

Über eine neue Begründung der Quantenmechanik.

Von P. Jordan in Göttingen.

(Eingegangen am 18. Dezember 1926.)

Die vier bisher entwickelten Formen der Quantenmechanik: die Matrizentheorie, die Theorie von Born und Wiener, die Wellenmechanik und die Theorie der q -Zahlen, sind als Spezialfälle enthalten in einer allgemeineren formalen Theorie. Im Anschluß an einen Gedanken von Pauli kann diese neue Theorie auf einige einfache Grundpostulate statistischer Natur gegründet werden ¹⁾.

I. Teil.

§ 1. *Einleitung.* Nach Schrödinger ist einer Hamiltonschen Funktion $H(p, q)$ eine Schwingungsgleichung

$$\left\{ H\left(\varepsilon \frac{\partial}{\partial y}, y\right) - W \right\} \varphi(y) = 0, \quad \varepsilon = \frac{h}{2\pi i} \quad (1)$$

zuzuordnen. Sie steht in Korrespondenz zur klassischen Hamilton-Jacobischen Gleichung, was besonders anschaulich wird, wenn man statt φ die Größe

$$S = \varepsilon \ln \varphi \quad (2)$$

einführt; man erhält dann aus (1) die Gleichung

$$\left\{ H\left(\frac{\partial S}{\partial y} + \varepsilon \frac{\partial}{\partial y}, y\right) - W \right\} \cdot 1 = 0 \quad (3)$$

(eingeklammelter Operator angewandt auf die Zahl 1 gibt Null), die für $h \rightarrow 0$ in die Hamilton-Jacobische Gleichung übergeht.

Für die Durchführung der Theorie muß vorausgesetzt werden, daß (1) eine selbstadjungierte Gleichung ist. Dies möchte zunächst für eine sehr spezielle Bedingung angesehen werden; die folgenden Betrachtungen lassen jedoch erkennen, daß sie vollkommen übereinstimmt mit der wohlbekannten in der Matrizentheorie (bzw. ihren Verallgemeinerungen) auftretenden Bedingung dafür, daß die Energiefunktion $H(p, q)$ „hermitisch“ oder „reell“ ist.

¹⁾ Die formalen Ergebnisse der folgenden Arbeit sind zum Teil auch von Herrn F. London aufgefunden und in einer Arbeit, die nach Abschluß meines Manuskripts erschien, in sehr klarer und durchsichtiger Form dargestellt. Es schien jedoch in Rücksicht auf den Zusammenhang des Ganzen untunlich, nachträglich Kürzungen einiger Stellen vorzunehmen. — (Zusatz bei der Korrektur). Im wesentlichen dieselben Tatsachen, die in dieser Arbeit erläutert sind, finden sich, von einer etwas anderen Seite aus betrachtet, in einer im Erscheinen begriffenen Arbeit von Herrn P. A. M. Dirac.

Ich habe mir die folgende Frage vorgelegt: Statt der p, q mögen durch eine kanonische Transformation neue Veränderliche P, Q eingeführt werden, wobei $H(p, q) = \bar{H}(P, Q)$ werden möge. Dann wollen wir mit \bar{H} die neue Wellengleichung

$$\left\{ \bar{H} \left(\varepsilon \frac{\partial}{\partial x}, x \right) - W \right\} \psi(x) = 0 \quad (4)$$

bilden. Wir erhalten so zu jeder kanonischen Transformation ein besonderes $\psi(x)$. Wie verhalten sich diese $\psi(x)$ zu der ursprünglichen Funktion $\varphi(y)$? Die Beantwortung dieser Frage wird sich aus den späteren Betrachtungen ergeben.

Ihre Untersuchung führte zur Feststellung sehr allgemeiner formaler Zusammenhänge in den quantenmechanischen Gesetzen, welche die in den bisherigen Formulierungen niedergelegten formalen Tatsachen als spezielle Fälle in sich enthalten. Dabei ergab sich auch eine engere Verbindung zwischen den verschiedenen bislang entwickelten Darstellungen der Theorie. Bekanntlich ist die Quantenmechanik in vier verschiedenen, selbständigen Formen entwickelt worden; außer der ursprünglichen Matrizen­theorie liegen vor die Theorie von Born und Wiener, die Wellenmechanik und die Theorie der q -Zahlen. Die Beziehungen der letzteren drei Formulierungen zur Matrizen­theorie sind bekannt; jede Formulierung führt zu den gleichen Endformeln wie die Matrizen­theorie, soweit diese selber reicht. Dabei standen jedoch die drei späteren Formulierungen untereinander ohne eigentliche innere Verbindung da; es fehlte sogar der allgemeine Beweis, daß sie auch dort, wo sie über die Matrizen­theorie hinausgehen, zu äquivalenten Ergebnissen führen.

Die in dieser Arbeit dargestellte Theorie enthält alle vier Formulierungen in sich als sehr spezielle Fälle und stellt ihre inneren Wechselbeziehungen klar. Wir beziehen uns der Einfachheit halber bei allen Erörterungen auf Systeme von nur einem Freiheitsgrad. Die vorzuführenden Betrachtungen können jedoch sofort auf Systeme von beliebig vielen Freiheitsgraden verallgemeinert werden.

Die gewonnenen Einsichten in die formalen Zusammenhänge der Theorie ermöglichten auch die quantitative Fassung und Weiterentwicklung einer von Pauli stammenden Idee, durch welche der eigentliche physikalische Sinn der quantenmechanischen Gesetze in ein neues Licht gerückt wird. Im engen Anschluß an den Paulischen Gedanken soll hier versucht werden, die quantenmechanischen Gesetze als Folgerungen

einiger einfacher statistischer Annahmen zu begründen. Pauli hat im Anschluß an Überlegungen von Born¹⁾ folgende physikalische Deutung der Schrödingerschen Eigenfunktionen vorgeschlagen²⁾: Ist $\varphi_n(q)$ normiert, so gibt

$$|\varphi_n(q)|^2 dq \quad (5)$$

die Wahrscheinlichkeit an, daß, wenn das System sich im Zustand n befindet, die Koordinate q einen Wert im Intervall $q, q + dq$ besitzt. Diese Deutung ist eng verwandt mit Borns Deutung der Lösung $\sum_n c_n(t) \varphi_n(q)$ der vom Parameter W befreiten Schrödingergleichung; Born nimmt an, daß

$$|c_n(t)|^2 \quad (6)$$

die Wahrscheinlichkeit sei, daß zur gegebenen Zeit t das System im n -ten Zustand ist. Beide Deutungen sind physikalisch so unmittelbar einleuchtend und naturgemäß, daß eine ausführlichere Erläuterung überflüssig scheint. Sie sind auch beide enthalten in der allgemeinen statistischen Deutung der Quantenmechanik, die wir im folgenden entwickeln.

Pauli hat folgende Verallgemeinerung ins Auge gefaßt: Es seien q, β zwei hermitesche quantenmechanische Größen, die wir hier der Bequemlichkeit halber beide als stetig veränderlich annehmen wollen: dann wird es stets eine Funktion $\varphi(q, \beta)$ geben, derart, daß

$$|\varphi(q_0, \beta_0)|^2 dq \quad (7)$$

die (relative) Wahrscheinlichkeit mißt, daß bei gegebenem Zahlwert β_0 von β die Größe q einen Zahlwert im Intervall $q_0, q_0 + dq$ besitzt. Die Funktion $\varphi(q, \beta)$ wird von Pauli als Wahrscheinlichkeitsamplitude bezeichnet. Man wird dabei erwarten müssen:

Postulat I: Die Funktion $\varphi(q, \beta)$ ist unabhängig von der mechanischen Natur (der Hamiltonfunktion) des Systems und nur durch die kinematische Beziehung zwischen q und β bestimmt.

Postulat II: Ist $\psi(Q_0, q_0)$ die Wahrscheinlichkeitsamplitude für einen Zahlwert Q_0 von Q bei vorgegebenem $q = q_0$, so wird die Amplitude $\Phi(Q_0, \beta_0)$ für ein gewisses Q_0 bei vorgegebenem β_0 gleich

$$\Phi(Q_0, \beta_0) = \int \psi(Q_0, q) \varphi(q, \beta) dq, \quad (8)$$

wobei die Integration über den ganzen Wertebereich von q zu erstrecken ist.

¹⁾ M. Born, ZS. f. Phys. **38**, 803, 1926; **40**, 167, 1926.

²⁾ W. Pauli. Anmerkung in einer im Druck befindlichen Arbeit über Gasentartung.

Der Umstand, daß sonach nicht die Wahrscheinlichkeiten selbst, sondern ihre Amplituden dem gewöhnlichen Kombinationsgesetz der Wahrscheinlichkeitsrechnung folgen, kann passend als Interferenz der Wahrscheinlichkeiten bezeichnet werden ¹⁾.

§ 2. *Statistische Begründung der Quantenmechanik.* Eine quantenmechanische Größe q betrachten wir als eine Zahl, die in einer gewissen Punktmenge der komplexen Ebene veränderlich ist. Diese Punktmenge kann aus Kurvenstücken und diskreten Punkten bestehen. Wir stellen uns im folgenden zur Vereinfachung der Ausdrucksweise vor, daß sie nur aus einer Kurve besteht, deren Bogenelement wir durch $|dq|$ bezeichnen. Die im folgenden auszuführenden Integrationen sind stets über das ganze Wertebereich von q zu erstrecken; sie wären bei genauerer Ausdrucksweise im allgemeinen noch durch Summen zu ergänzen. Wir werden nur durch gelegentliche Zwischenbemerkungen erläutern, wie die systematische Behandlung der nicht kontinuierlich variablen Größen durch eine sinngemäße Übertragung der für stetig variable Größen entwickelten Betrachtungen durchzuführen ist.

Die Multiplikation der Zahlwerte der quantenmechanischen Größen ist selbstverständlich kommutativ. Es spielt jedoch neben der gewöhnlichen Addition und Multiplikation noch eine andere Verknüpfungsweise der quantenmechanischen Größen eine wichtige Rolle, die symbolisch gleichfalls als Addition und Multiplikation bezeichnet wird, und die statt des kommutativen Gesetzes der Multiplikation den bekannten quantenmechanischen Vertauschungsregeln genügt. Wir wollen aber diese Verknüpfungsregeln nicht unter die primären Voraussetzungen der Theorie aufnehmen. In Rücksicht auf diese symbolische Addition und Multiplikation müssen wir später, da wir sie in derselben Weise bezeichnen werden wie die gewöhnliche, unterscheiden zwischen einer mechanischen Größe β (einer „ q -Zahl“) und ihrem Zahlwert β . Da wir jedoch auch diese zumeist mit demselben Buchstaben bezeichnen, so muß sehr sorgfältig auf die Bedeutung der verschiedenen Formeln geachtet werden.

