

## **Archiv von Heisenbergs Briefen**

von: Werner Heisenberg

an: Pauli

Datum: 18.09.1925

Stichworte: Matrixformalismus der neuen Quantenmechanik nach Born, Jordan. Störungstheorie

Ursprung: Pauli Archiv in Genf

Kennzeichen im Pauli Archiv in Genf: heisenberg\_0017-020r

Meyenn-Nummer: 98

Veröffentlichung mit freundlicher Genehmigung der Familie Heisenberg und des Pauli-Archivs in Genf.

Copyright (c) Heisenberg-Gesellschaft e. V., München, VR 204617, 2016

Reproduktion (auch auszugsweise) nur mit Erlaubnis der Rechteinhaber.

Kopenhagen 18.9.25.

NACHLASS  
PROF. W. PAULI

PLC 0017,020 r

Lieber Pauli! Vielen Dank für Ihre interessanter Brief, mit  
Ihren Spekulationen bin ich im allgemeinen völlig einverstan-  
den, ausgenommen Ihre Vorliebe für das Wasserstoff à la ~~Landé~~  
Landé! Ich gebe durchaus zu, dass gegen Ihre Auffassung nicht  
die geringsten Argumente vorliegen, andererseits aber scheint  
mir auch kein Argument entscheidend für diese Auffassung  
zu sprechen; denn wenn man schon, wie ich, glaubt, dass wir  
keine Theorie vom Wasserstoff, auch nicht von der Salin-  
serie haben, so weiss man zunächst nicht, was der Ausschluss  
des ersten oder anderer Niveaus oder ähnliche Dinge bedeu-  
ten; aber ich gebe zu, dass einige formale Gründe für Ihre  
These sprechen. Denn man Ihre These annimmt, es folgen  
sicherlich mit Ihre weiteren Schlüsse konsequent.

Ihre Summenregel beim Wasserstoffatom ist natürlich  
richtig; an die Bedenke glaubt selbst hier wohl niemand mehr.  
Besonders missverständen war ich mit Ihren Bemerkungen  
über Helium. Auch ich bin überzeugt der Überzeugung, dass  
man das Helium <sup>wird</sup> rechnen können, sobald man eine Theorie  
vom Wasserstoff hat. Wie Sie sich erinnern, schick ich mal,  
dass man die Heliumterme mit ~~offener~~ Polariserbarkeit  
~~ungefähr~~ <sup>näherungsweise</sup> darstellen kann; diese Polariserbarkeit ist unge-  
fähr 4 mal so gross, wie die klassische (für  $He^+$  gerechnet). Am  
wächst mir hinzu, dass man die quanten theoretische  
Polariserbarkeit <sup>näherungsweise</sup> darstellen kann, indem man annimmt,

den tot in der Kramerschen Dispersionsformel das  
 der Resonanzlinien entsprechende erste Glied die Haupt-  
 rolle spielt. Dann folgt aus der Kramerschen Formel  
 eine Polarisierbarkeit, die wir klirch ziemlich genau den  
 richtigen (d. h. 4 mal den Kramerschen) Wert hat. -

Sie mit z. T. sehr am Herzen liegende Quantenmechanik-  
 medien hat inzwischen, hauptsächlich durch Born u.  
 Jordan, entscheidene Fortschritte gemacht, die ich Ihnen,  
 schon um selbst mit klar zu werden, was ich glauben soll,  
 im Folgenden erzählen werde. Man kann tatsächlich jetzt  
 ziemlich allgemein Energieernte, Frequenzbedingungen und  
 Dispersionsformel auf Grund der demütigen Annahmen  
 beweisen.

1.) Annahmen: Unter einer Größe  $\psi$  (deutsch geschrieben,  
 damit es vornehmlich aus sieht) versteht man die Gesamt-  
 heit von Größen der Form  $\psi_{ik} = e^{2\pi i \nu_{ik} t}$ ; für die  $\nu_{ik}$   
 werden die Kombinationsrelationen als erfüllt angesehen.

$$(1) \quad \nu_{ik} + \nu_{kl} = \nu_{il} \text{ oder } \nu_{ik} = \frac{W_i - W_k}{h}, \text{ wobei}$$

aber natürlich nicht vorausgesetzt wird, dass  $W$  die  
 Energie sei. (Über Ihre Wünsche betr. der begrenzung der  
 Quantenbedingungen und Annahme von  $W_i = H_i$  siehe später).

Als Produkt wird definiert  

$$r \cdot b = c \text{ bedeutet: } c_{ik} = \sum_e a_{ie} b_{ek}$$

diese Produktbildung ist distributiv und genügt der  
 Relation  $r(b \cdot c) = (r \cdot b) \cdot c$ ; sie ist aber nicht kommutativ  
 (siehe Comans-Holbert, S. 4).

