Beweis des Adiabatensatzes.

Von **M. Born** und **V. Fock** in Göttingen.

(Eingegangen am 1. August 1928.)

Der Adiabatensatz in der neuen Quantenmechanik wird für den Fall des Punktspektrums in mathematisch strenger Weise bewiesen, wobei er sich auch bei einer vorübergehenden Entartung des mechanischen Systems als gültig erweist.

In der alten Quantenmechanik besagte der von Ehrenfest aufgestellte Adiabatensatz, daß die gequantelten Wirkungsvariablen $J = nh$ gegenüber einer unendlich langsamen (adiabatischen) Änderung des mechanischen Systems invariant sind*. Daraus konnte man folgern, daß, falls das System vor der adiabatischen Änderung in einem durch bestimmte Quantenzahlen charakterisierten Zustand sich befand, sein Zustand nach der Änderung durch dieselben Quantenzahlen charakterisiert ist.

Analoges besagt der Adiabatensatz auch in der neuen Quantenmechanik. Numeriert man die Zustände eines Systems mit den Nummern der entsprechenden Energieniveaus, so behauptet der Adiabatensatz, daß, falls das System sich anfangs in einem Zustand mit einer bestimmten Nummer befand, bei einer adiabatischen Änderung die Wahrscheinlichkeit des Übergangs des Systems in einen Zustand mit einer anderen Nummer unendlich klein ist, trotzdem die Energieniveaus nach der Änderung sich von ihren Anfangswerten um endliche Größen unterscheiden können.

Der Adiabatensatz ist in die neue Quantenmechanik von einem der Verfasser** bereits im Jahre 1926 übertragen worden. Jedoch ist sowohl der ursprüngliche als auch der von Fermi und Persico*** gegebene Beweis mathematisch nicht einwandfrei. Beide Beweise beziehen sich nur auf den Fall, wo während der adiabatischen Änderung keine der Frequenzen verschwindet, d. h. keine Entartung eintritt. Es fehlte also die Verallgemeinerung, welche der von Laue**** für die alte Quantenmechanik entspräche.

* Die Literatur über den Adiabatensatz in der alten Quantenmechanik ist im Literaturverzeichnis am Ende dieser Arbeit angegeben.

** M. Born, Das Adiabatenprinzip in der Quantenmechanik, ZS. f. Phys. **40**, 167, 1926.

*** E. Fermi und F. Persico, Il prinzipio delle adiabatiche e la nozione de forza vivo nella nuova meccanica ondulatoria. Lincei Rend. (6) **4**, 452—457, 1926.

**** M. v. Laue, Ann. d. Phys. **76**, 619, 1925.

In dieser Arbeit wird versucht, einen in mathematischer Hinsicht befriedigenderen und allgemeineren Beweis dieses Satzes zu geben.

§ 1. Wir betrachten ein mechanisches System, dessen Energieoperator H die Zeit explizite enthält und mit der Zeit langsam veränderlich ist. Die Langsamkeit der Veränderung bringen wir dadurch zum Ausdruck, daß wir die Abhängigkeit von der Zeit in der Form

$$H = H(s); \quad s = \frac{t}{T} \tag{1}$$

ansetzen, wo T ein großer Parameter von der Dimension der Zeit ist und die Ableitungen nach s der Koeffizienten im Operator H und seiner Eigenfunktionen endlich bleiben sollen.

Die Eigenfunktionen des Operators $H(s)$ seien

$$\varphi_1(q, s), \quad \varphi_2(q, s), \ldots$$

Sie genügen also der Gleichung

$$H(s)\,\varphi_n(q, s) = W_n(s)\,\varphi_n(q, s). \tag{2}$$

Da in dieser Gleichung auch die Zeit (als Parameter) auftritt, können die willkürlichen Phasenfaktoren der Eigenfunktionen die Zeit enthalten. Wir wollen diese Phasenfaktoren durch die Forderung* festlegen, daß jede der Eigenfunktionen zu ihrer Ableitung nach der Zeit t (und also auch nach dem Parameter s) orthogonal ist

$$\int \varphi_n^*(q, s)\,\frac{\partial \varphi_n}{\partial s}\,\varrho(q)\,dq = 0 \tag{3}$$

[$\varrho(q)$ Dichtefunktion im q-Raum]. Dann sind die Eigenfunktionen bis auf konstante Phasenfaktoren bestimmt.

Neben den Eigenfunktionen des Energieoperators betrachten wir ein System von Funktionen

$$\psi_1(q, t), \quad \psi_2(q, t), \ldots,$$

die der Schrödingerschen Gleichung

$$H\psi_n + \frac{h}{2\pi i}\,\frac{\partial \psi_n}{\partial t} = 0 \tag{4}$$

genügen und für $t = 0$ mit den φ_n zusammenfallen:

$$\psi_n(q, 0) = \varphi_n(q, 0). \tag{5}$$

Das Funktionensystem $\psi_n(q, t)$ ist für alle t vollständig, normiert und orthogonal*.

* V. Fock, Über die Beziehung zwischen den Integralen der quantenmechanischen Bewegungsgleichungen und der Schrödingerschen Wellengleichung. Anhang, ZS. f. Phys. **49**. 323, 1928.