¹⁾ Eine direkte Komposition der Wahrscheinlichkeiten selber anstatt ihrer Amplituden, entsprechend der gewöhnlichen Wahrscheinlichkeitsrechnung, ergibt sich in zwei Klassen von Spezialfällen, nämlich erstens bei Vorhandensein von Inkohärenzen [M. Born, ZS. f. Phys. **40**, 167, 1926; P. A. M. Dirac, Proc. Roy. Soc. (A) **112**, 661, 1926] und zweitens bei Resonanz (W. Heisenberg, ZS. f. Phys. (im Erscheinen); P. Jordan, ebenda (im Erscheinen)).

Postulat A: Zu zwei mechanischen Größen q, β , die in einem vollständig bestimmten kinematischen Verhältnis zueinander stehen, gibt es zwei Funktionen

$$\varphi(x, y), \quad \psi(x, y), \quad (9)$$

derart, daß

$$\varphi(x, y) \psi^*(x, y) dx \quad (10)$$

die absolute bzw. relative Wahrscheinlichkeit dafür ist, daß bei gegebenem $\beta = y$ der Wert von q zwischen x und $x + dx$ liegt. Die Funktion $\varphi(x, y)$ nennen wir die Amplitude der Wahrscheinlichkeit; $\psi(x, y)$ werden wir gelegentlich auch Ergänzungsamplitude nennen. Der Stern * bedeutet, daß konjugiert komplexe Funktion zu $\psi(x, y)$ für ungeänderte (nicht für konjugiert komplexe) Argumente x, y zu nehmen ist.

Postulat B: Die entsprechenden Funktionen $\bar{\varphi}(x, y), \bar{\psi}(x, y)$ für das vertauschte Paar β, q sind gegeben durch

$$\bar{\varphi}(x, y) = \psi^*(y, x), \quad \bar{\psi}(x, y) = \varphi^*(y, x). \quad (11)$$

Hiermit ist auch eine einfache Symmetrieeigenschaft der Wahrscheinlichkeiten selbst festgestellt: Die Wahrscheinlichkeit

$$w(x, y) = \varphi(x, y) \psi^*(x, y)$$

für einen Wert x von q bei gegebenem Werte y von β ist gleichzeitig auch die Wahrscheinlichkeit für den Wert y von β bei vorgegebenem Werte x von q .

Postulat C: Die Wahrscheinlichkeiten kombinieren interferierend. Seien F_1, F_2 zwei Tatsachen, für welche die Amplituden φ_1, φ_2 bestehen. Wenn F_1, F_2 sich ausschließen, ist

$$\varphi_1 + \varphi_2 \quad (12)$$

die Amplitude für die Tatsache „ F_1 oder F_2 “; wenn F_1, F_2 unabhängig sind, ist

$$\varphi_1 \varphi_2 \quad (13)$$

die Amplitude für die Tatsache „ F_1 und F_2 “.

Als erste Folgerung ergibt sich: Sei $\varphi(x, y)$ die Amplitude für einen Wert x von q bei gegebenem $\beta = y$ und $\chi(x, y)$ die Amplitude für $Q = x$ bei gegebenem $q = y$; dann ist

$$\Phi(x, y) = \int \chi(x, z) \varphi(z, y) dz \quad (14)$$

die Amplitude für $Q = x$ bei gegebenem $\beta = y$.

Darin wollen wir jetzt insbesondere $Q = \beta$ wählen. Nach Postulat B entsteht

$$\Phi(\beta', \beta'') = \int \varphi(x, \beta'') \psi^*(x, \beta') dx \quad (15)$$

als Wahrscheinlichkeit, daß β den Zahlwert β' besitzt, wenn β den Zahlwert β'' hat. Man erkennt also, daß bei richtiger Normierung die Orthogonalitätsrelation

$$\int \varphi(x, \beta'') \psi^*(x, \beta') dx = \delta_{\beta' \beta''} = \begin{cases} 1 & \text{für } \beta' = \beta'' \\ 0 & \text{für } \beta' \neq \beta'' \end{cases} \quad (16)$$

besteht¹⁾. Dies gilt unabhängig davon, ob die Größe β stetig oder diskret variabel ist. Wenn die Wertemenge von q diskrete Punkte enthält, ist das Integral in (16) durch eine Summe zu ergänzen bzw. zu ersetzen. Ganz entsprechend erhält man

$$\int \varphi(\beta'', x) \psi^*(\beta', x) dx = \delta_{\beta' \beta''}. \quad (17)$$

Definition: Wenn die Amplitude $\varrho(x, y)$ für jeden möglichen Wert x von p beim Werte y von q gleich

$$\varrho(x, y) = e^{-\frac{xy}{\varepsilon}}, \quad \varepsilon = \frac{h}{2\pi i} \quad (18)$$

ist, so bezeichnen wir p als kanonisch konjugierten Impuls zu q .

Aus den Orthogonalitätsbeziehungen folgt dann, daß auch die Ergänzungsamplitude zu $\varrho(x, y)$ gleich $e^{-\frac{xy}{\varepsilon}}$ ist. Wir erhalten deshalb den Satz:

Bei einem gegebenen Wert von q sind alle möglichen Werte von p *gleich wahrscheinlich*.

Postulat D: Zu jedem q gibt es einen konjugierten Impuls p .

Folgerungen: Die Funktion $\varrho(x, y)$ genügt den Differentialgleichungen

$$\left\{ x + \varepsilon \frac{\partial}{\partial y} \right\} \varrho(x, y) = 0. \quad (19a)$$

$$\left\{ -\varepsilon \frac{\partial}{\partial x} - y \right\} \varrho(x, y) = 0. \quad (19b)$$

Sei nun für irgend eine Größe Q die Amplitude für $Q = x$ bei $q = y$ gleich $\varphi(x, y)$ und die Amplitude für $Q = x$ bei $p = y$ gleich $\Phi(x, y)$.

Dann ist also

$$\varphi(x, y) = \int \Phi(x, z) \varrho(z, y) dz, \quad (20)$$

was wir mit dem linearen Operator

$$T = \int dx \cdot \Phi(y, x) \dots \quad (21)$$

¹⁾ Diese im Falle eines stetig veränderlichen β mathematisch nicht sehr korrekte Schreibweise mag als abgekürzter Ausdruck einer hinlänglich bekannten mathematischen Verhaltungsweise angesehen werden.

auch in der Form

$$\varphi(x, y) = T \cdot \varrho(x, y) \quad (22)$$

schreiben können. Es folgt, daß $\varphi(x, y)$ den Funktionalgleichungen

$$\left\{ -TxT^{-1} + \varepsilon \frac{\partial}{\partial y} \right\} \varphi(x, y) = 0, \quad (23a)$$

$$\left\{ T\varepsilon \frac{\partial}{\partial x} T^{-1} - y \right\} \varphi(x, y) = 0 \quad (23b)$$

genügt¹⁾.

Wir *definieren* nun eine symbolische Addition und Multiplikation der quantenmechanischen Größen. In bezug auf die fest gewählte Größe Q entspricht nämlich jeder anderen Größe q ein Operator $T\varepsilon \frac{\partial}{\partial x} T^{-1}$, der in (23b) auftritt. Die symbolische Addition und Multiplikation wird definiert durch die Addition und Multiplikation dieser Operatoren.

In dem singulären Falle $Q = q$ wird $\varphi(x, y) = 0$ außer für $x = y$; man kann auch sagen, daß $\varphi(x, y)$ eine Funktion der Differenz $x - y$ allein sei, und man erkennt danach als den dem Falle $Q = q$ entsprechenden Grenzfall der Gleichungen (23):

$$\left\{ \varepsilon \frac{\partial}{\partial x} + \varepsilon \frac{\partial}{\partial y} \right\} \varphi(x, y) = 0, \quad (24a)$$

$$\{x - y\} \varphi(x, y) = 0. \quad (24b)$$

Es ist also der Größe Q selbst zufolge (24) der Operator x zugeordnet; und man sieht ferner, daß dem Impuls P zu Q der Operator $\varepsilon \frac{\partial}{\partial x}$ entspricht. Für unsere symbolische Addition und Multiplikation gilt danach, wenn wir wieder p, q statt P, Q schreiben, die Vertauschungsregel

$$[p, q] = pq - qp = \varepsilon = \frac{h}{2\pi i}. \quad (25)$$

Die linearen Operatoren, die durch endlich oder unendlich viele Multiplikationen und Additionen aus $\varepsilon \frac{\partial}{\partial x}$ und x aufgebaut werden können, sind so allgemein, daß man überzeugt sein darf, daß jeder lineare Operator formal in diese Gestalt zu bringen ist. Das bedeutet nach unseren Feststellungen und Definitionen, daß jede mechanische Größe durch symbolische

¹⁾ Nach den Orthogonalitätsbeziehungen ist T^{-1} mit Hilfe der Ergänzungsamplitude $\mathcal{F}(x, y)$ darstellbar als $T^{-1} = \int dx \cdot \mathcal{F}^*(x, y) \dots$

Multiplikationen und Additionen aus p und q aufgebaut werden kann. Gleichzeitig können die Funktionalgleichungen (23) in Differentialgleichungen (im allgemeinen von unendlich hoher Ordnung) umgewandelt werden.

Dies ist der Inhalt der neuen Theorie. Der Rest der Arbeit wird sich damit beschäftigen, durch eine mathematische Diskussion dieser Differentialgleichungen einerseits zu beweisen, daß unsere Postulate mathematisch widerspruchsfrei sind, und andererseits die bisherigen Darstellungen der Quantenmechanik als in unserer Theorie enthalten zu erweisen.

Es mag jedoch an dieser Stelle noch hervorgehoben werden, daß die Gleichung (19a) auch dann bestehen bleibt, wenn die physikalisch möglichen Werte von y nicht stetig, sondern diskret verschieden sind. Man kann, wenn man will, an Stelle der Differentialgleichung (19a) eine Differenzgleichung einführen; die weitere Entwicklung der Theorie wird dadurch in keiner Weise abgeändert, da eine solche Differenzgleichung stets als Differentialgleichung unendlich hoher Ordnung — also wiederum ein Spezialfall des später allgemein erörterten Gleichungstyps angesehen werden kann.