Die Energie habe zunächst die Form  $\mathcal{H}(y, \dot{y}) = \mathcal{H}_a(y) + \mathcal{H}_b(\dot{y})$ ,  
 ausserdem sei sie nach Potenzen von  $y$  und  $\dot{y}$  entwickelbar;  
 (negative <sup>Exponenten</sup> Potenzen sind noch ungelassen).

$$(2) \quad \mathcal{H}_a = \sum_s a_s y^s; \quad \mathcal{H}_b = \sum_s b_s \dot{y}^s.$$

2.) Die Bewegungsgleichungen lauten:

$$(3) \quad \begin{cases} \ddot{y} = -\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial y} = -\sum_s s \cdot b_s \dot{y}^{s-1} \\ \dot{y} = \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial \dot{y}} = +\sum_s s a_s y^{s-1} \end{cases}$$

(Hierbei ist unter  $s$  die Gesamtheit  $i, k, a, b$  verstanden)

3.) Nun kommt gleich die in dieser Hinsicht entschei-  
 dende Quantenbedingung u. es ver eine sehr geschickte  
 Idee von Born, dass er sie in der Form schreib:

$$(4) \quad y \dot{y} - \dot{y} y = \frac{h}{2\pi i} \cdot \nu$$

( $\nu$  sei die „Einheitsdeterminante“, d. h.  $\nu_{ii} = 1, \nu_{ik} = 0, \nu_{ki} = 0$ )

Was zunächst die periodischen Glieder von (4) betrifft, so  
 folgt aus den Bewegungsgleichungen leicht, dass sie  
 Null sind:

$$\frac{d}{dt} (y \dot{y} - \dot{y} y) = \underbrace{\dot{y} \dot{y}}_0 - \underbrace{\dot{y} \dot{y}}_0 + y \ddot{y} - \dot{y} \ddot{y} = 0.$$

Für das konstante Glied von (4) findet man durch  
 Einsetzen der Fourierkoeffizienten leicht, dass es der  
 Kuhn'schen Formel entspricht.

Wir nehmen also (4) als richtig an, denn folgen (durch  
 geeignete Multiplikation mit  $y, \dot{y}$  u. Addition) die weiteren  
 wichtigen Relationen:

$$(5) \quad \left. \begin{cases} y^s \dot{y} - \dot{y} y^s = s \frac{h}{2\pi i} y^{s-1} \\ \dot{y} y^s - y^s \dot{y} = s \frac{h}{2\pi i} y^{s-1} \end{cases} \right\} \begin{array}{l} \text{für alle Exponenten } s. \\ \text{was für alle} \end{array}$$

Denkt man sich nun eine Größe  $\mathcal{H}$ , die definiert ist durch  $\mathcal{H}_{ik} = \begin{cases} \mathcal{H}_i & i=k \\ 0 & i \neq k \end{cases}$ , so sieht man, dass man

(6)  $y$  bzw.  $\mathcal{H}$  ersetzen kann durch  $\frac{2\pi i}{h}(\mathcal{H}y - y\mathcal{H})$  bzw.  $\frac{2\pi i}{h}(\mathcal{H}y - y\mathcal{H})$ .  
(Überhaupt treten in diesem Zusammenhang stets solche schiefe-symmetrische Bildungen an Stelle von Differentialquotienten).

Nun folgt erstens aus (3) und (6):

$$(7) \begin{cases} \mathcal{H}y - y\mathcal{H} = \frac{h}{2\pi i} \sum_s s a_s y^{s-1} \\ \mathcal{H}y - y\mathcal{H} = -\frac{h}{2\pi i} \sum_s s b_s y^{s-1} \end{cases}$$

Ferner folgt aus (5):

$$(8) \begin{cases} \mathcal{H}y - y\mathcal{H} = \frac{h}{2\pi i} \sum_s s a_s y^{s-1} \\ \mathcal{H}y - y\mathcal{H} = -\frac{h}{2\pi i} \sum_s s b_s y^{s-1} \end{cases}$$

Bildet man jetzt  $\mathcal{H} - \mathcal{H} = \mathcal{H}$ , so wird aus (7) u. (8)

$$(9) \begin{cases} y\mathcal{H} = \mathcal{H}y; \quad y\mathcal{H} = \mathcal{H}y, \text{ daraus} \\ y^s \mathcal{H} = \mathcal{H}y^s; \quad y^s \mathcal{H} = \mathcal{H}y^s; \text{ also auch} \\ \mathcal{H}y = \mathcal{H}y \text{ oder } \mathcal{H}y = \mathcal{H}y, \text{ dies letztere} \end{cases}$$