§ 2. Wir gehen nun von den Eigenfunktionen zu den Matrizen über. Die Matrizen können wir mit Hilfe eines jeden der drei eingeführten vollständigen Funktionensysteme

$$\psi_n(q, 0) = \varphi_n(q, 0) \tag{a}$$

oder

$$\varphi_n(q, s) \tag{b}$$

oder

$$\psi_n(q, t) \tag{c}$$

darstellen. Den mit Hilfe von (a) dargestellten Matrizen fügen wir oben den Index ^{0} an, den mit (b) dargestellten den Index ^{s} und die mit (c) dargestellten schreiben wir ohne Index. Z. B. schreiben wir

$$H^0_{mn} = \int \varphi^*_m(q, 0)\, H(0)\, \varphi_n(q, 0)\, \varrho\, d\, q, \tag{6 a}$$

$$W_n \delta_{nm} = H^s_{mn} = \int \varphi^*_m(q, s)\, H(s)\, \varphi_n(q, s)\, \varrho\, d\, q, \tag{6 b}$$

$$H_{mn} = \int \psi^*_m(q, t)\, H(s)\, \psi_n(q, t)\, \varrho\, d\, q. \tag{6 c}$$

Die Darstellung (a) charakterisiert sich dadurch, daß konstante (zeitfreie) Operatoren durch konstante Matrizen ausgedrückt werden, die Darstellung (b) dadurch, daß die Energiematrix die Diagonalform hat, und die Darstellung (c) dadurch, daß die Bewegungsgleichungen gelten:

$$\left.\begin{aligned} \dot{q} &= \frac{2\pi i}{h}(H q - q H), \\ \dot{p} &= \frac{2\pi i}{h}(H p - p H). \end{aligned}\right\} \tag{7}$$

Der Übergang von der einen Darstellung zur anderen wird bekanntlich durch unitäre Matrizen geleistet, die wir hier mit U, V und Y bezeichnen wollen. (Bezeichnet man, wie üblich, mit U^+ die „transponiert-konjugierte“ oder „adjungierte“ Matrix, d. h.

$$U^+_{mn} = U^*_{nm},$$

so ist die Matrix U unitär, wenn sie den Gleichungen

$$U U^+ = 1; \quad U^+ U = 1$$

genügt.) Die Matrizendarstellungen H^0, W und H des Operators H sind also durch die Relationen

$$H = U^+ H^0 U, \tag{8 a c}$$

$$W = V^+ H^0 V, \tag{8 a b}$$

$$H = Y^+ W Y \tag{8 b c}$$

verbunden. Die Matrix Y drückt sich durch U und V wie folgt aus:

$$Y = V^+ U. \tag{9}$$

Diese Relationen sind an Hand der expliziten Ausdrücke für die Matrixelemente

$$\left.\begin{aligned} U_{mn} &= \int \varphi_m^*(q,0)\,\psi_n(q,t)\,\varrho\,d\,q, \\ V_{mn} &= \int \varphi_m^*(q,0)\,\varphi_n(q,s)\,\varrho\,d\,q, \\ Y_{mn} &= \int \varphi_m^*(q,s)\,\psi_n(q,t)\,\varrho\,d\,q \end{aligned}\right\} \tag{10}$$

leicht zu verifizieren.

§ 3. Wie von einem der Verfasser* angegeben wurde, haben die Matrixelemente Y_{mn} die folgende physikalische Bedeutung. Das Absolutquadrat $|Y_{mn}|^2$ ist die Wahrscheinlichkeit dafür, daß das mechanische System, welches zur Zeit $t = 0$ im Zustand n sich befand [d. h. das Energieniveau $W_n(0)$ hatte], zur Zeit t im Zustand m ist [d. h. das Energieniveau $W_m(t/T)$ besitzt]. Diese Bedeutung der Größe $|Y_{mn}|^2$ folgt, wie von dem anderen Verfasser** neulich gezeigt wurde, auch aus der Diracschen statistischen Gleichung, wenn man annimmt, daß die Gesamtheit aus einem einzigen System besteht Der Adiabatensatz behauptet nun, daß bei einer unendlich langsamen Änderung des Systems, d. h. bei einem unendlich großen Wert des Parameters T der Formel (1), die Übergangswahrscheinlichkeit $|Y_{mn}|^2$ $(m \neq n)$ (die eine Funktion der Zeit ist) auch für endliche Werte von $s = \frac{t}{T}$ unendlich klein bleibt.

Diese Behauptung wollen wir unter einigen einschränkenden Bedingungen beweisen, indem wir die Differentialgleichungen untersuchen, denen die Größe Y_{mn} genügt.

§ 4. Zunächst wollen wir die Differentialgleichung für die Transformationsmatrix U aufstellen.

Die Matrizen q und p genügen den Bewegungsgleichungen

$$\left.\begin{aligned} \dot{q} &= \frac{2\pi i}{h}(Hq - qH), \\ \dot{p} &= \frac{2\pi i}{h}(Hp - pH), \end{aligned}\right\} \tag{7}$$

und die konstanten Matrizen q^0 und p^0 sind mit den q und p durch die Relationen

$$\left.\begin{aligned} q &= U^+ q^0\, U, \\ p &= U^+ p^0\, U \end{aligned}\right\} \tag{11}$$

* M. Born, Das Adiabatenprinzip in der Quantenmechanik, ZS. f. Phys. **40**, 167, 1926.

