Fizikai Szemle

MAGYAR FIZIKAI FOLYÓIRAT

A Mathematikai és Természettudományi Értesítőt az Akadémia 1882-ben indította
A Mathematikai és Physikai Lapokat Eötvös Loránd 1891-ben alapította

LVIII. évfolyam 4. szám 2008. április

KORRESPONDENCIA-ELV, DISZPERZIÓELMÉLET ÉS EGY PÁR KÉZENFEKVŐ ÖTLET

avagy hogyan fedezte fel Heisenberg a kvantummechanikát

Hajdu János
Kölni Egyetem, Elméleti Fizikai Intézet

Mint ismeretes, a kvantummechanika két megfogalmazásának, a mátrixmechanikának, illetve a hullámmechanikának a felfedezéséhez (vagy megalkotásához) *Werner Heisenberg* jutott el 1925-ben, illetve *Erwin Schrödinger* 1926-ban (*1. ábra*). A mátrixmechanika közvetlen elődje a félklasszikus atomdinamika. Ennek alapkövét *Niels Bohr* rakta le, aki felismerte, hogy az atomszerkezet kulcsa a Planck-állandó (1913). Jóllehet a félklasszikus elmélet egy sor jelenséget értelmezni tud, 1922–23-ra nyilvánvalóvá vált, hogy egy elmélet, amelyben a klasszikus pályák menti folytonos mozgás és a pályák közötti kvantumugrások merőben különböző koncepciói keverednek, nem szolgáltathatja az atomi rendszerek viselkedésének teljes érvényű magyarázatát.

Írásunkban felelevenítjük azokat a megfontolásokat (vagy talán csak intuitív ráérzéseket) amelyek elvezették Heisenberget a félklasszikus elméletből a mátrixmechanikába. Mint látni fogjuk, ebben a folyamatban fontos szerep jutott a korrespondencia-elvnek (Bohr, 1920) és a diszperzióelméletnek (*Hendrik Kramers, Max Born,* 1924).

Mivel a félklasszikus atomdinamika már régóta nem szerepel az egyetemi kvantummechanika oktatás kánonjában, a következő fejezetben összefoglaljuk ennek lényegét. Ezek után felidézzük a diszperzió klasszikus modelljét, valamint a klasszikus-empírikus f-összegzési szabályt, és néhány megjegyzés erejéig kitérünk Kramers félklasszikus elméletére. Ezt követően részletesen elemezzük Heisenberg úttörő munkájának gondolatmenetét, különös tekintettel a helykoordinátához rendelt kétindexes mennyiségekre és az új kvantumfeltételre. A döntő lépés itt az új kvantumfeltétel származtatása, egy bizonyos, a klasszikus fázistérfogattal kapcsolatos mennyiség átvitele a kvantumelméletbe, ami magával hozza a koordinátához rendelendő kétindexes mennyiség bevezetésének szükségességét.

Befejezésül rövid pillantást vetünk Heisenberg felfedezésének utótörténetére.

Félklasszikus atomdinamika

A következőkben az egyszerűség kedvéért egy szabadsági fokra szorítkozunk. A félklasszikus atomdinamika két posztulátumra épül. Az egyik, a kvantumfeltétel, meghatározza az E teljes energia megengedett E_n diszkrét értékeit az n = (0), 1, 2, … kvantumszámmal jelölt stacionárius állapotban. A másik, a frekvenciafeltétel, kimondja, hogy az n és m kvantumszámú állapotok közötti ugrásszerű átmenetek során kibocsátott, illetve elnyelt (elektromágneses) sugárzás ω_{mn} frekvenciáját az

$$\omega_{mn} = \frac{1}{\hbar}\left(E_m - E_n\right) \tag{1}$$

összefüggés határozza meg. Ez a feltétel kielégíti a színképvonalak frekvenciájára vonatkozó

$$\omega_{mn} = \omega_{ml} + \omega_{ln} \tag{2}$$

Rydberg–Ritz-féle tapasztalati kombinációs szabályt. A fenti két feltételt Bohr vezette be és alkalmazta a hidrogénatom Rutherford-féle modelljére (1913). Ebben egy elektron kering egy rögzített, kisméretű pozitív töltésű mag Coulomb-terében. Az elektron L impulzusnyomatéka konstans, pályája kötött állapotban ($E < 0$) egy ellipszis. Mivel L a modell egyetlen hatásdimenziójú konstans fizikai mennyisége, Bohr az