II. Teil.

§ 3. *Formale Vorbereitungen. Adjungierte Größen.* Wir betrachten eine Größe $F(P, Q)$, die aus den Größen P und Q durch symbolische Multiplikationen und Additionen aufgebaut ist. Wir ordnen ihr eine zweite, mit $F^\dagger(P, Q)$ bezeichnete Größe zu, die wir die adjungierte Größe zu $F(P, Q)$ nennen; sie entsteht, indem wir in $F(P, Q)$ erstens die Reihenfolge aller Multiplikationen umkehren und zweitens jede komplexe Zahl durch ihre konjugierte ersetzen.

Es mögen P, Q der Vertauschungsregel

$$[P, Q] = PQ - QP = \varepsilon = \frac{h}{2\pi i} \quad (1)$$

genügen. Dann kann man verschiedene Darstellungen für $F(P, Q)$ angeben (z. B. $F(P, Q) = PQ$ und $F(P, Q) = QP + \varepsilon$), und zu jeder besonderen Darstellung von $F(P, Q)$ gehört zunächst eine besondere adjungierte Größe $F^\dagger(P, Q)$; doch sind alle diese $F^\dagger(P, Q)$ auf Grund von (1) wieder einander gleich. Zum Beweis dieser Behauptung genügt offenbar die Bemerkung, daß die Gleichung (1) erhalten bleibt, wenn man auf beiden Seiten zu adjungierten Größen übergeht. Für spätere Anwendungen merken wir uns die Regel $(FG)^\dagger = G^\dagger F^\dagger$.

Die Größe $F(P, Q)$ ist hermitisch oder reell, wenn $F = F^\dagger$ ist. Wir nennen sie orthogonal, wenn $FF^\dagger = 1$. Die Größe $G = F^{\dagger-1}$ mit der Eigenschaft $FG^\dagger = F^\dagger G = 1$ nennen wir die kontragrediente Größe zu F und geben ihr wegen ihrer Wichtigkeit ein besonderes Zeichen:

$$F^{\dagger-1} = \tilde{F}. \tag{2}$$

Dem Übergang zur adjungierten Größe entspricht bei Matrizen der Übergang zur transponierten, komplex konjugierten Matrix; die hermitischen, die orthogonalen und die kontragredienten Größen entsprechen hermitischen bzw. im Sinne der Theorie der Hermiteschen Formen orthogonalen oder kontragredienten Matrizen.

Wir definieren nun endlich den Prozeß \dagger für Differentialoperatoren $F\left(\varepsilon \frac{\partial}{\partial x}, x\right)$. Sei $F^\dagger(P, Q) = G(P, Q)$; dann definieren wir

$$F^\dagger\left(\varepsilon \frac{\partial}{\partial x}, x\right) = G\left(\varepsilon \frac{\partial}{\partial x}, x\right).$$

Es kann also die Bildung von $F^\dagger\left(\varepsilon \frac{\partial}{\partial x}, x\right)$ aus $F\left(\varepsilon \frac{\partial}{\partial x}, x\right)$ so beschrieben werden: Man lese alle Produkte rückwärts, gehe zu komplex konjugierten Zahlen über und ersetze $\frac{\partial}{\partial x}$ durch $-\frac{\partial}{\partial x}$. Von dem so gebildeten Differentialoperator $F^\dagger\left(\varepsilon \frac{\partial}{\partial x}, x\right)$ sieht man, daß er die folgende Eigenschaft besitzt, die auch zu seiner Definition benutzt werden kann: Ist der adjungierte Operator zu F gleich $F^\dagger = M$, so wird

$$z(x) F \cdot y(x) - y(x) M^* \cdot z(x) = \frac{d}{dx} (\dots); \tag{3}$$

darin geht M^* aus M durch Übergang zu komplex konjugierten Zahlen hervor.

Setzen wir nämlich F in die Form

$$F = \sum_n a_n(x) \left(\varepsilon \frac{\partial}{\partial x}\right)^n, \tag{4}$$

so wird (3) erfüllt durch

$$M^* = \sum_n \left(-\varepsilon \frac{\partial}{\partial x}\right)^n a_n(x), \tag{5}$$

wie man aus der Hilfsformel¹⁾

$$f^{(n)}(x)g(x) + (-1)^{n+1}f(x)g^{(n)}(x) = \frac{d}{dx}(\dots) \quad (6)$$

erkennt.

Während, wie wir gesehen haben, bei den Größen $F(P, Q)$ die Bildung $F^*(P, Q)$ nicht von der Darstellungsweise von F unabhängig, also keine eindeutig definierte Größe ist — nur der Prozeß † hat bei diesen Größen eine invariante Bedeutung —, kann man natürlich bei den Matrizen und bei den Differentialoperatoren auch den Prozeß * allein in eindeutiger Weise ausführen; ebenso kann der andere Teil des Prozesses †, die Transposition, für sich allein ausgeführt werden: Ist F entweder eine Matrix oder ein Differentialoperator, so schreiben wir

$$F^{\dagger*} = \tilde{F}. \quad (7)$$

Bei Differentialoperatoren ist der transponierte Operator \tilde{F} dasselbe wie der adjungierte in der gewöhnlichen Bezeichnungsweise. Gewöhnlich definiert man nämlich²⁾ den adjungierten Operator M zu F statt durch (3) durch

$$zFy - yMz = \frac{d}{dx}(\dots); \quad (8)$$

dann ist die Selbstadjungiertheit von F notwendige und hinreichende Bedingung dafür, daß die Differentialgleichung

$$F \cdot \varphi - W \cdot \varphi = 0 \quad (9)$$

erstens Eigenfunktionen φ_n mit der Orthogonalitätseigenschaft

$$\int \varphi_n \varphi_m dx = \delta_{nm} = \begin{cases} 1 & \text{für } n = m \\ 0 & \text{für } n \neq m \end{cases} \quad (10)$$

besitzt, und zweitens als Lagrangesche Gleichung eines Variationsproblems angesehen werden kann.

Die Selbstadjungiertheit in dem durch (3) definierten Sinne ist dagegen Bedingung dafür, daß $F \cdot \varphi - W \varphi = 0$ erstens normierte Eigenfunktionen mit der Orthogonalitätseigenschaft

$$\int \varphi_n \varphi_m^* dx = \delta_{nm} \quad (11)$$

besitzt und zweitens als Bedingung für die Stationarität des über das Grundgebiet von x erstreckten Integrals einer hermiteschen (statt quadra-

1) Es ist $fg' + f'g = (fg)'$,
 $fg'' - f''g = (fg' - f'g)'$,
 $f'g''' + f'''g = (f'g'' - f''g' + f''g)'$.

2) Vgl. Courant-Hilbert, 4. Kap., § 8.

tischen) Form von φ und den Ableitungen $\varphi_x, \varphi_{xx}, \dots$ aufgefaßt werden kann. Der Beweis dieser Behauptungen ist leicht zu erbringen.

Fordern wir nämlich, daß das Integral

$$J(\varphi, \varphi^*) = \int \sum_{kl=0}^n a_{kl}(x) \frac{d^k \varphi}{dx^k} \frac{d^l \varphi^*}{dx^l} dx \quad (12)$$

mit hermiteschen Koeffizienten

$$a_{kl}(x) = a_{lk}^*(x) \quad (13)$$

stationär sein soll, und zwar gegenüber infinitesimalen Variationen, bei denen die als zueinander konjugiert angenommenen Funktionen φ und φ^* unabhängig voneinander variiert werden, so haben wir dafür zu sorgen, daß in

$$J(\varphi + \sigma \eta, \varphi^* + \varrho \xi) = J(\varphi, \varphi^*) + \sigma \delta_1 J + \varrho \delta_2 J + \sigma \varrho \dots \quad (14)$$

bei bis auf Randbedingungen willkürlichen Funktionen $\eta(x), \xi(x)$ die beiden Variationen $\delta_1 J$ und $\delta_2 J$ Null werden.

Nun ist

$$\delta_2 J = \int \sum_{kl} a_{kl}(x) \frac{d^k \varphi}{dx^k} \frac{d^l \xi}{dx^l} dx, \quad (15)$$

und nach der Hilfsformel (3) erhält man bis auf Randwerte, die bei homogenen Randbedingungen verschwinden:

$$\delta_2 J = \int \left[\sum_{kl} (-1)^l \left(\frac{d}{dx} \right)^l a_{kl}(x) \frac{d^k \varphi}{dx^k} \right] \xi dx, \quad (16)$$

so daß wegen der Willkürlichkeit von $\xi(x)$ die Forderung $\delta_2 J = 0$ zu

$$\sum_{kl} (-1)^l \left(\frac{d}{dx} \right)^l a_{kl}(x) \left(\frac{d}{dx} \right)^k \varphi = L \cdot \varphi = 0 \quad (17)$$

führt. Aus $\delta_1 J = 0$ wird eine entsprechende Gleichung für φ^* , die jedoch gerade wegen $a_{kl} = a_{lk}^*$ mit dieser gleichbedeutend ist. Die Gleichung $L \varphi = 0$ ist nun aber in der Tat eine in unserem Sinne selbstadjungierte Gleichung:

$$y L z - z L^* y = \frac{d}{dx} (\dots), \quad (18)$$

wie man leicht erkennt.

Diese Betrachtungen können sofort auf mehrere unabhängige Veränderliche x übertragen werden. Eine Verallgemeinerung unserer den Realitätsverhältnissen der nicht-relativistischen Mechanik angepaßten Definitionen ist jedoch erforderlich, wenn man die relativistische Mechanik behandeln will. Mit den Koordinaten $x_1, x_2, x_3, x_4 = x, y, z, ict$ ergänzen wir unsere frühere Definition der Operation \dagger dadurch, daß jede

Tensorkomponente, die n -mal den Index 4 besitzt, mit $(-1)^n$ zu multiplizieren ist. (Anders ausgedrückt: der in der Definition von \dagger vorgesehene Übergang zu konjugiert komplexen Zahlen soll nicht vorgenommen werden, soweit es sich um von Natur rein imaginäre Größen handelt.)