(10) bedeutet  $\mathcal{H}' = 0$ .  $\mathcal{H}_{ik} = 0$  für  $i \neq k$ ; setzt man  $\mathcal{H}_{ii} = \mathcal{H}_i$ ,

so folgt aus (7) und (8)

$$\mathcal{H}y - y\mathcal{H} = \mathcal{H}y - y\mathcal{H} \text{ oder } (\mathcal{H}_i - \mathcal{H}_k) y_{ik} = (\mathcal{H}_i - \mathcal{H}_k) y_{ik} \text{ oder}$$

$$(11) \quad \frac{\mathcal{H}_i - \mathcal{H}_k}{h} = r_{ik}$$

Bis hierher stammt der ganze Beweis von Born u. Jordan.

4.) Störungstheorie. Wir denken uns die Energiefunktion entwickelt nach  $\lambda$ :

$$(12) \quad \mathcal{H} = \mathcal{H}_0 + \lambda \mathcal{H}_1 + \lambda^2 \mathcal{H}_2 + \dots$$

wobei wieder  $\mathcal{H}_i = \mathcal{H}_{i,a}(y) + \mathcal{H}_{i,b}(y)$ .

Gesucht  $y_2 = y_0 + \lambda y_1 + \lambda^2 y_2 + \dots$

$$(13) \quad y = y_0 + \lambda y_1 + \lambda^2 y_2 + \dots$$

$$z_1 = z_0 + \lambda z_1 + \lambda^2 z_2 + \dots$$

(umgekehrt, wie vorher) auch

Aus (11) folgt, dass die Bewegungsgleichungen immer dann

gellen, wenn die Quantenbedingungen (4) erfüllt sind.

Ich setze also jetzt  $y, z$  in einer solchen Form an, dass die Bedingung (4) erfüllt ist und von selbst erfüllt ist und

somit nachträglich die in diese Form eingehende unbekannte Funktion  $\mathcal{S}$  zu bestimmen, dass  $\mathcal{H}$  die Energie  $\mathcal{H} = \text{const.}$

$\mathcal{S}$  entspricht (bis auf einen Faktor  $\frac{h}{2\pi i}$ ) dem kanonischen  $\mathcal{S}$  der kanonischen Transformation; überhaupt bekannt ist hier jede Transformation eine „kanonische“, die  $y, z - y, z$  in sich überführt:  $y, z - y, z = y', z' - y', z'$ .

Der Ansatz, der dies eine solche Transformation liefert,

heißt:

$$\mathcal{S} = \lambda \mathcal{S}_1 + \lambda^2 \mathcal{S}_2 + \dots$$

$$(44) \quad y = y_0 + \lambda (\mathcal{S}_1 y_0 - y_0 \mathcal{S}_1) + \lambda^2 \left( \frac{1}{2} (\mathcal{S}_1^2 y_0 - 2 \mathcal{S}_1 y_0 \mathcal{S}_1 + y_0 \mathcal{S}_1^2) + \mathcal{S}_2 y_0 - y_0 \mathcal{S}_2 \right) + \lambda^3 \dots$$

$$y = y_0 + \lambda (\mathcal{S}_1 y_0 - y_0 \mathcal{S}_1) + \lambda^2 \left( \frac{1}{2} (\mathcal{S}_1^2 y_0 - 2 \mathcal{S}_1 y_0 \mathcal{S}_1 + y_0 \mathcal{S}_1^2) + \mathcal{S}_2 y_0 - y_0 \mathcal{S}_2 \right) + \lambda^3 \dots$$

Das Bildungsgesetz der  $\psi_i$  bzw.  $\phi_i$  werden Sie wohl sofort erkennen,  
 es handelt sich stets um iterierte Bildungen der Form  
 $\partial \psi - \psi \partial$ .

gl. (14) haben, wie man leicht ausrechnet, zur Folge, dass auch  
 für jede beliebige Funktion  $F(\psi)$  gilt

$$(15) \quad F(\psi) = F(\psi_0) + \lambda (\partial_1 F - F \partial_1) + \lambda^2 \left( \frac{1}{2} (\partial_1^2 F - 2 \partial_1 F \partial_1 + F \partial_1^2) + \partial_1 F \partial_1 \right) + \lambda^3 \dots$$

und entsprechend für  $\phi$ .