$$L = n\hbar, \quad n = 1,\ 2,\ \dots \tag{3}$$

kvantumfeltételt rótta ki. Mint ismeretes, az (1) és (3) feltételek által meghatározott frekvenciák teljesen megfelelnek a hidrogén megfigyelt színképvonalainak. A (3) feltételt *Arnold Sommerfeld* periodikus mozgás – $x(t+T) = x(t)$ – esetében a

$$\Phi = \oint p\,dx = 2\pi\hbar\,(n+\alpha) \tag{4}$$

feltételre általánosította. Itt $p(x, E)$ a

$$H(p, x) = \frac{p^2}{2m} + V(x) = E$$

összefüggésből kifejezett impulzus, α egy határozatlan állandó, $0 \le \alpha < 1$, és az integrál a mozgás egy periódusára terjesztendő ki. Az E energiához tartozó $\Phi(E)$ fázistérfogatból a T periódus, illetve az $\omega_1 = 2\pi/T$ alapfrekvencia meghatározható,

$$\frac{d\Phi}{dE} = \oint \frac{\partial p}{\partial E}\,dx = \oint \frac{dx}{\partial H/\partial p} = \oint dt = T. \tag{5}$$

(Felhasználtuk az $\dot{x} = \partial H/\partial p$ mozgásegyenletet.) A mozgás

$$x(t) = \sum_k x_k\, e^{i k \omega_1 t} \tag{6}$$

$k = 0, \pm 1, \pm 2\ \dots$, $x_{-k} = x_k^*$, Fourier-felbontásában, ahol x_k és ω_1 az E energia függvényei, általában fellépnek az ω_1 alapfrekvencia $k\omega_1$ felharmonikusai is.

Az (1) és (4) feltételek bizonyos mértékig összefonódnak a Bohr-féle korrespondencia-elvben, amely kimondja, hogy a kvantumelméletnek csak annyira szabad eltérnie a klasszikus elmélettől, hogy az ω_{mn} frekvenciák $m \gg k = m-n$ esetében (közelítőleg) egybe essenek a klasszikus frekvenciákkal. Az $E_m = E(m) = E(n+k)$ jelöléssel

$$\omega_{mn} = \frac{1}{\hbar}\left[E(n+k) - E(n)\right] \approx k\frac{1}{\hbar}\frac{dE}{dn}, \tag{7}$$

ha $n \gg k$, és az $\omega_{mn} \approx k\omega_1$ korrespondenciából következően

$$\frac{1}{\hbar}\frac{dE}{dn} = \omega_1. \tag{8}$$

Mivel (4), (5) szerint $d\Phi = 2\pi\hbar\,dn$, $dE = \omega_1\,d\Phi/2\pi$, látjuk, hogy a (4) kvantumfeltétel kielégíti a korrespondencia-elvet.

Egyszerű példaként tekintsük a merevtengelyű rotátort. Az x koordináta most a ϕ forgásszög, $p = \Theta\dot{\phi}$, ahol Θ a tehetetlenségi nyomaték, $H = L^2/2\Theta$. Mivel L konstans $\Phi = 2\pi L$, és (4)-ből, $\alpha = 0$ választással

$$L = n\hbar, \qquad E_n = \frac{\hbar^2 n^2}{2\Theta}. \tag{9}$$

A klasszikus alapfrekvencia $\omega_1 = 2\pi\,dE/d\Phi = L/\Theta$. A mozgást a $\phi(t) = \omega_1 + \phi_0 \bmod 2\pi$ fűrészfoggörbe írja le, amelyben végtelen sok $k\omega_1$ felharmonikus keveredik. Ha $n \gg k$, akkor

$$\omega(n+k, n) = \frac{E(n+k) - E(n)}{\hbar},$$

tehát a korrespondencia-elv teljesül.