In dem so definierten Sinne ist dann auch die relativistische quantenmechanische Wellengleichung, wie sie von Klein, Frenkel, Schrödinger, Fock und Kudar aufgestellt wurde, selbstadjungiert, was hier als ein Beispiel zu unseren Betrachtungen erwähnt werden möge:

$$\left(\varepsilon \frac{\partial}{\partial x_k} - \frac{e}{c} \Phi^k\right) \left(\varepsilon \frac{\partial}{\partial x_1^k} - \frac{e}{c} \Phi_k\right) \varphi + m^2 c^2 \varphi = 0. \quad (19)$$

Sie gehört zu einem hermiteschen Variationsproblem der oben erläuterten Art, nämlich

$$\int Q(\varphi, \varphi^\dagger) dx \rightarrow \text{stationär} \quad (20)$$

$$(dx = dx_1 dx_2 dx_3 dx_4)$$

mit¹⁾

$$Q(\varphi, \varphi^\dagger) = \frac{\hbar^2}{4\pi^2} \frac{\partial \varphi}{\partial x^k} \frac{\partial \varphi^\dagger}{\partial x_k} + \frac{e}{c} \frac{\hbar}{2\pi i} \left(\varphi \frac{\partial \varphi^\dagger}{\partial x^k} - \frac{\partial \varphi}{\partial x^k} \varphi^\dagger \right) \Phi^k$$

$$+ \left(\frac{e^2}{c^2} \Phi_k \Phi^k + m^2 c^2 \right) \varphi \varphi^\dagger. \quad (21)$$

Es liegt nahe, mit einer (reellen) Konstanten C statt dessen das Variationsproblem

$$\int \left\{ \frac{C}{4} F_{kl} F^{kl} - Q(\varphi, \varphi^\dagger) \right\} dx \rightarrow \text{stationär} \quad (22)$$

mit

$$F_{kl} = \frac{\partial \Phi_l}{\partial x^k} - \frac{\partial \Phi_k}{\partial x^l} \quad (23)$$

zu betrachten, und dieses auch zur Bestimmung der Φ_k zu benutzen. Man erhält dann als Ergänzung der quantenmechanischen Wellengleichung die Maxwell'schen Gleichungen

$$C \frac{\partial F^{kl}}{\partial x^l} = \frac{e}{c} \frac{\hbar}{2\pi i} \left(\varphi \frac{\partial \varphi^\dagger}{\partial x_k} - \frac{\partial \varphi}{\partial x_k} \varphi^\dagger \right) + 2 \frac{e^2}{c^2} \Phi^k (\varphi \varphi^\dagger) \quad (24)$$

mit einem Viererstrom

$$\delta^h = \frac{1}{C} \left\{ \frac{e}{c} \frac{\hbar}{2\pi i} \left(\varphi \frac{\partial \varphi^\dagger}{\partial x_h} - \frac{\partial \varphi}{\partial x_h} \varphi^\dagger \right) + 2 \frac{e^2}{c^2} \Phi^k (\varphi \varphi^\dagger) \right\}. \quad (25)$$

¹⁾ Hierauf wurde auch in einer soeben erschienenen Arbeit von W. Gordon. ZS. f. Phys. 40, 134, 1926, hingewiesen.

Man kann nach Klein¹⁾ und Fock²⁾ die obige Wellengleichung reell machen durch Einführung von

$$u = \varphi e^{\frac{x_0}{c}}$$

Es wird dann mit $\frac{\partial \Phi_k}{\partial x_0} = 0$:

$$\left\{ \left(\frac{\partial}{\partial x_k} - \frac{e}{c} \frac{\partial}{\partial x_0} \Phi^k \right) \left(\frac{\partial}{\partial x^h} - \frac{e}{c} \frac{\partial}{\partial x_0} \Phi_k \right) + m^2 c^2 \frac{\partial^2}{\partial x_0^2} \right\} u = 0. \quad (26)$$

Die Maxwell'schen Gleichungen verwandeln sich durch Einführung von u in:

$$C \varepsilon^{-2} \frac{\partial F^{kl}}{\partial x^l} = \frac{e}{c} \left(\frac{\partial u}{\partial x_0} \frac{\partial u^\dagger}{\partial x_k} + \frac{\partial u^\dagger}{\partial x_0} \frac{\partial u}{\partial x_h} \right) - \frac{e^2}{c^2} \Phi^k \frac{\partial u}{\partial x_0} \frac{\partial u^\dagger}{\partial x_0}. \quad (27)$$

Es scheint nun naheliegend, anzunehmen, daß die Funktion u (im Gegensatz zu φ) natürlicherweise mit der Realitätsbedingung $u = u^\dagger$ anzunehmen ist; so daß man

$$\frac{C \varepsilon^{-2} \partial F^{kl}}{2 \partial x^l} = \frac{e}{c} \frac{\partial u}{\partial x_0} \left(\frac{\partial u}{\partial x_h} - \frac{e}{c} \Phi^k \frac{\partial u}{\partial x_0} \right) \quad (28)$$

erhält. Nach diesen Zwischenbemerkungen nehmen wir unser Thema wieder auf.

§ 4. *Allgemeines über die Differentialgleichungen der Amplituden.*
 Zum Beweise der mathematischen Widerspruchslosigkeit unserer Postulate wollen wir die Theorie — unabhängig von den Betrachtungen in § 2 — erneut begründen, und zwar auf die Differentialgleichungen, die dort als Endergebnis erschienen.

Es seien also α, β kanonische Veränderliche mit der Eigenschaft $\{\alpha, \beta\} = \alpha \beta - \beta \alpha = \varepsilon = \frac{h}{2\pi i}$ und

$\alpha = f(p, q) = T p T^{-1}, \quad \beta = g(p, q) = T q T^{-1}, \quad T = T(p, q) \quad (1)$
 eine kanonische Transformation. Wir betrachten die Gleichungen

$$\left\{ f \left(\varepsilon \frac{\partial}{\partial q}, q \right) + \varepsilon \frac{\partial}{\partial \beta} \right\} \varphi(q, \beta) = 0, \quad (2a)$$

$$\left\{ g \left(\varepsilon \frac{\partial}{\partial q}, q \right) - \beta \right\} \varphi(q, \beta) = 0; \quad (2b)$$

$$\left\{ f^\dagger \left(\varepsilon \frac{\partial}{\partial q}, q \right) + \varepsilon \frac{\partial}{\partial \beta} \right\} \psi(q, \beta) = 0, \quad (3a)$$

$$\left\{ g^\dagger \left(\varepsilon \frac{\partial}{\partial q}, q \right) - \beta \right\} \psi(q, \beta) = 0. \quad (3b)$$

¹⁾ O. Klein, ZS. f. Phys. **37**, 895, 1926.

²⁾ V. Fock, ebenda **39**, 226, 1926.

Aus (2b), (3b) folgt in bekannter Weise die Orthogonalitätseigenschaft

$$\int \varphi(q, \beta') \psi^*(q, \beta'') dq = \delta_{\beta' \beta''}. \quad (4)$$

Man kann nun zwar bekanntlich im allgemeinen einer Funktion von zwei Veränderlichen nicht zwei partielle Differentialgleichungen gleichzeitig auferlegen. Wir werden aber in § 5 beweisen: Die — bereits gemachte — Voraussetzung, daß die α, β mit den p, q durch eine kanonische Transformation (1) zusammenhängen, ist notwendige und hinreichende Bedingung für die Lösbarkeit von (2) [und von (3)].

Nehmen wir in (2b) für β die Energie W , für q die Hamiltonsche Funktion $H(p, q)$ eines Systems, so erhalten wir gerade die Schrödingersche Schwingungsgleichung¹⁾, die der klassischen Hamilton-Jacobi-Gleichung entspricht. Zu (2b) tritt (2a) als zweite Gleichung. In dieser Gleichung haben wir unter f die Zeit t (als Funktion der p, q) zu verstehen.

Bekanntlich hat de Broglie bemerkt, daß die Gruppengeschwindigkeit der Phasenwellen eines freien Teilchens gerade gleich der Korpuskulargeschwindigkeit ist. Herr Flamm²⁾ hat gezeigt, daß diese Bemerkung sehr verallgemeinert werden kann. Man erhält aus der quantentheoretischen Wirkungsfunktion $S = \epsilon \ln \varphi$ die Bewegung einer engen Wellengruppe durch

$$\frac{\partial S}{\partial W} = -t, \quad (5)$$

was formal genau der klassischen Punktmechanik entspricht. Schreibt man diese Gleichung für φ statt S , so kommt

$$\epsilon \frac{\partial \varphi}{\partial W} + t \varphi = 0, \quad (6)$$

was mit (2a) äußerlich identisch ist³⁾.

Die statistische Deutung der Schrödingerschen Funktion in Verbindung mit dem früher festgestellten Symmetriegesetz der Wahrschein-

¹⁾ Entsprechend der neuerdings von Schrödinger eingeführten Bezeichnungsweise wollen wir diese Gleichung als Schwingungsgleichung von der eigentlichen Wellengleichung (mit eliminiertem W) unterscheiden.

²⁾ L. Flamm, Phys. ZS. **27**, 600, 1926.

³⁾ Jedoch ist die Schrödinger-Flamm'sche quasiklassische Deutung dieser Beziehung mit der Formulierung (2a) natürlich nicht verträglich.

lichkeiten liefert auch eine physikalische Begründung der Randbedingung, durch welche Schrödinger die Eigenwerte festlegt. Betrachten wir nämlich die zu einem „ungequantelten“ Energiewert gehörige Schrödingerfunktion, die im Unendlichen des q -Raumes unendlich wird, so sehen wir: Die relative Wahrscheinlichkeit für gewisse endliche q -Werte ist bei ungequantelter Energie unendlich klein (gegenüber der Wahrscheinlichkeit, daß die q unendlich sind). Folglich ist nach dem Symmetriegesetz umgekehrt, wenn die q unendliche Werte haben, die Wahrscheinlichkeit einer ungequantelten Energie gleich Null.

Die Schrödingersche Wellengleichung mit eliminiertem Energieparameter erhalten wir gleichfalls als Spezialfall unserer Gleichungen (2) und zwar diesmal insbesondere (2a), indem wir für β die Zeit t , für g die als Funktion der p, q dargestellte Zeit $t(p, q)$ und entsprechend für f die Hamiltonsche Funktion $H(p, q)$ wählen.

Es mag noch darauf hingewiesen werden, daß die Gleichungen (2a), (3a), allgemein eine „Kontinuitätsgleichung“ nach sich ziehen, wie sie für spezielle Fälle von Born, Schrödinger und Madelung angegeben wurde. Es ist nämlich

$$\varepsilon \frac{\partial}{\partial \beta} (\varphi \cdot \psi^*) = \varphi f^{\dagger*} \psi^* - \psi^* f^{\dagger} \varphi = \frac{\partial}{\partial q} (\dots) \quad (7)$$

ein vollständiger Differentialquotient nach q . Ferner gilt eine Kontinuitätsgleichung

$$\frac{\partial}{\partial \beta} (\varphi f \psi^* + \psi^* f^{\dagger} \varphi) = \frac{\partial}{\partial q} (\dots), \quad (8)$$

falls die Operatoren f und \tilde{f} vertauschbar sind.