** V. Fock, Verallgemeinerung und Lösung der Diracschen statistischen Gleichung, ZS. f. Phys. **49**, 339, 1928.

verknüpft; die Relation zwischen den Darstellungen H und H^0 des Energieoperators ist

$$H = U^+ H^0 U. \tag{12}$$

Wir benutzen die Ausdrücke für q, p und H durch q^0, p^0 und H^0 und berechnen die Ableitungen $\dot{q}$ und $\dot{p}$.

$$\begin{aligned} \dot{q} &= \dot{U}^+ q^0 U + U^+ q^0 \dot{U}, \\ \dot{p} &= \dot{U}^+ p^0 U + U^+ p^0 \dot{U}. \end{aligned}$$

Nun ist aber wegen $U^+ U = 1$

$$\dot{U}^+ = - U^+ \dot{U} U^+$$

und folglich

$$\left.\begin{aligned} \dot{q} &= U^+ \{- \dot{U} U^+ q^0 + q^0 \dot{U} U^+\} U, \\ p &= U^+ \{- \dot{U} U^+ p^0 + p^0 \dot{U} U^+\} U. \end{aligned}\right\} \tag{13}$$

Andererseits ist wegen der Bewegungsgleichungen

$$\left.\begin{aligned} \dot{q} &= \frac{2\pi i}{h} U^+ \{H^0 q^0 - q^0 H^0\} U, \\ \dot{p} &= \frac{2\pi i}{h} U^+ \{H^0 p^0 - p^0 H^0\} U. \end{aligned}\right\} \tag{14}$$

Bezeichnen wir mit K^0 die hermitesche Matrix

$$K^0 = H^0 + \frac{h}{2\pi i} \dot{U} U^+, \tag{15}$$

und vergleichen wir die Ausdrücke (13) und (14), so erhalten wir die Gleichungen

$$\left.\begin{aligned} K^0 q^0 - q^0 K^0 &= 0, \\ K^0 p^0 - p^0 K^0 &= 0. \end{aligned}\right\} \tag{16}$$

Die Matrix K^0 ist also mit q^0 und p^0 vertauschbar. Sie muß also, wenn die q^0 und p^0 ein irreduzibles System von Matrizen bilden, ein Multiplum der Einheitsmatrix sein, und wir können sie einfach gleich Null setzen. Wir erhalten dann für die Transformationsmatrix U die Gleichung

$$\frac{h}{2\pi i} \dot{U} + H^0 U = 0, \tag{17}$$

welches nichts anderes als die Schrödingergleichung in der Matrizendarstellung ist.

Wären die Matrizen q^0 und p^0 nicht, wie bisher vorausgesetzt, konstant, so würden sie den Bewegungsgleichungen

$$\left.\begin{aligned} \dot{q}^0 &= \frac{2\pi i}{h} (K^0 q^0 - q^0 K^0), \\ \dot{p}^0 &= \frac{2\pi i}{h} (K^0 p^0 - p^0 K^0) \end{aligned}\right\} \tag{18}$$

mit der „Hamiltonschen Matrix“ K^0 genügen. Die Betrachtungen dieses Paragraphen enthalten also die Theorie der allgemeinen (zeitabhängigen) kanonischen Transformation der quantenmechanischen Bewegungsgleichungen.

§ 5. Aus der Differentialgleichung (17) für die Matrix U läßt sich leicht diejenige für die Matrix Y ableiten. Wir haben

$$Y = V^+ U$$

und

$$\dot{Y} = V^+ \dot{U} + \dot{V}^+ U. \tag{19}$$

Wenn wir nun in (17) H^0 mit Hilfe von (8 a b) durch die Diagonalmatrix W ausdrücken, erhalten wir

$$\frac{h}{2\pi i} \dot{U} + V W V^+ U = 0,$$

oder

$$\dot{U} = -\frac{2\pi i}{h} V W Y. \tag{20}$$

Andererseits ist

$$U = V Y. \tag{21}$$

Setzt man die Ausdrücke (20) und (21) für $\dot{U}$ und U in (19) ein, so bekommt man

$$\dot{Y} = -\frac{2\pi i}{h} W Y + \dot{V}^+ V Y \tag{22}$$

— die gesuchte Differentialgleichung.

Die Punkte bedeuten hier (wie überall) Ableitungen nach der Zeit. Wir wollen jetzt aber statt der Zeit die Größe $s = \frac{t}{T}$ der Formel (1) einführen:

$$\frac{dY}{ds} = -\frac{2\pi i T}{h} W Y + \frac{d V^+}{ds} V Y. \tag{22'}$$

Ferner setzen wir:

$$Q = -i \frac{d V^+}{ds} V = i V^+ \frac{dV}{ds}. \tag{23}$$

Da die Transformationsmatrix V unitär ist, ist die soeben eingeführte Matrix Q hermitisch. Ihre Elemente drücken sich durch die Eigenfunktionen des Energieoperators wie folgt aus:

$$Q_{mn} = i \int \varphi_m^* (q, s) \frac{\partial \varphi_n (q, s)}{\partial s} \varrho \, dq. \tag{24}$$

Wir bemerken, daß wegen der Normierung (3) der Eigenfunktionen $\varphi_n (q, s)$ alle Diagonalelemente der Matrix Q verschwinden.

