

Über quantenmechanische Darstellung von Quantensprüngen.

Von P. Jordan in Göttingen.

(Eingegangen am 25. November 1926.)

Nach den elementaren Vorstellungen der Quantentheorie kann die Wechselwirkung der Atome bei Stößen, durch Strahlung usf. mit der Annahme unstetiger Quantensprünge beschrieben werden. Im Gegensatz dazu muß die exakte Quantenmechanik diese Wechselwirkungen als mit einem kontinuierlichen Energieaustausch in Form langsamer Schwebungen verknüpft betrachten. An einem einfachen aber typischen Beispiel wird der ausführliche Beweis dafür erläutert, daß beide Beschreibungsweisen trotz ihrer großen Verschiedenheit in allen empirisch prüfaren Aussagen dasselbe ergeben.

Nach den Grundannahmen der Quantentheorie kann für die Wechselwirkungen der Atome durch Vermittlung der Strahlung oder bei Zusammenstößen usf. eine sehr anschauliche unstetige Beschreibung durchgeführt werden auf Grund der Vorstellung, daß die Atome sich wechselseitig zu sprunghaften Änderungen ihres Zustandes veranlassen¹⁾. Versucht man jedoch, Wechselwirkungen der bezeichneten Art mit den Hilfsmitteln der Quantenmechanik exakter zu erfassen, so ist man genötigt, zunächst von einer Anknüpfung an diese Vorstellung abzusehen und die Wechselwirkung als durch langsame, kontinuierliche Schwebungen gekennzeichnet zu beschreiben. Es bedarf deshalb eines ausführlichen Beweises, daß man durch Anwendung der quantenmechanischen Gesetze auf derartige Wechselwirkungen zu Ergebnissen kommt, die in jeder experimentell entscheidbaren Frage dieselbe Antwort liefern (in erster Annäherung), wie sie aus der elementaren unstetigen Beschreibung der Vorgänge zu entnehmen ist. In dieser Note soll das an einem sehr einfachen Beispiel erläutert werden; die Verallgemeinerung der angestellten Überlegungen bereitet keine Schwierigkeit. Die dabei zu beachtenden

¹⁾ Bekanntlich hat Schrödinger, ausgehend von den mathematischen Beziehungen, durch deren Aufdeckung er die Quantenmechanik bereichert hat, Vorstellungen entwickelt, die sich zu den von Planck, Einstein, Bohr entwickelten Grundannahmen der Quantentheorie in radikalem Gegensatz befinden. Die folgenden Ausführungen gründen sich jedoch durchaus auf die alten Vorstellungen (stationäre Zustände; Übergänge), welche sie genauer zu analysieren und zu stützen geeignet scheinen.

Tatsachen und Gesichtspunkte sind zum Teil schon von Born¹⁾ und Dirac²⁾ in anderem Zusammenhang erörtert worden.

Wir betrachten zwei ungekoppelte ungleichartige Atome A_1, A_2 mit den Quantenzahlen n_1, n_2 ($= 0, 1, 2, \dots$) und den Energien $W_1(n_1), W_2(n_2)$. Dabei soll

$$W_1(1) - W_1(0) = W_2(1) - W_2(0)$$

sein, so daß also das aus beiden Atomen zusammen bestehende mechanische System mit der Energie

$$W(n_1 n_2) = W_1(n_1) + W_2(n_2)$$

eine Entartung

$$W(10) = W(01)$$

besitzt. Außer dieser Entartung soll jedoch keine weitere vorhanden sein.

Es möge dann eine mit λ proportionale Kopplung zwischen den Atomen eingeführt werden, so daß die Energiefunktion die Gestalt

$$H = H_1 + H_2 + \lambda H'$$

gewinnt. Die Wirkung dieser Störung ist die, daß jede auf das ungestörte System bezügliche Matrix $g = (g(n_1 n_2, m_1 m_2))$ in

$$g' = T g T^{-1}$$

verwandelt wird, wobei T orthogonal ist. Übrigens beschäftigen wir uns nur mit dem Grenzfall $\lambda = 0$ (der im allgemeinen nicht übereinstimmt mit dem ungestörten Zustand der ungekoppelten Atome). Dabei ist $T W T^{-1} = W$, also T vertauschbar mit W , woraus folgt, daß in $T = (T(n_1 n_2, m_1 m_2))$ nur die Glieder