A félklasszikus atomdinamika sikerek és csalódások sorozatát teremtette. Magyarázatot adott az egyszerűbb atomszínképekre, molekulák rezgési és forgási színképére, Röntgen-színképekre, a normális Zeeman-effektusra, a lineáris Stark-effektusra, korrekt kiválasztási szabályokkal és intenzitásokkal és egy szerencsés véletlen folytán a hidrogén színképének finomszerkezetére is (Sommerfeld, 1917). Ezzel szemben teljesen csődöt mondott a héliumatom, a hidrogénmolekula-ion, az anomális Zeeman-effektus és a nemlineáris Stark-effektus tárgyalásánál, s ami további csalódást okozott: nem tudott magyarázatot adni az aperiodikus mozgás esetében fellépő kvantumjelenségekre, kiváltképpen azokra, amelyek elektronok atomokon való inelasztikus szórásakor figyelhetőek meg (Franck–Hertz-kísérlet), jóllehet éppen ez nyújtotta az első közvetlen bizonyítékot az atomok diszkrét energiaszintjeinek létezésére.

Diszperzióelmélet

Ha fénysugár esik anyagra, akkor szórt fény keletkezik, amelynek spektrális összetétele általában különbözik a beeső fényétől. Ez a diszperziónak nevezett jelenség a klasszikus fizika keretén belül is magyarázható (lásd pl. Novobátzky, Neugebauer: *Elektrodinamika és optika*. Bp. 1951). A fény elektromágneses tere gyorsuló mozgásra és ennek következményeként elektromágneses sugárzásra készteti az anyagban lévő elektromosan töltött részecskéket. Egy elasztikusan kötött elektron esetében (Thomson-féle atommodell), ha elhanyagoljuk a fény (az elektromosnál sokkal kevésbé hatékony) mágneses összetevőjét és egy ω frekvenciájú monokromatikus fényhullámra szorítkozunk, amelynek hullámhossza nagyobb, mint az elektron rezgési amplitúdója (az atom mérete), akkor az elektron mozgásegyenlete a szokásos jelölésekkel az

$$\ddot{\boldsymbol{r}} + \omega_0^2 \boldsymbol{r} = -\frac{e}{m}\boldsymbol{E}_0\, e^{-i\omega t} \tag{10}$$

alakot ölti. Megoldása $\boldsymbol{r}(t) = \boldsymbol{r}_0\, e^{-i\omega t}$, ahol

$$\boldsymbol{r}_0 = \frac{e}{m}\frac{1}{\omega^2 - \omega_0^2}\boldsymbol{E}_0. \tag{11}$$

Ha térfogategységenként N atom és ezek mindegyikében $z\omega_k$, $k = 1, \dots, z$ rezgési frekvenciájú elektron van

1. ábra. Werner Heisenberg és Erwin Schrödinger

jelen, akkor a térfogategység teljes dipólnyomatéka

$$\boldsymbol{P} = \frac{e^2 N}{m} \sum_k \frac{1}{\omega_k^2 - \omega_0^2} \boldsymbol{E}. \qquad (12)$$

Felhasználva a $\boldsymbol{D} = \boldsymbol{E} + 4\pi\boldsymbol{P} = \varepsilon\boldsymbol{E}$ és az $\varepsilon = n^2$ összefüggéseket, ahol n a törésmutató, az

$$n^2 - 1 = 4\pi \frac{e^2}{m} \sum_k \frac{1}{\omega_k^2 - \omega_0^2} \qquad (13)$$

eredményt kapjuk (*W. Sellmaier,* 1872). A kísérleti tényeket pontosabban leírja az

$$n^2 - 1 = 4\pi \frac{e^2}{m} \sum_k \frac{f_k}{\omega_k^2 - \omega_0^2} \qquad (14)$$

tapasztalati képlet (*H. Helmholtz,* 1874, 1892), ahol most ω_k a mért emissziós, illetve abszorpciós frekvenciákat jelenti és az f_k-k pozitív vagy negatív empirikus állandók (úgynevezett oszcillátorerősségek). $f_k > 0$ normális, $f_k < 0$ anomális diszperziót jellemez. Megkövetelve, hogy $\omega_k \ll \omega$ esetében (11) és (14) összeessenek, a fontos

$$\sum_k f_k = z N \qquad (15)$$

úgynevezett f-összegzési szabályt nyerjük (*W. Kuhn, W. Thomas, F. Reiche,* 1925).