Wir wollen hier einen anderen Ausdruck für die Elemente von Q ableiten. Differenziert man die Gleichung (8ab) nach dem Parameter s, so bekommt man

$$\frac{dW}{ds} = \frac{dV^+}{ds} H^0 V + V^+ H^0 \frac{dV}{ds} + V^+ \frac{dH^0}{ds} V. \tag{25}$$

Der Ausdruck $V^+ \frac{dH^0}{ds} V$ ist die Matrix (in dem Matrizenschema, wo die Energiematrix Diagonalform hat) für die Ableitung des Energieoperators nach s; wir wollen diesen Ausdruck kürzer mit H' bezeichnen:

$$H' = V^+ \frac{dH^0}{ds} V. \tag{26}$$

Nun folgt aus (8ab):

$$H^0 V = V W; \quad V^+ H^0 = W V^+. \tag{27}$$

Setzt man (27) in (25) ein und berücksichtigt man die Definitionsgleichungen (23) und (26) für Q und H', so bekommt man

$$\frac{dW}{ds} = i(QW - WQ) + H'. \tag{28}$$

Wir betrachten ein außerhalb der Diagonale stehendes Element der Matrix (28). Da W eine Diagonalmatrix ist, folgt aus (28) für $m \neq n$:

$$i\, Q_{mn}(W_n - W_m) + H'_{mn} = 0$$

oder

$$Q_{mn} = -\frac{i\, H'_{mn}}{W_m - W_n}, \tag{29}$$

wo H'_{mn} die Bedeutung

$$H'_{mn} = \int \varphi_m^* \frac{\partial H}{\partial s} \varphi_n\, \varrho\, dq \tag{30}$$

hat. Für $m = n$ ist, wie wir bereits festgestellt haben, $Q_{nn} = 0$.

Es sei hier bemerkt, daß Q_{mn} auch in dem Falle endlich bleibt, wenn für einen speziellen Wert von s die Differenz $W_m(s) - W_n(s)$ verschwindet; das folgt aus dem Ausdruck (24) für Q_{mn}.

Wir kehren nun zur Differentialgleichung (22') für die Matrix Y zurück, die wir jetzt in der Form

$$\frac{dY}{ds} = -\frac{2\pi i T}{h} W Y + i\, Q Y \tag{31}$$

schreiben. Gehen wir von den Matrizen zu ihren Elementen über, so bekommen wir das Gleichungssystem

$$\frac{dY_{mn}}{ds} = -\frac{2\pi i T}{h} W_m Y_{mn} + i \sum_k Q_{mk} Y_{kn}. \tag{32}$$

Wir betrachten daneben das Gleichungssystem*

$$\frac{d y_m}{d s} = -\frac{2 \pi i T}{h} W_m y_m + i \sum_k Q_{m k} y_k. \tag{33}$$

Beachten wir, daß wegen (5) und (10) die Matrix Y für $t = 0$, $s = 0$ eine Einheitsmatrix wird, so können wir die Matrixelemente einer Spalte

$$Y_{1 n} Y_{2 n} \ldots Y_{m n} \ldots$$

als diejenige Lösung

$$y_1 y_2 \ldots y_m$$

des Gleichungssystems (33) auffassen, welche den Anfangsbedingungen

$$y_m = Y_{m n} = \delta_{m n} \quad \text{für} \quad s = 0 \tag{34}$$

genügt. Durch die Differentialgleichungen (33) und die Anfangsbedingungen (34) sind die Größen y_m eindeutig definiert.

§ 6. Wir wollen jetzt ein Verfahren zur Lösung der Gleichungen (33) andeuten.

Wir setzen zur Abkürzung

$$\omega_k(s) = \frac{2 \pi}{h} \int_0^s W_k(s)\, d s \tag{35}$$

und führen in (33) statt der y_k neue Variablen

$$c_k = y_k e^{i T \omega_k} \tag{36}$$

ein. Die Größen c_k befriedigen die Differentialgleichungen

$$\frac{d c_m}{d s} = i \sum_k P_{m k} c_k, \tag{37}$$

wo zur Abkürzung

$$P_{m k} = Q_{m k} e^{i T (\omega_m - \omega_k)} \tag{38}$$

gesetzt ist. Der Unterschied der neuen Gleichungen (37) von den ursprünglichen (33) ist nun der, daß erstens der Koeffizient von c_m gleich Null ist, während der Koeffizient von y_m proportional dem großen Parameter T war, und zweitens, daß die $P_{m k}$ wegen des mit T behafteten Exponentialfaktors schnell oszillieren, während die $Q_{m k}$ langsam veränderliche Größen waren.