Aus (15) folgt denn auch für  $\psi$ :

$$\psi = \psi(\psi_0, \psi_0) + \lambda (\partial_1 \psi - \psi \partial_1) + \lambda^2 \left( \frac{1}{2} (\partial_1^2 \psi - 2 \partial_1 \psi \partial_1 + \psi \partial_1^2) + \partial_1 \psi \partial_1 \right) + \lambda^3 \dots$$

Wird jetzt in die Entwicklung (12) ein, und setzt  $k=4$ , so  
 folgt nach dem berühmten Born-Pauli oder Dirac:

$$(16) \quad \left\{ \begin{aligned} \psi_0 &= \mathcal{M}_0 \\ \partial_1 \mathcal{M}_0 - \mathcal{M}_0 \partial_1 + \psi_1 &= \mathcal{M}_1 \\ \partial_2 \mathcal{M}_0 - \mathcal{M}_0 \partial_2 + \frac{1}{2} (\partial_1^2 \psi_0 - 2 \partial_1 \psi_0 \partial_1 + \psi_0 \partial_1^2) + \partial_1 \psi_1 - \psi_1 \partial_1 + \psi_2 &= \mathcal{M}_2 \\ &\dots \end{aligned} \right.$$

Die Integration geht so vor sich, dass man zuerst die  
 Mittelwerte bildet, z. B.  $\overline{\psi_1} = \mathcal{M}_1$ , dann den Rest durch  
 Fourierreihen integriert. In der Tat bedeutet ja  $\partial_1 \mathcal{M}_0 - \mathcal{M}_0 \partial_1$   
 stets nur  $-\hbar \frac{\partial}{\partial x} \mathcal{M}_0 + \mathcal{M}_0 \frac{\partial}{\partial x}$ . Also kann man stets  $\partial_1, \partial_2$  u. s. w.  
 successiv bestimmen. Hängt  $\psi$  explizit von der Zeit ab,

so kommt, wie klassisch, auf der linken Seite von (16) noch  
 ein  $-\frac{\hbar}{2\pi i} \frac{\partial \mathcal{M}_1}{\partial x}, -\frac{\hbar}{2\pi i} \frac{\partial \mathcal{M}_2}{\partial x}$  u. s. w. hinzu, was die Integration

denn allgemein möglich macht.

Die Gleichungen (14) u. (16) enthalten sowohl die Kramersche Dispersionsformel, als auch die Bornsche Formel für die Energie  $\epsilon_2$  und die von Kramers u. mir aufgestellte Formel.

Ich glaube, das ist alles, was man zunächst verlangen kann. Allerdings fehlt noch das wichtige, nämlich die wirkliche Integration im Fall des Wasserstoffs, d.h. also der Fall mehrerer Freiheitsgrade u. ähnliches. Allgemein aber hat sich nach dem Gelingen der obigen Beweise doch sehr grosses Interesse an dieser Theorie gefasst.

Viele Grüsse aus dieser Hamburger Institut; ob wir im November durch Hamburg kommen, scheint beides z. Z. fraglich; wir wir werden ja sehr. Also schreiben Sie mal bald wieder u. viele Grüsse!

v. Heisenberg.

P.S. Beim Durchlesen finde ich ein „siehe später“, wo in Wirklichkeit nichts mehr kommt. Ich weiss nicht, ob die Annahme der Frequenzbedingung genügt, um (4) zu beweisen; ist sehr wahrscheinlich keine Möglichkeit. Aber es scheint mir die Formel (4) doch auch nicht so schlecht, besonders, da sie durchaus nicht nur für „periodische“, sondern auch für kontinuierliche u. aperiodische Vorgänge gilt. In Wirklichkeit ist nichts von dem, was ich geschrieben hat, abhängig von der Voraussetzung, dass es diskrete Zustände gibt. Deshalb ist (4) gar keine „Quanten-“

bedingung" in dem Sinn, dass sie aus einer kontinuierlichen Mannigfaltigkeit von Lösungen diskrete aussondert, und sonderlich sie ist ein Grundgesetz dieser Mechanik, und erst durch die Lösung selbst entscheidet es sich, ob man diskrete oder kontinuierliche Zustände hat, in Allgemein kommt wohl, wie bei Wasserstoff, jedes nienander vor. -

Klassisch:  $S(q, P)$   $p = \frac{\partial S}{\partial q}$   
 $q = \frac{\partial S}{\partial P}$

$$p = -\frac{2\pi}{h} (SP_p - P_p S)$$

$$q_p = \frac{2\pi i}{h} (S^p q - q_p S)$$

$$S^p q_p = S^p q_p S$$

$$P_p P_p - P_p P_p = \left(\frac{2\pi i}{h}\right)^2 (SP_p SP_p - SP_p P_p S - P_p S SP_p + P_p S P_p S - SP_p SP_p - SP_p P_p S)$$