$$T(n_1 n_2, n_1 n_2); T(01, 10); T(10, 01)$$

von Null verschieden sind. Die Orthogonalität von T verlangt dann, daß (abgesehen von belanglosen Phasenkonstanten)

$$T(n_1 n_2, n_1 n_2) = 1 \quad \text{für } n_1 n_2 \neq \begin{cases} 01 \\ 10 \end{cases}, \quad (1)$$

$$\begin{cases} |T(10, 10)|^2 + |T(10, 01)|^2 = 1, \\ |T(01, 10)|^2 + |T(01, 01)|^2 = 1, \end{cases} \quad (2)$$

$$T(10, 10) T^*(01, 10) + T(10, 01) T^*(01, 01) = 0 \quad (3)$$

(wobei a^* die Konjugierte zu a bedeutet). Aus (3) folgt übrigens:

$$|T(10, 10)|^2 \cdot |T(01, 10)|^2 = |T(10, 01)|^2 \cdot |T(01, 01)|^2. \quad (3')$$

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

²⁾ P. A. M. Dirac, Proc. Roy. Soc. **112**, 661, 1926.

Man erhält danach für die Elemente der transformierten Matrix die folgende Tabelle:

$$\text{Fall a) } \left. \begin{array}{l} n_1 n_2 \\ m_1 m_2 \end{array} \right\} \neq \left\{ \begin{array}{l} 10 \\ 01 \end{array} \right\},$$

$$g'(nm) = g(nm).$$

$$\text{Fall b) } m_1 m_2 \neq \left\{ \begin{array}{l} 10 \\ 01 \end{array} \right\},$$

$$g'(10, m_1 m_2) = T(10, 01) g(01, m_1 m_2) + T(10, 10) g(10, m_1 m_2),$$

$$g'(01, m_1 m_2) = T(01, 01) g(01, m_1 m_2) + T(01, 10) g(10, m_1 m_2)$$

[Faktoren $T(m_1 m_2, m_1 m_2) = 1$ sind sogleich fortgelassen].

$$\text{Fall c) } n_1 n_2 \neq \left\{ \begin{array}{l} 10 \\ 01 \end{array} \right\},$$

$g'(n_1 n_2, 10), g'(n_1 n_2, 01)$ entsprechend wie b).

$$\begin{aligned} \text{Fall d) } g'(01, 01) &= T(01, 10) g(10, 10) T^*(01, 10) \\ &+ T(01, 10) g(10, 01) T^*(01, 01) \\ &+ T(01, 01) g(01, 01) T^*(01, 01) \\ &+ T(01, 01) g(01, 10) T^*(01, 10) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} g'(10, 10) &= T(10, 10) g(10, 10) T^*(10, 10) \\ &+ T(10, 10) g(10, 01) T^*(10, 01) \\ &+ T(10, 01) g(01, 01) T^*(10, 01) \\ &+ T(10, 01) g(01, 10) T^*(10, 10) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} g'(01, 10) &= T(01, 10) g(10, 10) T^*(10, 10) \\ &+ T(01, 10) g(10, 01) T^*(10, 01) \\ &+ T(01, 01) g(01, 01) T^*(10, 01) \\ &+ T(01, 01) g(01, 10) T^*(10, 10) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} g'(10, 01) &= T(10, 10) g(10, 10) T^*(01, 10) \\ &+ T(10, 10) g(10, 01) T^*(01, 01) \\ &+ T(10, 01) g(01, 01) T^*(01, 01) \\ &+ T(10, 01) g(01, 10) T^*(01, 10) \end{aligned}$$

(Man beachte, das T^{-1} die transponierte, konjugiert komplexe Matrix zu T ist.)

Nach den Grundvorstellungen der Quantentheorie muß man nun die Wechselwirkung der Atome in unstetiger Weise folgendermaßen (angenähert) beschreiben können: Eine Wechselwirkung tritt überhaupt nur dann auf, wenn entweder $n_1 = 0, n_2 = 1$ oder $n_1 = 1, n_2 = 0$ ist. Und in diesen Fällen besteht die Wechselwirkung darin, daß die Atome

wiederum dauernd so reagieren, als wenn sie ungestört wären, wobei jedoch in gewissen zeitlichen Abständen Quantensprünge eintreten, bei denen das eine Atom von 1 nach 0, das andere von 0 nach 1 übergeht. Wird $\lambda = 0$, so werden die Pausen zwischen den Sprüngen unendlich lang; läßt man, von ungekoppelten Atomen $\lambda = 0$ ausgehend, zunächst ein endliches λ entstehen, das dann wieder auf Null gebracht wird, so verbleibt im Falle $n_1 = 1, n_2 = 0$ (bzw. $n_1 = 0, n_2 = 1$) eine Wahrscheinlichkeit w_a (bzw. w_b) dafür, daß A_1 zuletzt im Zustand 0, und eine Wahrscheinlichkeit $\bar{w}_a = 1 - w_a$ (bzw. $\bar{w}_b = 1 - w_b$), daß A_1 zuletzt im Zustand 1 ist.