Wir bezeichnen mit $c_{m n}(s)$ diejenigen Lösungen von (37), die den Anfangsbedingungen

$$c_{m n}(0) = \delta_{m n} \tag{39}$$

genügen, d. h. die Größen

$$c_{m n}(s) = Y_{m n} e^{i T \omega_m}. \tag{40}$$

* Vgl. V. Fock, Verallgemeinerung und Lösung usw., Formeln (18) und (19) sowie Satz 1.

Ihre Absolutquadrate sind gleich denjenigen der Y_{mn}; es sind also Übergangswahrscheinlichkeiten.

Wie man sich leicht überzeugt, sind die Differentialgleichungen (37) mit den Anfangsbedingungen (39) dem System von Integralgleichungen

$$c_{mn}(s) = \delta_{mn} + i \sum_k \int_0^s P_{mk}(\sigma)\, c_{kn}(\sigma)\, d\sigma \tag{41}$$

äquivalent. Diese Integralgleichungen kann man nun nach der Methode der sukzessiven Näherungen auflösen. Als nullte Näherung hat man dabei

$$c_{mn}^{(0)} = \delta_{mn}$$

zu setzen, als erste Näherung das Resultat der Substitution der nullten Näherung in die rechte Seite von (41), d. h.

$$c_{mn}^{(1)} = \delta_{mn} + i \int_0^s P_{mn}(\sigma)\, d\sigma,$$

und allgemein

$$c_{mn}^{(l)} = \delta_{mn} + i \sum_k \int_0^s P_{mk}(\sigma)\, c_{kn}^{(l-1)}(\sigma)\, d\sigma. \tag{42}$$

Als Schlußresultat bekommt man die unendliche Reihe

$$c_{mn}(s) = \delta_{mn} + \sum_{k=1}^{\infty} i^k \int_0^s d s_k \int_0^{s_k} d s_{k-1} \cdots \int_0^{s_2} d s_1 \cdot \left\{ P(s_k)\, P(s_{k-1}) \ldots P(s_1) \right\}_{mn}. \tag{43}$$

Bisher haben wir von Konvergenzbetrachtungen abgesehen. Um die Konvergenz des Verfahrens zu sichern, müssen wir eine Voraussetzung über die Beschaffenheit der Matrix $P(s)$ einführen. Wir wollen voraussetzen, daß die Matrix $P(s)$ für alle s absolut beschränkt* ist und eine konstante beschränkte Matrix M als Majorante zuläßt:

$$|P_{mn}(s)| = |Q_{mn}(s)| \leqq M_{mn}; \qquad (M_{mn}) \text{ beschränkt.} \tag{44}$$

---

* Eine Matrix (P_{mn}) heißt beschränkt, wenn für alle Wertsysteme x_n, y_n, die der Gleichung

$$\sum_n |x_n|^2 = 1; \qquad \sum_n |y_n|^2 = 1$$

genügen, die Doppelsumme

$$\sum_{mn} P_{mn}\, x_m\, y_n$$

konvergiert und absolut unterhalb einer von der speziellen Wahl der $x_n\, y_n$ unabhängigen Schranke liegt. Eine Matrix heißt absolut beschränkt, wenn die aus den Absolutwerten ihrer Elemente gebildete Matrix beschränkt ist.

Dann besitzt* das majorante Gleichungssystem

$$\frac{d\,b_{m\,n}}{d\,s} = \sum_k M_{m\,k}\, b_{k\,n} \tag{45}$$

eine den Anfangsbedingungen

$$b_{m\,n}(0) = \delta_{m\,n}$$

genügende Lösung:

$$b_{m\,n}(s) = (e^{sM})_{m\,n} = \delta_{m\,n} + \sum_{k=1}^{\infty} \frac{s^k}{k!} (M^k)_{m\,n}, \tag{46}$$

die eine beständig konvergente Potenzreihe in s darstellt.

Man überzeugt sich leicht, indem man in (43) $P_{m\,n}$ durch $M_{m\,n}$ ersetzt, daß der absolute Betrag jedes Gliedes der Reihe (43) nicht größer als das entsprechende Glied der Reihe (46) ist. Daraus erhellt sofort, daß die Bedingungen (44) für die Konvergenz der Reihe (43) hinreichend sind.

Ob die Matrix $Q_{m\,n}$ in einem bestimmten Problem wirklich absolut beschränkt ist, läßt sich in einigen Fällen mit Hilfe der folgenden (hinreichenden) Kriterien beurteilen. Nach einem Satze von Schur** ist es sicher der Fall, wenn die Reihe

$$z_m = \sum_k |Q_{m\,k}| \tag{47}$$

konvergiert und unterhalb einer von m unabhängigen Schranke liegt. Nach der Formel (29) für $Q_{m\,n}$ ist diese Summe gleich

$$z_m = \sum_k{}' \frac{|H'_{m\,k}|}{|W_m - W_k|}, \tag{48}$$

wo der Strich am Summenzeichen andeutet, daß das Glied mit $k = m$ fortzulassen ist.