Wir wollen endlich den singulären Fall ins Auge fassen, daß in (2) die Funktion g von q allein abhängt: $g = g(q)$. Dann heißt (2b):

$$\varphi(q, \beta) = 0, \quad \text{außer für } \beta = g(q).$$

Entsprechend der physikalischen Bedeutung der Funktion φ heißt das: Es sei $g(q)$ eine allein aus q durch symbolische Additionen und Multiplikationen gebildete mechanische Größe. Dann ist der Zahlwert von $g(q)$ aus dem Zahlwert von q auf dieselbe Weise durch *gewöhnliche* Additionen und Multiplikationen abzuleiten.

Dieser Satz gibt die Rechtfertigung für einen der Hauptpunkte in der Methode der q -Zahlen. Bei der Integration eines mechanischen Problems nach der Methode der q -Zahlen werden z. B. (soweit es möglich

ist) Wirkungs- und Winkelvariable J_k, w_k eingeführt, und es werden als beobachtbare Größen lediglich Funktionen der J_k allein angesehen (z. B. Energien; Übergangswahrscheinlichkeiten). Ist eine solche Größe $f(J)$ als Funktion der q -Zahlen J bestimmt worden, so geht man zu den meßbaren Größen über, indem man die J durch gewöhnliche c -Zahlen ersetzt. Ähnliche Regeln müssen angewandt werden in der relativistischen Mechanik, wo die Gleichung $\sum_{k=1}^4 p_k^2 + m^2 c^2 = 0$ zunächst in einem scheinbaren Widerspruch mit den Vertauschungsregeln steht, der jedoch nach Dirac¹⁾ formal in ähnlicher Weise behoben werden kann, wie aus der q -Zahlenfunktion $f(J)$ eine c -Zahlenfunktion zu gewinnen ist. Auch ist in der q -Zahl-Behandlung des Comptoneffekts nach Dirac (a. a. O.) ein ähnliches Verfahren durchzuführen. Der obige allgemeine Satz liefert eine physikalische Rechtfertigung dieser formalen Regeln.

§ 5. *Mathematische Theorie der Amplitudengleichungen.* Wir wenden uns nun zur mathematischen Untersuchung der Amplitudengleichungen (2). Wir werden dabei teilweise Überlegungen wiederholen, die wir von einem anderen Standpunkt aus schon in § 2 angestellt haben.

Wir wollen an den Gleichungen (2) eine neue Transformation

$$p = p(P, Q), \quad q = q(P, Q) \quad (9)$$

ausführen, welche durch

$$p = S P S^{-1}, \quad q = S Q S^{-1}; \quad S = S(P, Q) \quad (10)$$

darstellbar sein möge. Durch (9) möge

$$f(p, q) = F(P, Q), \quad g(p, q) = G(P, Q) \quad (11)$$

werden, und wir betrachten die Gleichungen

$$\left\{ F\left(\varepsilon \frac{\partial}{\partial Q}, Q\right) + \varepsilon \frac{\partial}{\partial \beta} \right\} \Phi(Q, \beta) = 0, \quad (12a)$$

$$\left\{ G\left(\varepsilon \frac{\partial}{\partial Q}, Q\right) - \beta \right\} \Phi(Q, \beta) = 0. \quad (12b)$$

Man sieht, daß die Funktion

$$S\left(\varepsilon \frac{\partial}{\partial Q}, Q\right) \cdot \varphi(Q, \beta) = \Phi(Q, \beta) \quad (13)$$

¹⁾ P. A. M. Dirac, Proc. Roy. Soc.

diesen Gleichungen genügt. Denn es ist nach (2), (10) mit $S = S\left(\varepsilon \frac{\partial}{\partial Q}, Q\right)$:

$$\begin{aligned} 0 &= S \cdot \left\{ f\left(\varepsilon \frac{\partial}{\partial Q}, Q\right) + \varepsilon \frac{\partial}{\partial \beta} \right\} S^{-1} \cdot S \varphi(Q, \beta) \\ &= \left\{ F\left(\varepsilon \frac{\partial}{\partial Q}, Q\right) + \varepsilon \frac{\partial}{\partial \beta} \right\} S \varphi, \end{aligned} \quad (14a)$$

$$\begin{aligned} 0 &= S \cdot \left\{ g\left(\varepsilon \frac{\partial}{\partial Q}, Q\right) - \beta \right\} S^{-1} \cdot S \varphi(Q, \beta) \\ &= \left\{ G\left(\varepsilon \frac{\partial}{\partial Q}, Q\right) - \beta \right\} S \varphi. \end{aligned} \quad (14b)$$

Wir können dieses Ergebnis insbesondere anwenden für den Fall, daß

$$f(p, q) = -q, \quad g(p, q) = p \quad (15)$$

ist. Die Gleichungen (2) lauten dann

$$\left\{ q - \varepsilon \frac{\partial}{\partial \beta} \right\} \varphi = \left\{ \varepsilon \frac{\partial}{\partial q} - \beta \right\} \varphi = 0 \quad (16)$$

und haben die Lösung

$$\varphi = e^{\frac{q\beta}{\varepsilon}}; \quad (17)$$

da man nun durch geeignete Wahl von S wieder zu beliebigen F, G übergehen kann, so ist bewiesen, daß die Gleichungen (12) bzw. die Gleichungen (2) unter der Voraussetzung (1) wirklich lösbar sind.

Ein bekanntes Verfahren zur mathematischen Diskussion linearer Differentialgleichungen besteht darin, daß man die Lösung $\varphi(y)$ von

$$L\left(\frac{\partial}{\partial y}, y\right) \cdot \varphi = 0 \quad (18)$$

ansetzt in der Form

$$\varphi(y) = \int \Phi(z) e^{yz} dz, \quad (19)$$

und nach dieser Laplaceschen Transformation aus (18) eine Differentialgleichung für Φ gewinnt. Wir werden dies Verfahren in einer verallgemeinerten Weise anwenden auf die Gleichungen (2) und dabei zu einem Ergebnis kommen, das sehr kennzeichnend für die merkwürdige mathematische Natur dieser Gleichungen scheint. Statt der Funktion e^{yz} im Integrale (19) werden wir nämlich eine allgemeinere Funktion $\chi(x, y)$ von zwei Variablen benutzen; und wir werden sehen: Wenn χ^* zwei Gleichungen derselben allgemeinen Form wie die Gleichungen (2) für φ befriedigt, so sind auch die transformierten Gleichungen für Φ wieder von derselben Art. Diese mathematische Tatsache wird uns dann sofort erkennen lassen, daß die Lösungen

der Gleichungen (2) wirklich genau die von unseren physikalischen Postulaten geforderten Eigenschaften besitzen.

Wir wollen also die Lösung $\varphi(q) = \varphi(q, \beta)$ von (2) darstellen in der Form

$$\varphi(q) = \int \Phi(Q) \chi(Q, q) dQ. \quad (20)$$

Unser mathematischer Satz lautet: Wenn $\chi^*(Q, q)$ den Differentialgleichungen

$$\left\{ p^\dagger \left(\varepsilon \frac{\partial}{\partial Q}, Q \right) + \varepsilon \frac{\partial}{\partial q} \right\} \chi^*(Q, q) = 0, \quad (21 a)$$

$$\left\{ q^\dagger \left(\varepsilon \frac{\partial}{\partial Q}, Q \right) - q \right\} \chi^*(Q, q) = 0 \quad (21 b)$$

genügt (die genau von der Form (2) mit p^\dagger, q^\dagger statt f, g sind) so ergeben sich aus (2) als transformierte Gleichungen für $\Phi(Q) = \Phi(Q, \beta)$ gerade die Gleichungen (12). Dabei sind nur noch einige Voraussetzungen über das Verhalten der Funktionen an den Endpunkten der Wertekurve von Q zu machen.

Es scheint übersichtlicher, zum Beweise etwas andere Bezeichnungen einzuführen, nämlich x statt Q und y statt q zu schreiben. Wir bemerken zunächst, daß aus (21) allgemein

$$y^m \left(-\varepsilon \frac{\partial}{\partial y} \right)^n \chi^*(x, y) = p^{\dagger n} \left(\varepsilon \frac{\partial}{\partial x}, x \right) q^{\dagger m} \left(\varepsilon \frac{\partial}{\partial x}, x \right) \chi^*(x, y) \quad (22)$$

folgt. Für die weitere Überlegung denken wir uns $p^{\dagger n} q^{\dagger m}$ in die Form

$$p^{\dagger n} q^{\dagger m} = \sum_s u_s^*(x) \cdot \left(\varepsilon \frac{\partial}{\partial x} \right)^s \quad (23)$$

gesetzt. Vermöge der Hilfsformel (6) aus § 3 ersieht man dann, daß

$$\Phi(x) y^m \left(\varepsilon \frac{\partial}{\partial y} \right)^n \chi(x, y) = \chi(x, y) \sum_s \left(\varepsilon \frac{\partial}{\partial x} \right)^s u_s(x) \cdot \Phi(x) + \frac{\partial}{\partial x}(\dots) \quad (24)$$

ist. Nun ist aber offenbar

$$\sum_s \left(\varepsilon \frac{\partial}{\partial x} \right)^s u_s(x) = q^m \left(\varepsilon \frac{\partial}{\partial x}, x \right) p^m \left(\varepsilon \frac{\partial}{\partial x}, x \right), \quad (25)$$

also

$$\Phi(x) y^m \left(\varepsilon \frac{\partial}{\partial y} \right)^n \chi(x, y) = \chi(x, y) q^m \left(\varepsilon \frac{\partial}{\partial x}, x \right) p^m \left(\varepsilon \frac{\partial}{\partial x}, x \right) \Phi(x) + \frac{\partial}{\partial x}(\dots), \quad (26)$$

und diese Gleichung lehrt unmittelbar: Wenn $\int \frac{\partial}{\partial x}(\dots) dx$ verschwindet, so geht in der Tat (2) durch den Ansatz (20) in (12) über.

