$

داده می‌شود.

عبارتِ r از بسطِ سمتِ راستِ (31) به دست می‌آید که در آن توان‌هایِ مناسبی از $e^{i\theta}$ پشتِ هر جمله قرار بگیرد. ضریبِ هر جمله با جاگذاری‌یِ $\mathrm{P} = 0$ صفر می‌شود، که باعث می‌شود دامنه‌هایِ $x(nm)$ در نمایشِ c ـ عددِ دکارتی، وقتی n یا m صفرند، صفر شود. این مطلب، بر اساسِ اصل‌هایِ §۴ اشاره دارد به این که حالتِ $\mathrm{J} = h$ حالتِ نرمال است. (برایِ این که اثبات کامل شود لازم است که نشان داده شود که $x(nm) = 0$ است، وقتی که n عددی صحیح و منفی، و m عددی صحیح و مثبت است.) اگر این طور باشد، باید P را در (32) مضربِ صحیحی از h گذاشت، که پس از آن بسامدهایِ مشاهده‌شده‌یِ طیفِ هیدروژن به دست می‌آید.

نویسنده به خاطرِ بحث‌ها یِ باارزش و نقادی‌یِ این مقاله، عمیقاً مدیونِ آقایِ ر. پ. فاولر، عضو انجمنِ سلطنتی، است.

یادداشت‌ها

[1] Heisenberg, ‘Zeits. f. Phys.,’ vol 33, p. 879 (1925)

[2] Dirac, ‘Roy. Soc. Proc.,’ A, Vol.109, p. 642 (1925).

این شرط‌هایِ کوانتمی توسطِ بورن، هایزنبرگ و جوردن در

‘Zeits. f. Phys.,’ vol 35, p. 557 (1926)

مستقلاً به دست آمده است.

[۳] به ویژه مقاله‌یِ بورن و جوردن در

‘Zeits. f. Phys.,’ vol 34, p. 858 (1925)

را ببینید. هم‌چنین مقاله‌یِ بورن، هایزنبرگ و جوردن درمرجعِ [2]

[2] Kramers and Heisenberg, ‘Zeits. f. Phys.,’ vol. 31, p. 681, equation (18), (1925).

[۳] در حالتِ خاصِ نوسان‌گرِ پلانک، از آن‌جا که انرژی تابعی خطّی از J است، بسامد در هر صورت درست در می‌آید.

اسامی ِ خاص:

[a] P. A. M. Dirac, [b] 1851 Exhibition Senior Research Student, St. John’s College, Cambridge; [c] R. H. Fowler, [d] F. R. S. = Fellow of Royal Society [e] Heisenberg; [f] Bohr, [g] Kramers;