Wir behaupten: Diese Aussagen sind in vollkommenem Einklang mit den obigen matrizentheoretischen Feststellungen, wenn man

$$\left. \begin{aligned} w_a &= |T(10, 01)|^2; & \bar{w}_a &= |T(10, 10)|^2; \\ w_b &= |T(01, 01)|^2; & \bar{w}_b &= |T(01, 10)|^2 \end{aligned} \right\} \quad (4)$$

annimmt. Die Beziehungen $w_a + \bar{w}_a = w_b + \bar{w}_b = 1$ sind dann nach (2) in der Tat erfüllt. Aus (3') folgt ferner

$$w_b = \bar{w}_a. \quad (5)$$

Für die experimentelle Messung der w_a usf. (und für die empirische Prüfung der Richtigkeit der unstetigen Beschreibung überhaupt) gibt es drei Methoden:

Methode A: Man kann durch äußere Einwirkungen Quantensprünge eines der Atome, etwa A_1 , erzeugen und aus den dabei eintretenden Energieumsetzungen sowie den Wahrscheinlichkeiten dieser Quantensprünge Rückschlüsse auf den vorherigen Zustand von A_1 ziehen.

Methode B: Man kann von Größen, die bei isoliertem A_1 zeitlich konstant sind, ihren Mittelwert, ihren Quadratmittelwert usf. in direkter Weise messen (z. B. magnetisches Moment von A_1).

Methode C: Man kann endlich A_1 beschleunigen durch ein äußeres Kraftfeld, dessen Wirksamkeit auf die Zustände $n_1 = 0$ und $n_1 = 1$ des ungekoppelten A_1 verschieden ist (Stern-Gerlach-Versuch).

Erörterung der Methode A: Die Übergangswahrscheinlichkeiten von A_1 bei äußerer Beeinflussung seien für isoliertes A_1 gegeben durch die Quadrate der Absolutwerte $w_1(n_1 n_2) = |g(n_1 n_2)|^2$ der Elemente einer Matrix g . Dies ist bekanntlich die allgemeine Form für die Wahrscheinlichkeiten aller durch Strahlung, Stöße oder sonstige inkohärente Einwirkungen veranlaßten Übergänge. Betrachtet man A_1 mit A_2 als ein System, so ist die Matrix g zu schreiben mit den Elementen

$$g(n_1 n_2, m_1 m_2) = \delta_{n_2 m_2} g_1(n_1 m_1).$$

Die Kopplung von A_1 mit A_2 bewirkt den Ersatz von g durch $g' = T g T^{-1}$, und man erhält Übergangswahrscheinlichkeiten

$$w'(n_1 n_2, m_1 m_2) = |g'(n_1 n_2, m_1 m_2)|^2,$$

die folgende Werte haben (vgl. die obige Tabelle):

$$\text{Fall a)} \quad \left. \begin{array}{l} n_1 n_2 \\ m_1 m_2 \end{array} \right\} \neq \left\{ \begin{array}{l} 10 \\ 01 \end{array} \right\},$$

$$w'(n_1 n_2, m_1 m_2) = \delta_{n_2 m_2} w_1(n_1 m_1).$$

Das heißt: Die Übergänge zwischen zwei Zuständen, die von 10 und 01 beide verschieden sind, stimmen nach Energieumsatz und Wahrscheinlichkeit mit denen des isolierten A_1 überein.

$$\text{Fälle b)} \quad m_1 \neq 0, 1.$$

$$w'(10, m_1 1) = w_1(0 m_1) \cdot |T(10, 01)|^2,$$

$$w'(10, m_1 0) = w_1(1 m_1) \cdot |T(10, 10)|^2,$$

$$w'(10, m_1 m_2) = 0 \quad \text{für } m_2 > 1.$$

Betrachten wir die w' als Wahrscheinlichkeiten für von 10 ausgehende Übergänge, so bedeuten die Formeln: $|T(10, 01)|^2$ ist die Wahrscheinlichkeit dafür, daß A_1 scheinbar isoliert, und zwar im Zustand $n_1 = 0$ ist; d. h. es ist $|T(10, 01)|^2 = w_a$. Entsprechend ist $|T(10, 10)|^2 = \bar{w}_a$, womit die oberen Formeln (4) bewiesen sind. Die unteren ergeben sich entsprechend.