A (14) tapasztalati képlet kvantumelméleti megalapozására tett első kísérlet (*R. Ladenburg,* 1921) után Kramers (a levezetést mellőzve) az

$$n^2 - 1 = 4\pi \frac{e^2}{m} \sum_{(e,\,a)} \frac{f_{e,\,a}}{\omega_{e,\,a}^2 - \omega_0^2} \qquad (16)$$

formulát tette közzé (1924), ahol $\omega_{e,\,a} = \omega(l, l-k)$, $k \gtrless 0$ a kvantumelméleti emissziós és abszorpciós frekvenciák, és ezekhez hasonlóan, Kramers által az

$$f_{e,\,a} = \Gamma(l, l-k)\, \omega(l, l-k) \qquad (17)$$

alakban megadott oszcillátorerősségek szintén a kvantumátmenetekhez hozzárendelt mennyiségek. (16)-ban az összegzés a rendszer összes lehetséges emissziós és abszorpciós átmenetére terjesztendő ki. *Born A kvantummechanikáról* című munkája (1924), amihez Heisenberg is hozzájárult számításokkal, alátámasztotta Kramers eredményét. Klasszikus mennyiségek kvantumelméleti átültetésére Kramers és őt követve Born a

$$k\omega_1 \to \omega(n, n-k), \qquad (18)$$

$$k \frac{dE}{dn} \to E(n) - E(n-k) \qquad (19)$$

és általánosan, bármely $f(n)$ mennyiségre, a

$$k \frac{df}{dn} \to f(n) - f(n-k) \qquad (20)$$

szabályt posztulálják. Ezek a szabályok nem tévesztendők össze a korrespondencia-elvvel (jóllehet ez ihlette őket). Ha az $\omega_1 = dE/\hbar dn$ összefüggéssel bevezetünk egy folytonos változót, akkor $n \gg k$ esetében (19) valóban a korrespondencia-elvre redukálódik. A (18)–(20) szabályok azonban nincsenek az $n \gg k$ feltételhez kötve. Másrészt viszont, ha n egy diszkrét változó, az n szerinti deriválás nincs értelmezve. De esetünkben ennek nincs különösebb jelentősége, hiszen éppen a fenti szabályok segítségével visszatérünk az átmenetileg folytonosként tekintett változóról a diszkrét n változóra.

Mint egy egyszerű dimenzióanalízis mutatja

$$\Gamma_{lk} = \frac{m}{\hbar}\,(\text{hosszúság})^2.$$

Mivel esetünkben az egyetlen hosszúságdimenziójú mennyiség az elektron helyzetvektora, kézenfekvőnek tűnik, hogy az elektron koordinátáihoz is indexpárral jelölt átmeneti mennyiségeket kellene hozzárendelni éspedig úgy, hogy a (15) f-összegzési szabály kielégüljön.

Új kvantumfeltétel

1925 tavaszán Heisenberget erős szénanátharohamok gyötrik. A füves térségekben bővelkedő Göttingenből a sziklás Helgoland-szigetre menekül. Ott állapota gyorsan javul, folytatja az intenzív kutatómunkát. A félklasszikus atomdinamikát elveti; egy új kvantummechanikát keres, amelyben csak megfigyelhető mennyiségek lépnek fel (v.ö. Heisenberg: *A rész és az egész.* Bp. 1974, 5. fejezet). Egyrészt a félklasszikus elméletből megtartja az (1) frekvenciafeltételt és a (18)–(20) átírási szabályokat. Másrészt felismeri, hogy a $\Phi(E)$ fázistérfogat nem írható át (20) segítségével, viszont $d\Phi/dn$ átírható:

$$\Phi = \oint p\, dx = m \oint \dot{x}^2\, dt. \qquad (22)$$

Mivel (6)-tal

$$\dot{x}^2 = -\sum_l e^{il\omega t} \sum_k k\omega(l-k)\omega\, x_k x_{l-k} \qquad (23)$$

és

$$\oint e^{il\omega t} = \begin{cases} 2\pi/\omega, \text{ ha } l = 0 \\ 0, \text{ ha } l \neq 0 \end{cases} \tag{24}$$

fennáll

$$\Phi = 2\pi\, m \sum_k k^2 \omega\, |x_k|^2 \tag{25}$$

és

$$\frac{d\Phi}{dn} = 2\pi\, m \sum_k k \frac{d}{dn}\left(k\omega\, |x_k|^2\right). \tag{26}$$