Nehmen wir nun an, daß die Reihe

$$\alpha_m = \sum_k{}' \frac{1}{(W_m - W_k)^2} \tag{49}$$

konvergiert, und bezeichnen wir mit β_m den Ausdruck

$$\beta_m = \sum_k |H'_{m\,k}|^2 = \int \left| \frac{\partial H}{\partial s}\, \varphi_m \right|^2 \varrho\, d\,q, \tag{50}$$

so können wir die Summe z_m mit Hilfe der Schwarzschen Ungleichung abschätzen:

$$z_m \leqslant \sqrt{\alpha_m\, \beta_m}. \tag{51}$$

* W. L. Hart, Amer. Journ. **39**, 407—424, 1917.

** J. Schur, Beschränkte Bilinearformen, Crelles Journ. **140**, 1, 1911 (Satz 1).

Somit erhalten wir die folgende hinreichende Bedingung für die absolute Beschränktheit der Matrix Q: das Produkt $\alpha_m \beta_m$ soll für alle m unterhalb einer von m unabhängigen Schranke A liegen:

$$\alpha_m \beta_m \leqq A. \tag{52}$$

Wenn die Eigenwerte W_n (wie im Falle eines harmonischen Oszillators) proportional n wachsen, so konvergiert die Reihe (49), und ihre Summe α_m bleibt kleiner als eine von m unabhängige Zahl. Dann genügt für die absolute Beschränktheit der Matrix Q die Endlichkeit des Ausdrucks β_m (50), was immer der Fall sein wird, wenn die Ableitung der Störungsenergie nach der Zeit eine beschränkte Funktion ist.

Wenn das mechanische System in eine Hülle eingeschlossen ist, so daß der q-Raum endlich ist, so wachsen die Eigenwerte W_n (für einen Freiheitsgrad) proportional n^2. Dann nehmen die Größen α_m wie $\frac{1}{m^2}$ ab, und es genügt, vorauszusetzen, daß die Größen β_m nicht schneller als proportional m^2 wachsen, was bei sehr allgemeinen Voraussetzungen über die Störungsenergie zutrifft.

§ 7. Wir kommen nun zu unserem eigentlichen Problem — Beweis des Adiabatensatzes. Wir müssen folgendes beweisen: Falls der Parameter T [Formeln (1), (27), (32) und (34)] genügend groß ist, unterscheiden sich die Absolutquadrate $|Y_{mn}|^2 = |c_{mn}|^2$ für endliche s beliebig wenig von ihren Anfangswerten δ_{mn}. Die genauen Bedingungen, unter denen der Satz gilt, wollen wir erst später endgültig formulieren.

Zunächst stellen wir den folgenden Hilfssatz auf:

Hilfssatz. Es seien die folgenden Voraussetzungen in einem endlichen Intervall $0 \leqq s \leqq s'$ erfüllt.

1. Es gilt die Ungleichung

$$|Q_{mn}(s)| = |P_{mn}(s)| \leqq M_{mn}.$$

2. Jede Funktion (Frequenz)

$$\frac{d\,\omega_m}{d\,s} - \frac{d\,\omega_n}{d\,s} = 2\,\pi\,\nu_{mn}(s)$$

besitzt im Intervall höchstens N_1 Nullstellen von höchstens r-ter Ordnung (Entartungszustände des mechanischen Systems), und in der Nähe jeder Nullstelle s_0 gilt die Abschätzung

$$\frac{1}{|2\,\pi\,\nu_{mn}(s)|} < \frac{A}{|s - s_0|^r}.$$

3. Der reelle und der imaginäre Teil der Funktion

$$\frac{Q_{mn}(s)}{\omega'_{mn}(s)}$$

sind stückweise monoton; die Anzahl der Strecken, wo sie monoton sind, sei höchstens gleich N_2.

Dann gilt die Abschätzung

$$\left|\int_0^{s'} P_{mn}(s)\,ds\right| = \left|\int_0^{s'} Q_{mn}(s)\,e^{i\,T(\omega_m-\omega_n)}\,ds\right| < 4\,M_{mn}(N_1+N_2)\sqrt[r+1]{\frac{4A}{T}}. \quad (53)$$

Den Beweis des Hilfssatzes geben wir im Anhang an.

Mit Hilfe des Hilfssatzes läßt sich nun auch der Adiabatensatz leicht beweisen.

Wir führen im k-ten Glied der Reihe (43) die erste Integration (nach s_1) aus und schätzen das Resultat mit Hilfe der Formel (53) ab*.

Die übrigen Integrationen führen wir aus, indem wir P_{mn} durch M_{mn} ersetzen. Wir erhalten dann:

$$\begin{aligned} |c_{mn}-\delta_{mn}| &< 4\,(N_1+N_2)\sqrt[r+1]{\frac{4A}{T}}\cdot\sum_{k=1}^{\infty}\frac{s^{k-1}}{(k-1)!}(M^k)_{mn} \\ &= 4\,(N_1+N_2)\sqrt[r+1]{\frac{4A}{T}}\,\frac{d\,b_{mn}}{d\,s}, \end{aligned} \quad (54)$$

wo $\frac{d\,b_{mn}}{d\,s}$ die Ableitung der Lösung (46) der Hilfsgleichungen (45) ist. Diese Größe bleibt ebenso wie der Faktor der Wurzel in (54) für endliche s endlich, die Wurzel strebt aber für unendliche T gegen Null.