Betrachten wir jedoch die w' als Wahrscheinlichkeiten für in 10 endende Übergänge, so ist zu beachten, daß vom Standpunkt der unstetigen Beschreibung z. B. die mit den Wahrscheinlichkeiten $w'(10, m_1 1)$ und $w'(01, m_1 1)$ erfolgenden Übergänge $m_1 1 \rightarrow 10$ und $m_1 1 \rightarrow 01$ beide stets als Übergänge in den Zustand scheinbar isolierter Atome mit $n_1 = 0$ und $n_2 = 1$ aufgefaßt werden müssen (und nicht etwa auch $n_1 = 1$ und $n_2 = 0!$). Denn da die äußere Einwirkung nur auf A_1 gerichtet ist, so muß vom Standpunkt der unstetigen Beschreibung aus eine Sprungerregung an A_2 für unmöglich gehalten werden; der Übergang vom Systemzustand $m_1 1$, der in der unstetigen Beschreibung stets als Zustand $n_1 = m_1, n_2 = 1$ der isolierten Atome aufgefaßt wird, zum Systemzustand 10 oder 01 kann deshalb nur als Übergang zum Zustand $n_1 = 0, n_2 = 1$ der isolierten Atome aufgefaßt werden. Also muß die Summe

$$w'(10, m_1 1) + w'(01, m_1 1),$$

wenn die unstetige Beschreibung richtig sein soll, übereinstimmen mit $w_1(0 m_1)$; und man sieht, daß das wirklich der Fall ist.

Damit ist die behauptete Übereinstimmung der exakten quantenmechanischen und der elementaren unstetigen Beschreibung der Wechselwirkung von A_1, A_2 hinsichtlich der experimentellen Methode A vollständig bewiesen¹⁾.

Erörterung der Methode B: Als zu messende Größe wählen wir etwa die Energie W_1 von A_1 ²⁾. Wir betrachten nur die Zustände 01, 10; in allen anderen Zuständen erhält man nach den Formeln der obigen Tabelle stets den Energiewert des isolierten A_1 , wie nach der unstetigen Beschreibung zu erwarten. Im Zustand 01 bekommt man aus $g = W_1 = \delta_{n_1 m_1} \delta_{n_2 m_2} W_1(n_1)$:

$$g'(01, 01) = W_1(1) \cdot |T(01, 10)|^2 + W_1(0) \cdot |T(01, 01)|^2;$$

oder nach (4) in Worten gemäß der unstetigen Beschreibung: Energie vom Zustand 1 mal Wahrscheinlichkeit dieses Zustandes plus Energie von 0 mal zugehörige Wahrscheinlichkeit. Ähnlich ergeben sich für die quadratische Schwankung der Energie aus den Matrizenformeln dieselben Ergebnisse wie aus der elementaren Vorstellung der unstetigen Beschreibung³⁾.

Die Methode C soll hier jetzt nicht ausführlicher untersucht werden.

Göttingen, Institut für theoretische Physik.

¹⁾ Von den Übergängen des Systems $A_1 + A_2$ ist im obigen lediglich der Übergang $10 \rightarrow 01$ nicht näher betrachtet worden. Vom Standpunkt der unstetigen Beschreibung ist er zu kennzeichnen als ein Quantensprung, bei dem sich primär nicht der Zustand von A_1 ändert, sondern die Wahrscheinlichkeit, daß A_1 im Zustand 0 oder 1 ist.

²⁾ Diese Energie kann (ähnlich wie ein magnetisches Moment von A_1) im Prinzip ohne Anregung von Quantensprüngen an A_1 , etwa durch Wägung, gemessen werden.

³⁾ Eine ausführliche Erörterung der „Methode B“ findet sich in einer Arbeit von W. Heisenberg, deren Manuskript ich nach Abschluß dieser Note zu sehen bekam.