Der Beweis, daß, wenn χ den Gleichungen (21) genügt, durch die Transformation (20) die Gleichungen (2) in (12), oder genauer: (2a) in (12a) und (2b) in (12b) überführt werden, ist geführt worden, ohne daß die in (10) ausgedrückte Voraussetzung, (9) sei kanonisch, benutzt wurde. Wir werden jetzt einen Operator S konstruieren, der die Gleichungen (10) erfüllt, und zwar wiederum, ohne die Existenz eines solchen Operators von vornherein vorauszusetzen. Es wird deshalb durch unsere Konstruktion zugleich bewiesen werden, daß die Gleichungen (21) sich widersprechen müssen, wenn (9) nicht kanonisch ist. Damit haben wir dann auch den versprochenen Beweis geliefert, daß (1) notwendige Bedingung für die Lösbarkeit von (2) ist.

Wir nehmen an, (20) habe eine Umkehrung

$$\Phi(x) = \int \varphi(z) \xi(z, x) dz. \tag{27}$$

Diese Annahme bedeutet nicht mehr als die Ausschließung singulärer Ausnahmen. Die Gleichung (20) ist mit dem Operatorsymbol

$$V = \int dx \chi(x, y) \dots \tag{28}$$

zu schreiben als

$$\varphi(x) = V \cdot \Phi(x); \tag{29}$$

die umgekehrte Gleichung $\Phi(x) = V^{-1} \varphi(x)$ muß mit (27) gleichbedeutend, also

$$V^{-1} = \int dz \cdot \xi(z, x) \dots \tag{30}$$

sein.

Nun ist nach (20), (24), (27):

$$\begin{aligned} & y^m \left(\varepsilon \frac{\partial}{\partial y} \right)^n \varphi(y) \\ &= \int dx \chi(x, y) q^m \left(\varepsilon \frac{\partial}{\partial x}, x \right) p^n \left(\varepsilon \frac{\partial}{\partial x}, x \right) \int dz \xi(z, x) \varphi(z), \end{aligned} \tag{31}$$

oder in der Schreibweise (28), (29), (30):

$$\left\{ y^m \left(\varepsilon \frac{\partial}{\partial y} \right)^n - V q^m \left(\varepsilon \frac{\partial}{\partial y}, y \right) p^n \left(\varepsilon \frac{\partial}{\partial y}, y \right) V^{-1} \right\} \varphi(y) = 0. \tag{32}$$

Da diese Gleichung jedoch für willkürliches $\varphi(y)$ gültig ist, so kann man daraus schließen auf die Operatorgleichungen:

$$\left. \begin{aligned} y &= V q \left(\varepsilon \frac{\partial}{\partial y}, y \right) V^{-1}, \\ \varepsilon \frac{\partial}{\partial y} &= V p \left(\varepsilon \frac{\partial}{\partial y}, y \right) V^{-1}, \end{aligned} \right\} \tag{33}$$

aus denen man den gesuchten Operator S als

$$S = V^{-1} \quad (34)$$

entnimmt.

Wir wollen nun ein festes Paar α, β kanonischer Größen wählen. Jeder Größe $T = T(\alpha, \beta)$ kann dann ein Operator

$$T = T\left(\varepsilon \frac{\partial}{\partial x}, x\right) \quad (35)$$

zugeordnet werden, den wir als Operator der Größe T in bezug auf α, β bezeichnen. Wir nennen ferner, wenn (1) gilt, die Lösung $\varphi(x, \beta)$ von (2) die Amplitude von T in bezug auf α, β .

Entsprechend ist dann die Lösung $\psi(x, \beta)$ von (3) die Amplitude der kontragredienten Größe \check{T} zu T in bezug auf α, β .

Die obigen Feststellungen zeigen dann: Der Operator

$$\int dx \cdot \psi^*(x, y) \dots \quad (36)$$

ist gleich T^{-1} [vgl. dazu die mit Gleichung (34) abgeschlossenen Überlegungen, die Entsprechendes für S beweisen]:

$$T^{-1}\left(\varepsilon \frac{\partial}{\partial x}, x\right) = \int dx \cdot \psi^*(x, y) \dots \quad (37)$$

Aus (4) ersieht man jetzt: Ist

$$L = \int dx \cdot \varphi(y, x) \dots, \quad (38)$$

so wird

$$T^{-1}L = \int dx \cdot \psi^*(x, y) \int dz \cdot \varphi(x, z) \dots = 1, \quad (39)$$

also ¹⁾

$$T\left(\varepsilon \frac{\partial}{\partial x}, x\right) = \int dx \cdot \varphi(y, x) \dots \quad (40)$$

Die Gleichungen (37), (40) zeigen, daß die Amplituden in der Tat die vom Postulat B in § 2 verlangte Eigenschaft besitzen.

Entsprechend (37), (40) erhält man für die kontragrediente Größe \check{T} :

$$\check{T}\left(\varepsilon \frac{\partial}{\partial x}, x\right) = \int dx \cdot \psi(y, x) \dots \quad (41)$$

$$\check{T}^{-1}\left(\varepsilon \frac{\partial}{\partial x}, x\right) = \int dx \cdot \varphi^*(x, y) \dots \quad (42)$$

¹⁾ Da man, wie wir später sehen werden, für eine sehr allgemeine Klasse von Fällen die Lösungen von (2) explizit angeben kann, so sind in (37), (40) eine große Fülle von Integralumkehrformeln enthalten, die zum Teil auch vom rein mathematischen Standpunkt bemerkenswert sein dürften.

Nach Born und Wiener¹⁾ bezeichnen wir die Funktionen φ , ψ^* , ψ , φ^* auch als erzeugende Funktionen der Operatoren T , T^{-1} , \check{T} , \check{T}^{-1} .

Aus (37), (40) ersieht man ferner, daß der auf Funktionen $\zeta(x)$ von x wirkende Operator

$$T T^{-1} = \iint dy dx \varphi(z, y) \psi^*(x, y) \dots \quad (43)$$

gleich dem Einheitsoperator ist, so daß also

$$\int dy \cdot \varphi(z, y) \psi^*(x, y) = \delta_{xz}, \quad (44)$$

so daß zur Orthogonalitätsrelation (4) noch die zweite (45) hinzutritt.

Ist $\varphi(x, y)$ die Amplitude von T in bezug auf α, β , und $\Phi(x, y)$ die Amplitude von $T S$ in bezug auf α, β und $S\left(\varepsilon \frac{\partial}{\partial x}, x\right)$ der Operator S in bezug auf α, β , also gemäß (40)

$$S\left(\varepsilon \frac{\partial}{\partial x}, x\right) = \int dx \cdot \bar{\varphi}(y, x) \dots, \quad (46)$$

worin $\bar{\varphi}(x, y)$ die Amplitude von S in bezug auf α, β ist, so gilt nach (13) das Multiplikationsgesetz

$$\Phi(x, y) = \int \bar{\varphi}(x, z) \varphi(z, y) dz. \quad (47)$$

Wir haben hier die in § 2 durch Postulat C bzw. Gleichung (14) verlangte Eigenschaft der Amplituden bestätigt.

Sind $M_1(x, y)$, $M_2(x, y)$ zwei Matrizen, so pflegt man als Produkt $M_1 M_2$ die Matrix

$$\int M_1(x, z) M_2(z, y) dz \quad (48)$$

zu bezeichnen. Nach den oben eingeführten Bezeichnungen ist es jedoch zweckmäßiger, dieses Produkt (48) gerade mit $M_2 M_1$, also mit $M_1 M_2$ die Matrix

$$M_1 M_2(x, y) = \int M_1(z, y) M_2(x, z) dz \quad (49)$$

zu bezeichnen. Diesen Gebrauch wollen wir im folgenden festhalten. Nach unserer Definition (49) heißt (47), daß bei der Multiplikation zweier Größen sich ihre auf feste α, β bezogenen Amplituden in gleicher Weise nach dem Multiplikationsgesetz der Matrizen multiplizieren. Wir wollen deshalb $\varphi(x, y)$ auch als die Matrix erster Stufe von T in bezug auf α, β bezeichnen.

Nach unseren Ergebnissen ist die kinematische Beziehung zwischen zwei Größen q und β erst dann im Sinne von § 2 vollständig bestimmt,

¹⁾ M. Born und N. Wiener, ZS. f. Phys. **36**, 174, 1926.

wenn auch die zugehörigen Impulse p und α genau definiert sind. Nun ist durch Angabe von β allein der Impuls α nur bis auf eine additive Funktion von β festgelegt: mit α erfüllt auch $\alpha' = \alpha + b(\beta)$ die Vertauschungsregel $[\alpha', \beta] = [\alpha, \beta] = \varepsilon$, und es ist deshalb durch Angabe von q und β allein die Amplitude $\varphi(x, y)$ für $q = x$ bei $\beta = y$ nicht eindeutig festgelegt. Es besteht jedoch die fundamentale Tatsache, daß trotzdem die Wahrscheinlichkeit

$$\varphi(x, y) \psi^*(x, y) \quad (50)$$

selbst invariant gegenüber den möglichen Änderungen von p und α ist. Wird nämlich statt des Impulses p ein anderer Impuls $p + b(q)$ gewählt, so ändert sich $\varphi(x, y)$ unter Einwirkung eines Operators T' der Form $T' = T'(x)$ (der also $\varepsilon \frac{\partial}{\partial x}$ nicht enthält); und $\psi^*(x, y)$ ändert sich unter Einwirkung von T'^{-1} . Ganz ebenso läßt auch der Übergang von α zu $\alpha + b(\beta)$ die Wahrscheinlichkeit (50) invariant.