A (26) jobb oldalán az összegzendő mennyiség típusa $k\,df/dn$, olyan, mint amilyent a (20) szabály megkíván. Néhány egyszerű átalakítás után

$$\frac{d\Phi}{dn} = 4\pi\, m \sum_k \omega(n,k)\, |x(n,k)|^2 \tag{27}$$

adódik. Vegyük észre, hogy ez az eredmény egyelőre teljesen formális, hiszen az $x(n,k)$ mennyiségekről csupán azt tudjuk, hogy valamilyen módon az x koordinátához vannak hozzárendelve, de meghatározásuk módja még tisztázatlan. Az $x \to x(n,k)$ hozzárendelés több okból sem meglepő. Mint említettük, erre utal a félklasszikus diszperzióelmélet, valamint az is, hogy az $x_k(E)$ Fourier-együtthatóba az $E = E_n$ diszkrét energiát beírva egy kétindexes félklasszikus mennyiséget kapunk, $x_k(E_n) = \tilde{x}(n,k)$. Kézenfekvőnek tűnik továbbá, hogy ha a (6) Fourier-felbontásban a $k\omega_1$ frekvenciákat $\omega(n, n-k)$-val helyettesítjük, akkor indokolt az x_k amplitúdót is egy kétindexes $x(n, n-k)$ mennyiséggel helyettesíteni,

$$x_k e^{ik\omega t} \to x(n, n-k)\, e^{i\omega(n,n-k)t}. \tag{28}$$

Ez Heisenberg sémája a Fourier-összetevők kvantumelméleti átírására. Továbbá, mivel $x(n, n-k)$ az x_k Fourier-együttható átírása, ezért Heisenberg az $x(n, n-k)$ típusú mennyiségekre a Fourier-együtthatók számolási szabályaival analóg szabályokat ír elő. Például két függvény szorzatának Fourier-együtthatói a faktorok együtthatóinak konvolúciója,

$$z(t) = x(t)\, y(t) \;\leftrightarrow\; z_k = \sum_l x_l y_{k-l} \tag{29}$$

és ennek megfelelően

$$x_l \to z(n,k) = \sum_l x(n,l)\, y(l,k). \tag{30}$$

Hasonlóan

$$x^*(n,l) = x(l,n), \tag{31}$$

mert $x_k^* = x_{-k}$ ($x(t)$ valós). Végül a félklasszikus (4) kvantumfeltételtől, pontosabban az általánosabb (mert a határozatlan α állandót nem tartalmazó)

$$\frac{d\Phi}{dn} = \frac{d}{dn}\oint p\, dx = 2\pi\hbar \tag{32}$$

feltételtől eltérően Heisenberg új kvantumfeltételként a

$$2m \sum_k \omega(n,k)\, |x(n,k)|^2 = \hbar \tag{33}$$

követelményt írja elő. Tehát nem a $d\Phi/dn$ klasszikus mennyiséget teszi egyenlővé $2\pi\hbar$-sal, (ami visszavezetne a félklasszikus elmélethez), hanem $d\Phi/dn$-nek a kvantumelméletbe átírt megfelelőjét (v.ö. (27)). Ez a kézenfekvőnek tűnő lépés a félklasszikus atomdinamikától való teljes elszakadáshoz vezet. Heisenberg munkáját olvasva Born és *Pascual Jordan* hamar felismerték, hogy Heisenberg (33) feltétele egyenértékű az x koordinátához és p impulzushoz rendelt $x(k,l)$, illetve $p(k,l)$ mátrixok csererelációjával, absztrakt írásmódban

$$px - xp = -i\hbar \tag{34}$$

(1925). (Ez a mai kvantummechanikai formalizmus segítségével könnyen belátható: $H|n\rangle = E_n|n\rangle$. $\omega(n,k) = (E_n - E_k)/\hbar$, (33) bal oldala $m\langle n|[[x,H],x]|n\rangle/\hbar = i\langle n|[p,x]|n\rangle$ minden $|n\rangle$-re.)