Wir haben somit den folgenden mathematischen Satz bewiesen:

Ist die Matrix Q absolut beschränkt, und sind die Voraussetzungen des Hilfssatzes erfüllt, so ist die Differenz $c_{mn}-\delta_{mn}$ für endliche s und unendlich große T von der Ordnung $T^{-\frac{1}{r+1}}$:

$$c_{mn} = \delta_{mn} + O\left(T^{-\frac{1}{r+1}}\right)^{**} \quad (55)$$

Diese Differenz strebt also für unendlich wachsende T gegen Null.

---

* Man beachte, daß $Q_{nn} = 0$ ist.

** Die Schreibweise $x = O(\alpha)$ bedeutet: x ist von der Größenordnung α.

Aus diesem Satze folgt nun unmittelbar, daß die Wahrscheinlichkeit des Übergangs $n \rightarrow m$ auf ein anderes Energieniveau von der Größenordnung $T^{-\frac{2}{r+1}}$ ist:

$$|Y_{mn}|^2 = |c_{mn}|^2 = O\left(T^{-\frac{2}{r+1}}\right), \tag{56}$$

also z. B. von der Ordnung $\frac{1}{T^2}$, wenn keine der Frequenzen ν_{mn} während der adiabatischen Änderung verschwindet.

Für die Wahrscheinlichkeit $|Y_{mm}|^2$ dafür, daß das System in dem ursprünglichen Zustand m bleibt, erhalten wir mit Hilfe der Relation

$$\sum_n |Y_{mn}|^2 = 1$$

den Ausdruck

$$|Y_{mm}|^2 = 1 - \sum_n{}' |Y_{mn}|^2 = 1 - O\left(T^{-\frac{2}{r+1}}\right). \tag{57}$$

Diese Wahrscheinlichkeit unterscheidet sich also von der Einheit ebenfalls um Größen von der Ordnung $T^{-\frac{9}{r+1}}$.

Bisher haben wir als Anfangszustand immer einen „scharfen" Zustand betrachtet, d. h. einen solchen, wo das System ein bestimmtes Energieniveau W_n mit der Wahrscheinlichkeit Eins und die übrigen mit der Wahrscheinlichkeit Null hat. Sind dagegen zur Zeit $t = 0$ alle Energieniveaus W_n mit den Wahrscheinlichkeiten $|b_n|^2$ vertreten, so können wir die Wahrscheinlichkeiten $|b'_m|^2$ verschiedener Niveaus zur Zeit t nach der Formel

$$b'_m = \sum_n c_{mn} b_n \tag{58}$$

berechnen. Nach (55) erhalten wir

$$b'_m = b_m + O\left(T^{-\frac{1}{r+1}}\right) \tag{59}$$

und folglich

$$\left.\begin{aligned} |b'_m|^2 &= |b_m|^2 + O\left(T^{-\frac{1}{r+1}}\right) \quad &\text{wenn} \quad b_m \neq 0, \\ |b'_m|^2 &= O\left(T^{-\frac{2}{r+1}}\right) \quad &\text{wenn} \quad b_m = 0. \end{aligned}\right\} \tag{60}$$

Die Abweichung der Wahrscheinlichkeit $|b'_m|^2$ des Zustands m von ihrem Anfangswert $|b_m|^2$ ist also von verschiedener Größenordnung, je nachdem dieser Anfangswert gleich oder nicht gleich Null ist, und zwar ist im ersteren Falle die Abweichung im allgemeinen* kleiner, d. h. von höherer Ordnung in $1/T$.

---

* Vgl. dagegen die Formel (57).

Zum Schlusse sei noch bemerkt, daß der Adiabatensatz auch in Fällen gelten kann, für die er hier nicht bewiesen ist. Als Beispiel für seine Gültigkeit im Falle wo die Matrix Q nicht beschränkt und das Lösungsverfahren des § 6 nicht anwendbar ist, kann der von einem der Verfasser behandelte* gestörte harmonische Oszillator dienen.

Vermutlich bleibt der Adiabatensatz im wesentlichen auch dann gültig, wenn neben dem Punktspektrum auch ein Streckenspektrum vorhanden ist.

Anhang.

Beweis des Hilfssatzes in § 7. Um das Integral

$$\int_0^{s'} Q_{mn}(s)\, e^{iT(\omega_m - \omega_n)}\, ds$$

abzuschätzen, bezeichnen wir abkürzend den reellen (oder den imaginären) Teil der Funktion $Q_{mn}(s)$ mit $f(s)$ und die Differenz $\omega_m(s) - \omega_n(s)$ mit $g(s)$ und betrachten das Integral

$$J = \int_0^{s'} f(s)\, e^{iTg(s)}\, ds.$$

Wir teilen das Integrationsintervall $(0, s')$ in zwei Gruppen, E_1 und E_2, von Teilintervallen, nämlich erstens (E_1) die Umgebungen

$$\alpha_k - \varepsilon < s < \alpha_k + \varepsilon$$

der Nullstellen α_k der Ableitung $g'(s)$ und zweitens (E_2) den übrigen Teil von $(0, s')$.