Die Gleichungen (2) sind sofort zu lösen, wenn die Transformationsgröße T in (1) bekannt ist. Und zwar erhält man in diesem Falle nach unseren Formeln

$$\varphi(q, \beta) = \int e^{-\frac{sq}{\varepsilon}} T\left(-s, \varepsilon \frac{\partial}{\partial s}\right) e^{\frac{s\beta}{\varepsilon}} ds \quad (51)$$

oder, wenn $T(p, q)$ in der Form

$$T(p, q) = \sum_n u_n(p) v_n(q) \quad (52)$$

gegeben war:

$$\varphi(q, \beta) = \int e^{-\frac{sq}{\varepsilon}} T(-s, \beta) e^{\frac{s\beta}{\varepsilon}} ds. \quad (53)$$

Statt dessen kann die Transformation $\alpha, \beta \rightarrow p, q$ auch in der Form

$$\left. \begin{aligned} S(p, \beta) &= \sum_n f_n(p) g_n(\beta) = p\beta - S^*(p, \beta), \\ \alpha &= \frac{\partial S}{\partial \beta}, \quad q = \frac{\partial S}{\partial p} \end{aligned} \right\} \quad (54)$$

gegeben sein. Nach früher mitgeteilten Formeln¹⁾ wird dann

$$\begin{aligned} \varphi(q, \beta) &= \int e^{-\frac{sq}{\varepsilon}} e^{-\frac{1}{\varepsilon} \{S(-s, \beta) + s\beta\}} e^{\frac{s\beta}{\varepsilon}} ds \\ &= \int e^{-\frac{1}{\varepsilon} \{sq + S(-s, \beta)\}} ds. \end{aligned} \quad (55)$$

Einige spezielle Fälle erlauben eine unmittelbare Integration. Es sei z. B. mit reellen a_{kl} :

$$p = a_{11}P + a_{12}Q, \quad q = a_{21}P + a_{22}Q; \quad (56)$$

¹⁾ P. Jordan, ZS. f. Phys. 38, 513, 1926.

das ist kanonisch, wenn

$$\begin{vmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \end{vmatrix} = 1. \tag{57}$$

Dazu gehören die Differentialgleichungen

$$\varepsilon \frac{\partial}{\partial y} \chi(x, y) = \left(-a_{11} \varepsilon \frac{\partial}{\partial x} + a_{12} x \right) \chi(x, y), \tag{58 a}$$

$$y \chi(x, y) = \left(-a_{21} \varepsilon \frac{\partial}{\partial x} + a_{22} x \right) \chi(x, y), \tag{58 b}$$

die für $a_{21} \neq 0$ die Lösung

$$\chi(x, y) = e^{\frac{1}{\varepsilon^2 a_{21}} (a_{22} x^2 - 2xy + a_{11} y^2)} \tag{59}$$

besitzen. Ein anderer sehr einfacher Fall ist

$$p = \frac{1}{P}, \quad q = -P^2 Q. \tag{60}$$

Man erhält (17) in der Form

$$-\varepsilon \frac{\partial}{\partial y} \chi^*(x, y) = -\left(\varepsilon \frac{\partial}{\partial x} \right)^{-1} \chi^*(x, y), \tag{61 a}$$

$$y \chi^*(x, y) = -x \left(\varepsilon \frac{\partial}{\partial x} \right)^2 \chi^*(x, y) \tag{61 b}$$

oder

$$-\varepsilon^2 \frac{\partial^2}{\partial x \partial y} \chi(x, y) = \chi(x, y), \tag{62 a}$$

$$y \chi(x, y) = -x \left(\varepsilon \frac{\partial}{\partial x} \right)^2 \chi(x, y). \tag{62 b}$$

Man sieht danach, daß die Ableitung $\frac{\partial}{\partial x} \chi(x, y)$ eine Funktion $F(xy)$ des Produktes xy sein und der Gleichung

$$F'''(t) \cdot t + F'(t) + \frac{1}{\varepsilon^2} F(t) = 0 \tag{63}$$

genügen muß. Man kann danach in der Tat leicht ein $\chi(x, y)$ bilden, das den vorgeschriebenen Gleichungen genügt.

§ 6. *Konstruktion der Matrizen zweiter Stufe.* Wir definieren weiter die Matrix zweiter Stufe einer Größe S in bezug auf die fünf Größen $\alpha', \beta'; T; \alpha, \beta$. Sei $S \left(\varepsilon \frac{\partial}{\partial x}, x \right)$ der Operator der Größe S in bezug auf α', β' und $\varphi(x, y), \psi(x, y)$ die Amplituden von T, \tilde{T} in bezug auf α, β , dann bezeichnen wir nach dem Vorbild der von

Schrödinger, Pauli und Eckart angegebenen Zuordnung von Matrizen zu Operatoren als Matrix S die Funktion

$$S(y, z) = \int \varphi(x, y) S\left(\varepsilon \frac{\partial}{\partial x}, x\right) \psi^*(x, z) dx. \quad (1)$$

Mit Hilfe der Amplitude $s(x, y)$ von S in bezug auf α' , β' kann man dafür auch schreiben

$$S(y, z) = \iint dx d\xi \varphi(x, y) s(x, \xi) \psi^*(\xi, z); \quad (2)$$

man erkennt, daß die Zuordnung von $S(y, z)$ zu $s(x, y)$ nichts anderes als die von Lanczos¹⁾ angegebene Zuordnung von Funktionen $s(x, y)$ zweier Veränderlicher und Matrizen $S(y, z)$ ist. Man kann ferner, da ja die Matrix erster Stufe $\psi^*(x, y)$ die Reziproke der Matrix $\varphi(x, y)$ ist, die Gleichung (2) als Matrizengleichung in der Form

$$S = \tilde{\varphi}^{-1} s \tilde{\varphi} \quad (3)$$

schreiben. Durch die reziproke Transformation

$$s = \tilde{\varphi} S \tilde{\varphi}^{-1} \quad (4)$$

kehrt man von S zu s zurück; es entspricht dies bei Lanczos dem Übergang von einer Matrix zur zugeordneten Funktion von zwei Veränderlichen.

Als Folgerung ergibt sich aus (3), daß die auf feste α' , β' ; T ; α , β bezogenen Matrizen zweiter Stufe sich in ihren Additionen und Multiplikationen isomorph zur symbolischen Addition und Multiplikation der mechanischen Größen verhalten.

Man sieht ferner aus (3), daß in Wirklichkeit kein eigentlicher Unterschied zwischen Matrizen erster und zweiter Ordnung besteht. Trotzdem scheint ihre Unterscheidung deshalb zweckmäßig, weil die Größe (3) als Matrix erster Stufe, d. h. als Amplitude einer Zustandswahrscheinlichkeit betrachtet, eine wenig interessante Bildung ist, während sie in anderer Hinsicht eine einfache physikalische Bedeutung besitzt (vgl. § 7).

In der Schrödingerschen Theorie werden die Heisenbergschen Matrizen abgeleitet als Matrizen zweiter Stufe, die sich auf Größen α' , β' ; T ; α , β gemäß

$$(\alpha', \beta'; T; \alpha, \beta) = (p, q; \tau; W, t) \quad (5)$$

beziehen, wo p , q Impuls und Koordinate im gewöhnlichen Sinne, W die Energie, t die Zeit und τ die Transformationsgröße derjenigen kanonischen Transformation ist, welche p , q in W , t überführt.

¹⁾ K. Lanczos, ZS. f. Phys. **35**, 812, 1926.

Anders als in der Schrödingerschen Theorie, aber ebenso als Sonderfall in unserer allgemeinen Konstruktion enthalten, ist die Born-Wiengersche Matrizenkonstruktion, die hier etwas näher betrachtet werden möge.

In der Born-Wiengerschen Theorie werden alle Operatoren auf W, t bezogen. Halten wir in der Schreibweise fest an der Voraussetzung eines kontinuierlichen Wertebereichs der Energie W , und betrachten wir eine Größe A , die — klassisch gesprochen — als Fourierintegral der Zeit t darzustellen ist, so können wir ihren Operator in bezug auf W, t in die Form

$$A = A\left(\varepsilon \frac{\partial}{\partial t}, t\right) = \int dt \cdot a(s, t) \dots \quad (6)$$

mit einer erzeugenden Funktion $a(s, t)$ setzen, die ihrerseits von der Gestalt

$$a(s, t) = \iint b(\sigma, \varrho) e^{\frac{W_\sigma s - W_\varrho t}{\varepsilon}} d\sigma d\varrho \quad (7)$$

ist; darin ist die Energie W_σ eine Funktion der „Quantenzahl“ σ . Aus dem Operator A bildet man die Matrix $A(V, W)$ zweiter Stufe nach dem Schema

$$A(V, W) = \int e^{-\frac{Vt}{\varepsilon}} A\left(\varepsilon \frac{\partial}{\partial t}, t\right) e^{\frac{Wt}{\varepsilon}} dt. \quad (8)$$

Das ist in der Tat ein Spezialfall unserer obigen allgemeinen Matrizenkonstruktion. Wir sehen: Sei R die Matrix mit der erzeugenden Funktion $e^{\frac{Wt}{\varepsilon}}$ und mit der Eigenschaft

$$W = R^{-1} t R, \quad t = -R^{-1} W R,$$

dann können wir die Theorie von Born und Wiener — ebenso wie wir die Schrödingersche Theorie durch (6) kennzeichneten — bezeichnen durch

$$(\alpha', \beta': T; \alpha, \beta) = (W, t; R; W, t).$$

Nach Born und Wiener soll nun die Funktion in (7) nichts anderes als die Heisenbergsche Matrix von A sein, wodurch dann gewährleistet wird, daß auch die Matrix $A(V, W)$ [bei etwas anderer Normierung als in (54)] mit der Heisenbergschen Matrix übereinstimmt. Wir werden sehen, wie sich diese Tatsache zwangsläufig aus unseren allgemeinen Prinzipien ergibt.

Die erzeugende Funktion $a(s, t)$ des Operators A muß die Amplitude von A in bezug auf W, t sein. Wir wollen prüfen, ob sie wirklich in

entsprechender Weise unseren Differentialgleichungen (2) genügt. Zur Aufstellung der Gleichungen (2) für den jetzt betrachteten Fall setzen wir gemäß unseren früheren Formeln

$$\begin{aligned} W &= A x A^{-1} = f(x, \mu), \\ t &= A \mu A^{-1} = g(x, \mu). \end{aligned} \quad (9)$$

Wir können danach die Funktionen f, g definieren durch

$$A W A^{-1} = f(W, t), \quad (10)$$

$$A t A^{-1} = g(W, t) \quad (11)$$

und erhalten die Gleichungen (2) für unseren Fall in der Form

$$\left. \begin{aligned} (a) \left\{ f \left(\varepsilon \frac{\partial}{\partial s}, s \right) + \varepsilon \frac{\partial}{\partial t} \right\} a(s, t) &= 0, \\ (b) \left\{ g \left(\varepsilon \frac{\partial}{\partial s}, s \right) - t \right\} a(s, t) &= 0. \end{aligned} \right\} \quad (12)$$

Die Lösung ist nach (53):

$$a(s, t) = \int e^{-\frac{x s}{\varepsilon}} A(-x, t) e^{\frac{x t}{\varepsilon}} dx; \quad (13)$$

dabei ist die Funktion $A(-x, t)$ von zwei Zahlvariablen x, t so definiert, daß in $A(W, t)$ als Funktion der q -Zahlen W, t , nachdem es in die Form

$$A(W, t) = \sum_n a_n(W) b_n(t) \quad (14)$$

gesetzt ist, die q -Zahlen W, t durch c -Zahlen $-x, t$ ersetzt werden.