Ellenőrzés

A (33) kvantumfeltétel megfogalmazása után Heisenberg első dolga volt ezt ellenőrzés céljából a harmonikus oszcillátorra alkalmazni. Az $\ddot{x} + \omega^2 x = 0$ klasszikus mozgásegyenlet megoldását az $x(t) = x e^{i\omega t}$ alakban keresve $-\omega^2 x = -\omega_0^2 x$, tehát vagy $x \neq 0$ és akkor $\omega = \pm\omega_0$,

$$x(t) = x_+ e^{i\omega_0 t} + x_- e^{-i\omega_0 t}, \tag{35}$$

vagy az $x = 0$ adódik. Ennek megfelelően $k = \pm 1$, $\omega(n, n\pm 1) = \pm\omega_0$, $x_\pm \to x(n, m\mp 1)$. Az

$$E = \frac{m}{2}\dot{x}^2 + \frac{m\omega_0^2}{2}x^2 \tag{36}$$

teljes energia két összetevőjének megfelelő kvantumelméleti kifejezések időfüggő, nemdiagonális mennyiségek (azaz van olyan $k \neq 0$, hogy $a(n, n-k) \neq 0$), de összegük diagonális (csak $a(n,n) \neq 0$) és független az időtől,

$$E_n = m\omega_0^2\left[|x(n,n-1)|^2 + |x(n,n+1)|^2\right]. \tag{37}$$

Amikor Heisenberg észlelte, hogy a teljes energiára egy stacionárius állapotmennyiség adódik, biztos lett benne, hogy jó úton jár. Hátra volt még a diszkrét E_n energiaértékek meghatározása. Az oszcillátor esetében a (33) kvantumfeltétel

$$2m\omega_0\left[|x(n,n-1)|^2 + |x(n,n+1)|^2\right] = \hbar, \tag{38}$$

egy kéttagú rekurziós képlet az $|x(n, n\pm 1)|^2$ mennyiségekre. Ha feltételezzük, hogy létezik egy legalacsonyabb energiaérték, és ehhez az $n = 0$ kvantumszámot rendeljük, akkor $x(0, -1) = 0$ kell, hogy legyen és így

$$2\,m\,\omega_0\,|x(0, 1)|^2 = \hbar,$$

$$2\,m\,\omega_0\left[\,|x(1, 2)|^2 + |x(1, 0)|^2\right] = \hbar,$$

azaz

$$2\,m\,\omega_0\,|x(1, 2)|^2 = 2\hbar \tag{39}$$

és tetszőleges $n = 0, 1, 2, \ldots$ értékre

$$2\,m\,\omega_0\,|x(n-1, n)|^2 = n\hbar \tag{40}$$

Ezt behelyettesítve (37)-be a Planck által már korábban megadott

$$E_n = \hbar\,\omega_0\left(n + \frac{1}{2}\right) \tag{41}$$

értékek adódnak.

Egy további fontos ellenőrzést az f-összegzési szabály képezte. Az $N = z = 1$ esetre szorítkozva Heisenberg az oszcillátorerősségre az

$$f(n, k) = \frac{2\,m}{\hbar}\,|x(n, k)|^2\,\omega(k, n) \tag{42}$$

kifejezést kapja, amely (33) miatt valóban kielégíti a

$$\sum_f f(n, k) = 1 \tag{43}$$

összegzési szabályt. Heisenberg meg is jegyzi, hogy a (33) kvantumfeltétel azonos az összegzési szabállyal (ha f-en a (42) korrekt kvantumelméleti kifejezést értjük).

Heisenberg megvizsgálja még az anharmonikus oszcillátor egy speciális esetét is. Ennek a bonyolultabb számításokat igénylő tesztnek az ismertetésére azonban nem térhetünk ki.

A (33) új kvantumfeltétel tehát kiállta a tűzpróbát és megnyitotta a fizika történetének egy új, példátlanul sikeres korszakát.