Das Integral über E_1

$$J_1 = \int_{E_1} f(s)\, e^{iTg(s)}\, ds$$

genügt offenbar der Ungleichung

$$|J_1| < M \int_{E_1} ds = 2\, M N_1\, \varepsilon,$$

wo N_1 die Anzahl der Nullstellen α_k von $g'(s)$ und M das Maximum des absoluten Betrages von $f(s)$ ist.

Das Integral über E_2 schreiben wir in der Form

$$J_2 = \int_{E_2} \frac{f(s)}{g'(s)}\, e^{iTg(s)}\, g'(s)\, ds.$$

---

* V. Fock, Über die Beziehung usw. Hier wird die Störungsenergie für $x \to \infty$ wie x^2 unendlich.

In E_2 ist $\frac{1}{g'(s)}$ endlich, und zwar kann man wegen der in der Nähe der Nullstellen gültigen Abschätzungen

$$\frac{1}{|g'(s)|} < \frac{A}{\varepsilon^r}$$

annehmen.

Indem wir den zweiten Mittelwertsatz der Integralrechnung

$$\int_\alpha^\beta \varphi(s)\,\psi(s)\,ds = \varphi(\alpha)\int_\alpha^\sigma \psi(s)\,ds + \varphi(\beta)\int_\sigma^\beta \psi(s)\,ds,$$

$$\alpha \leqq \sigma \leqq \beta$$

mit

$$\varphi(s) = \frac{f(s)}{g'(s)}$$

und

$$\psi(s) = g'(s)\cos[T\,g(s)]$$

oder

$$\psi(s) = g'(s)\sin[T\,g(s)]$$

auf jedes der N_2 Teilintervalle anwenden, wo $\frac{f(s)}{g'(s)}$ monoton ist, gelangen wir wegen

$$\frac{f(s)}{g'(s)} < \frac{MA}{\varepsilon^r}$$

und

$$\left|\int_{\sigma_1}^{\sigma_2} g'(s) \begin{matrix}\sin\\ \cos\end{matrix} [T\,g(s)]\,ds\right| = \left|\int_{g_1}^{g_2} \begin{matrix}\sin\\ \cos\end{matrix} [T\,g]\,dg\right| < \frac{2}{T}$$

zur Ungleichung

$$|J_2| < \frac{8\,M\,A}{\varepsilon^r\,T} N_2.$$

Zusammen mit der Ungleichung für das erste Integral ergibt das

$$|J| < 2\,M\,N_1\,\varepsilon + \frac{8\,M\,A\,N_2}{\varepsilon^r\,T}.$$

Die Wahl von ε blieb bisher willkürlich (nur daß es klein sein sollte). Wählen wir nun

$$\varepsilon = \left(\frac{4\,A}{T}\right)^{\frac{1}{r+1}},$$

so erhalten wir die gewünschte Abschätzung

$$|J| < 2\,M(N_1 + N_2)\sqrt[r+1]{\frac{4\,A}{T}}.$$

Der imaginäre Teil von $Q_{mn}(s)$ kann einfach durch Multiplikation der Abschätzung mit 2 berücksichtigt werden. Somit ist die Formel (53) bewiesen.

Verzeichnis der Literatur über den Adiabatensatz in der alten Quantenmechanik.

1. P. Ehrenfest, Adiabatische Invarianten u. Quantentheorie, Ann. d. Phys. **51**, 327, 1916.

2. J. M. Burgers, Die adiabatischen Invarianten bedingt periodischer Systeme, ebenda **52**, 195, 1917; ferner: Verslagen Amsterdam **25**, 25, 918 u. 1055, 1917.

3. G. Krutkow, Contribution to the theory of adiabatic invariants, Proceedings Akad. Amsterdam **21**, 1112, 1919; ferner: On the determination of quanta conditions by means of adiabatic invariants, ebenda **23**, 826, 1920.

4. P. Ehrenfest, Adiabatische Transformationen in der Quantentheorie und ihre Behandlung durch Niels Bohr, Naturwissensch. **11**, 543, 1923.

5. V. Fock, Conditionally periodic systems with commensurabilities and their adiabatic invariants, Transactions of the Optical Institute in Petrograd. Berlin 1923.

6. G. Krutkow und V. Fock, Über das Rayleighsche Pendel, ZS. f. Phys. **13**, 195, 1923.

7. H. Kneser, Die adiabatische Invarianz des Phasenintegrals bei einem Freiheitsgrad, Math. Ann. **91**, 155, 1924.

8. M. v. Laue, Zum Prinzip der mechanischen Transformierbarkeit (Adiabatenhypothese), Ann. d. Phys. **76**, 619, 1925.

9. P. A. M. Dirac, The Adiabatic Invariance of the Quantum Integrals, Proc. Roy. Soc. (A) **107**, 725, 1925; ferner: The adiabatic hypothesis for magnetic fields, Proc. Cambridge Philos. Soc. **23**, 69, 1925.

10. A. M. Mosharrafa, On the Quantum Dynamics of Degenerate Systems, Proc. Roy. Soc. (A) **107**, 237, 1925.