Nach unserer obigen Voraussetzung kann die Größe $A(W, t)$ mit Hilfe kanonischer Größen J, w in die Form

$$A(W, t) = \int b_x(J) e^{2\pi i w x} dx \quad (15)$$

gesetzt werden, wobei

$$W = H(J), \quad w = \frac{\partial H}{\partial J} t \quad (16)$$

ist. Nach Pauli¹⁾ kann man dann A umschreiben in

$$A(W, t) = \int b_x(J) e^{2\pi i t \frac{H(J) - H(J - \tau h)}{h}}, \quad (17)$$

worin die Bezeichnung

$$e^{\mu_1, \mu_2} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\mu_1^n \mu_2^n}{n!} \quad (18)$$

¹⁾ Vgl. P. Jordan, ZS. f. Phys. **37**, 376, 1926.

gebraucht ist. Also erhalten wir, wenn wir wieder W_σ für die Energie als Funktion der Quantenzahl σ schreiben:

$$A(s, t) = \iint b_x(\sigma) e^{-\frac{W_\sigma s - W_{\sigma-\tau} t}{\hbar}} d\tau d\sigma. \quad (19)$$

Nun wird in der Theorie der q -Zahlen gezeigt, daß $b_x(\sigma)$ in (15) gerade der Heisenbergsche Matrizenkoeffizient $B(\sigma + \tau, \sigma)$ der Größe A ist. Folglich ist die Behauptung wirklich bewiesen.

Wir wollen zum Schluß dieses Paragraphen noch den Beweis eines allgemeinen Satzes aus (13) entnehmen. Wir bilden die Matrix zweiter Stufe einer Größe S erstens in bezug auf

$$(p, q; R; \alpha, \beta)$$

und zweitens in bezug auf

$$(\alpha, \beta; R'; \alpha, \beta); R' = R\tilde{T}.$$

Der Satz lautet: Beide Male entsteht als Matrix dieselbe Funktion von zwei Veränderlichen. Der Beweis ergibt sich so unmittelbar aus (3) und unseren immer wieder benutzten Formeln, daß eine nähere Erläuterung überflüssig scheint.

Vorauszusetzen ist natürlich für den Satz, daß die Amplitude von R' in bezug auf α, β regulär ist. Für Fälle, in denen das nicht mehr gilt, können wir jedoch behaupten: die Matrizen ein und derselben Größe in bezug auf

$$(T^{-1}\alpha T, T^{-1}\beta T; R; \alpha, \beta)$$

und auf

$$(U^{-1}\alpha U, U^{-1}\beta U; V; \alpha, \beta) \quad (19)$$

sind gleich, wenn

$$R\tilde{T} = V\tilde{U} \quad (20)$$

ist. In allen Fällen wollen wir kurz von Matrizen in bezug auf

$$(R\tilde{T}; \alpha, \beta) \text{ bzw. } (V\tilde{U}; \alpha, \beta) \text{ usf.} \quad (21)$$

sprechen. Gemäß der Schrödingerschen Konstruktion sind die Heisenbergschen Matrizen bezogen auf

$$(\tau \tilde{\tau}; W, t), \quad (22)$$

wenn τ wieder die Größe ist, welche die gewöhnlichen p, q in W, t überführt. Im Falle klassischer Mechanik bei Abwesenheit eines Magnetfeldes ist nicht nur $H = H^\dagger$, sondern auch $H\left(\varepsilon \frac{\partial}{\partial q}, q\right) = H^*\left(\varepsilon \frac{\partial}{\partial q}, q\right)$, und es kann dann auch $\tau = \tau^*$ gewählt werden. Folglich sind die Matrizen dann bezogen auf (23)

$$(1; W, t).$$

§ 7. *Quantensprünge.* Man hat bislang unter Quantensprüngen lediglich zeitliche Zustandsänderungen verstanden, die man sich als unstetig erfolgend vorstellte. Die allgemeinere Gestalt, welche die Quantenmechanik im vorangehenden erhalten hat, läßt jedoch auch diese Vorstellung der Quantensprünge als Sonderfall einer wesentlich allgemeiner verwendbaren und naturgemäß erscheinenden Vorstellungsweise erkennen. Dies soll im folgenden dargelegt werden. Es mag erlaubt sein, dabei jetzt sogleich auf ein System von l Freiheitsgraden Bezug zu nehmen.

Seien also

$$q_1, q_2, \dots, q_l \quad (1)$$

l Größen, die alle miteinander vertauschbar, aber auch alle unabhängig sind, so daß man konjugierte Impulse

$$p_1, p_2, \dots, p_l \quad (2)$$

zu ihnen bilden kann, und seien entsprechend

$$\beta_1, \beta_2, \dots, \beta_l \quad (3)$$

weitere l vertauschbare unabhängige Größen mit konjugierten Impulsen

$$\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_l. \quad (4)$$

Alle diese $4l$ Größen wollen wir uns der Einfachheit halber als in stetigen Wertebereichen veränderlich vorstellen.

Mit Hilfe eines geeigneten

$$T(p, q) = T(p_1, p_2, \dots, p_l; q_1, q_2, \dots, q_l) \quad (5)$$

kann man schreiben

$$\left. \begin{aligned} \alpha_k &= f_k(p, q) = T p_k T^{-1}, \\ \beta_k &= g_k(p, q) = T q_k T^{-1}. \end{aligned} \right\} \quad (6)$$

Durch die Differentialgleichungen

$$\left\{ f_k \left(\varepsilon \frac{\partial}{\partial q}, q \right) + \varepsilon \frac{\partial}{\partial \beta_k} \right\} \varphi(q, \beta) = 0, \quad (7a)$$

$$\left\{ g_k \left(\varepsilon \frac{\partial}{\partial q}, q \right) - \beta_k \right\} \varphi(q, \beta) = 0 \quad (7b)$$

wird dann die Amplitude

$$\varphi(x, y) = \varphi(x_1, x_2, \dots, x_l; y_1, y_2, \dots, y_l) \quad (8)$$

der Wahrscheinlichkeit dafür definiert, daß

$$q_k = x_k \quad (9)$$

ist, wenn

$$\beta_k = y_k \quad (10)$$

ist. Die Amplitude φ für die gleichen q -Werte, aber infinitesimal veränderte β -Werte weicht infinitesimal von der angegebenen Amplitude ab. Wenn wir z. B. nur eine einzige Größe β_j um $d\beta_j$ ändern, so ist die entsprechende Amplitudenänderung

$$\left. \begin{aligned} \delta \varphi &= d\beta_j \cdot \frac{\partial}{\partial \beta_j} \varphi(q, \beta) \\ &= -\frac{1}{\varepsilon} d\beta_j \cdot f_j\left(\varepsilon \frac{\partial}{\partial q}, q\right) \cdot \varphi(q, \beta). \end{aligned} \right\} \quad (11)$$

Hierin kann der Differentialoperator $f_j\left(\varepsilon \frac{\partial}{\partial q}, q\right)$ in einen Integraloperator verwandelt werden; es wird dann

$$\delta \varphi = d\beta_j \cdot \int d\sigma \cdot \gamma_j(q, \sigma) \varphi(\sigma, \beta). \quad (12)$$

Diese Formel legt eine anschauliche Deutung nahe: Man wird sich vorstellen, daß beim Fortschreiten von β_j zu $\beta_j + d\beta_j$ die q -Werte unstetige Sprünge machen, derart, daß mit einer Wahrscheinlichkeit, deren Amplitude durch $\gamma_j(q, \sigma)$ gegeben ist, das Atom von seinen ursprünglichen q -Werten, die gleich σ waren, zu den Werten q überspringt.

Wir wollen noch die Übergangsamplitude $\gamma_j(q, \sigma)$ etwas genauer betrachten. Sie genügt den Differentialgleichungen

$$\left\{ f_j \varepsilon \frac{\partial}{\partial x_j} f_j^{-1} + \varepsilon \frac{\partial}{\partial y_j} \right\} \gamma_j(x, y) = 0, \quad (13a)$$

$$\{ f_j x_j f_j^{-1} - y_j \} \gamma_j(x, y) = 0, \quad (13b)$$

worin f_j den Operator

$$f_j = f_j\left(\varepsilon \frac{\partial}{\partial x}, x\right) \quad (14)$$

bedeutet. Dieser kann in der Form

$$f_j\left(\varepsilon \frac{\partial}{\partial x}, x\right) = T\left(\varepsilon \frac{\partial}{\partial x}, x\right) \varepsilon \frac{\partial}{\partial x_j} T^{-1}\left(\varepsilon \frac{\partial}{\partial x}, x\right) \quad (15)$$

geschrieben werden, und man sieht deshalb, daß

$$\gamma_j(x, y) = T\left(\varepsilon \frac{\partial}{\partial x}, x\right) \varepsilon \frac{\partial}{\partial x_j} \varrho(x, y) \quad (16)$$

ist, wobei $\varrho(x, y)$ den Gleichungen

$$\left\{ T^{-1} \varepsilon \frac{\partial}{\partial x_j} T + \varepsilon \frac{\partial}{\partial y_j} \right\} \varrho(x, y) = 0, \quad (17a)$$

$$\{ T^{-1} x_j T - y_j \} \varrho(x, y) = 0 \quad (17b)$$

genügt; es ist also

$$\varrho(x, y) = \psi^*(y, x), \quad (18)$$

wenn $\psi(x, y)$ die Ergänzungsamplitude zu $\varphi(x, y)$ bedeutet. Danach können wir endlich schreiben

$$\gamma_j(x, y) = \int d\xi \cdot \varphi(x, \xi) \xi_j \psi^*(y, \xi). \quad (19)$$

Wir sehen also, daß $\gamma_j(q, \sigma)$ eine Matrix zweiter Stufe ist. Wie die Matrizen erster Stufe die Amplituden von Zustandswahrscheinlichkeiten sind, so sind die Matrizen zweiter Stufe Amplituden von Übergangswahrscheinlichkeiten¹⁾.

Herrn M. Born und Herrn W. Pauli bin ich herzlich dankbar für viele freundliche Ratschläge und Anregungen.

Göttingen, Institut für theoretische Physik.

¹⁾ Daß wir diese Übergangsamplitude in (19) gerade in Form einer sehr speziellen Matrix zweiter Stufe erhalten haben, ist offenbar nur eine Folge davon, daß wir uns auf das für die gerade behandelte Frage bequemste System von Eigenfunktionen $\varphi(x, y)$ bezogen haben.