Folytatás

Az akkor 24 éves Heisenberg néhány nap alatt megírta korszakalkotó tanulmányát és elküldte barátjának *Wolfgang Pauli*nak, kritikus véleményét kérve. Pauli igen lelkesen reagált. A *Kinematikai és mechanikai összefüggések új kvantumelméleti értelmezéséről* címet viselő tanulmány a *Zeitschrift für Physik*ben jelent meg (*33* (1925) 879), beérkezett 1925. július 25-én bejegyzéssel. Göttingenbe visszatérve Heisenberg ismertette eredményeit Bornnal, aki a (30) szorzási szabályból rögtön felismerte, hogy Heisenberg $x(n, l)$ típusú mennyiségei a lineáris algebrából ismert mátrixok. Born és Jordan *A kvantummechanikáról I* című munkájukban (*Z. Physik 34* (1925) 838) megjelenik (x helyett q-val) a (34) csererereláció, mint általános kvantálási szabály. Born, Heisenberg és Jordan ezt követő terjedelmes tanulmányában (A kvantummechanikáról II, *Z. Physik 35* (1926) 557) és *Paul Dirac* egy néhány héttel korábban megjelent munkájában (A kvantummechanika alapvető egyenletei, *Proc. Roy. Soc. A 109* (1925) 642) már kibontakozik az operátorformalizmus szinte teljes fegyvertára. 1926-ban Schrödinger megalkotja a hullámmechanikát és Born megadja a hullámfüggvény statisztikus értelmezését. Schrödinger és Dirac kimutatják a mátrixmechanika és a hullámmechanika ekvivalenciáját. Az egyesített kvantummechanikát *Neumann János* helyezi szilárd matematikai alapokra 1927-ben.

A kvantummechanika két eredeti megfogalmazása, matematikai ekvivalenciájuk dacára nagyon különböző jellemvonásokkal rendelkezik. Míg például a mátrixmechanika központi fogalma a fizikai mennyiség, addig a hullámmechanika fogalmi centrumában a fizikai állapot áll. A kvantummechanika oktatásában és gyakorlati alkalmazásában a körülményesebb mátrixmechanika a hullámmechanikával szemben messzemenően a háttérbe szorult. Heisenberg útjának, a kvantummechanikának a félklasszikus atomdinamikából való induktív származtatásának ma már jóformán csak tudománytörténeti jelentősége van. *A kvantumelmélet fizikai alapelvei* című könyvében (1930) már Heisenberg sem a félklasszikus elméletből indul ki, hanem az általa felállított határozatlansági relációk (1927) felől vezet be a kvantummechanikába. A lipcsei iskola (Heisenberg, *F. Hund*) egyenlő figyelmet szentel a klasszikus részecskekép és a klasszikus hullámkép (első) kvantálásának. A félklasszikus atomdinamika, jóllehet időnként még alkalmazást nyer (kristályelektronok erős mágneses térben, kvantumkáosz) főleg csak egy sokszor megcsodált kiállítási tárgy a fizika képzeletbeli iparművészeti múzeumában.

✧

Hálás köszönettel tartozom *Polónyi János*nak sok jó tanácsért és segítségért.

Irodalom

Heisenberg úttörő cikkének és az ezt követő legfontosabb publikációknak *Györgyi Gézá*tól származó igen gondos magyar fordítása megtalálható a *Magyar Fizikai Folyóirat* XV. Kötetének 5. füzetében (Cikkgyűjtemény, Klasszikus Sorozat X, Kvantummechanika, Bp., 1967).

Sokat merítettem F. Hund következő műveiből: *Theoretische Physik, Bd. III* (Stuttgart, 1956), *Geschichte der Quantentheorie* (Mannheim, 1984) és *Das Naturbild der Physik* (Jülich, 1975), valamint *B.L. van der Waerden* bevezető tanulmányából az általa szerkesztett *Sources of Quantum Mechanics* (New York, 1968) című kiadványhoz, továbbá *W.A. Fedak* et al., *Am. J. Phys. 70* (2002) 332. és *I.J.R. Aichison* et al., *Am. J. Phys. 72* (2004) 1370 cikkeiből.

Alapművek: M. Jammer: *Conceptual Development of Quantum Mechanics.* New York, 1966, J. Mehra, H. Rechenberg: *The Historical Development of Quantum Mechanics.* 5 kötet, New York, 2001.

Emlékezések, életrajzok: Heisenberg: *A rész és az egész.* Bp., 1974, M. Born: *My Life and my Views.* New York, 1968, németül München, 1975, Heisenbergről: D.C. Cassidy: *Uncertainty.* New York, 1992, Kramersről: M. Dresden, H.A. Kramers: *Between Tradition and Revolution.* New York, 1987, Pauliról: Ch.P. Enz: *No Time to be Brief.* Oxford, 2001.