

BAYERISCHE AKADEMIE DER WISSENSCHAFTEN
MATHEMATISCH-NATURWISSENSCHAFTLICHE KLASSE

SITZUNGSBERICHTE

JAHRGANG

1955

MÜNCHEN 1956

VERLAG DER BAYERISCHEN AKADEMIE DER WISSENSCHAFTEN

In Kommission bei der C. H. Beck'schen Verlagsbuchhandlung München

Das Korrespondenzprinzip bei korpuskular-statistischer Auffassung der Quantenmechanik

Von Fritz Bopp in München

Vorgelegt am 14. Januar 1955

In einer Reihe von Arbeiten¹ haben wir die Auffassung vertreten, daß die Quantenmechanik wie die klassische statistische Mechanik von punktförmig gedachten Teilchen handelt, die sich gegenseitig beeinflussend im Raume bewegen, und daß sie deren Bewegung statistisch beschreibt. Sie unterscheidet sich von der klassischen statistischen Mechanik allein darin, daß es nach ihr nicht mehr möglich ist, neben den statistischen auch individuelle Bewegungsgleichungen anzugeben. Hier wollen wir zeigen, wie eng die beiden statistischen Mechaniken miteinander verwandt sind. Wir gelangen so zu einer korrespondenzmäßigen Begründung der korpuskular-statistisch aufgefaßten Quantenmechanik. Es wird sich zeigen, daß die Korrespondenz, dort wo sie besteht, eine so enge ist, daß in der klassischen statistischen Mechanik und in der Quantenmechanik die nämlichen Prinzipien gelten.

Die statistische Beschreibung der Bewegung von Teilchensystemen setzt die Existenz statistischer Gesamtheiten voraus. Unter einer „Gesamtheit“ verstehen wir dabei die gedankliche Zusammenfassung von gleichartigen, aber physikalisch unabhängigen Teilchensystemen, die sich individuell ganz verschieden verhalten können, wenn nur wohldefiniert ist, welche Systeme zur Gesamtheit gehören und welche nicht. Zum Beispiel bilden die aus einem Glühfaden austretenden Elektronen, wenn man von der Wechselwirkung zwischen ihnen absehen darf, eine durch die Versuchsanordnung definierte Gesamtheit, deren Elemente allerdings nicht Teilchensysteme, sondern die Teilchen selbst sind.

¹ F. Bopp, Z. Naturf. 9a, 579 (1954), Optik 11, 255 (1954), Z. angew. Physik 6, 235 (1954).

Die Gesamtheit ist eine „statistische“, wenn die relativen Häufigkeiten, mit denen wir die verschiedenen Teilchensysteme der Gesamtheit zu vergleichbaren Zeiten in bestimmten Situationen antreffen, innerhalb der von der Statistik zugelassenen Grenzen stets dieselben sind. In diesem Fall heißen die relativen Häufigkeiten Wahrscheinlichkeiten.

Ob statistische Gesamtheiten von Teilchensystemen existieren oder nicht, das zu entscheiden, ist Sache der Erfahrung. Sowohl in der Quantenmechanik, als auch in der klassischen statistischen Mechanik ist die Annahme der Existenz statistischer Gesamtheiten wohlbegründet. Die klassische statistische Mechanik unterscheidet sich von der Quantenmechanik vor allem darin, daß in ihr auch geordnete Gesamtheiten vorkommen. Eine „geordnete“ Gesamtheit liegt vor, wenn alle Teilchensysteme der Gesamtheit genau dieselbe Bewegung ausführen. In diesem Fall ist die Bewegung determiniert. Es gibt individuelle Bewegungsgesetze, an deren statistische Herkunft man sich nicht mehr zu erinnern braucht.¹

Auch die Frage nach der Existenz geordneter Gesamtheiten läßt sich nur auf Grund von Erfahrungen beantworten. Nach der Heisenbergschen Unschärferelation ist es ausgeschlossen, in der Quantenmechanik geordnete Gesamtheiten herzustellen. Hierauf beruht der Unterschied zwischen Quantenmechanik und klassischer statistischer Mechanik.

Der Einfachheit halber betrachten wir im folgenden nur Gesamtheiten, deren Elemente aus einem Teilchen bestehen. Die Übertragung der Ergebnisse auf mehrere Teilchen macht keine wesentlichen Schwierigkeiten, so daß die Spezialisierung nicht sehr einschneidend ist.

In der klassischen Mechanik ist die Bewegung eines Teilchens bestimmt, wenn wir wissen, daß es zur Zeit t in $\mathbf{r}$ und zur Zeit t_1 in $\mathbf{r}_1$ ist. Hieraus folgt für die klassische statistische Mechanik, daß das Verhalten einer Gesamtheit zu allen Zeiten bestimmt sein muß, wenn die Wahrscheinlichkeit bekannt ist, mit der wir das Teilchen zur Zeit t an der Stelle $\mathbf{r}$ im Volumen

¹ M. Planck, „Vorträge und Erinnerungen“, Hirzel 1949, S. 285 ff. Verf. weist hier ausdrücklich auf die statistische Herkunft der deterministischen Gesetze hin.

dV und zur Zeit t_1 an der Stelle $\mathbf{r}_1$ im Volumen dV_1 antreffen. Gewöhnlich nimmt man die Zeiten t und t_1 infinitesimal benachbart an, so daß man für $\mathbf{r}_1$ zur Zeit t_1 auch die Geschwindigkeit $\mathbf{v}$ oder den Impuls $\mathbf{p}$ zur Zeit t setzen kann. Nach der klassischen Mechanik kann also eine Gesamtheit von Einzelteilchen durch die Wahrscheinlichkeit

$$(1) \quad dW = f(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t) dV d\tilde{V}$$

beschrieben werden. Darin bedeutet dV ein Volumenelement im Raum und $d\tilde{V}$ eines im Impulsraum, f ist die Wahrscheinlichkeitsdichte. Bekanntlich genügt diese der Liouvilleschen Gleichung,¹ die wir in folgender Form schreiben:

$$(2) \quad \frac{\partial f(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t)}{\partial t} = \left(\frac{\partial H}{\partial \mathbf{r}} \frac{\partial}{\partial \mathbf{p}} - \frac{\partial H}{\partial \mathbf{p}} \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}} \right) f(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t).$$

Hierin ist

$$(3) \quad H = H(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t)$$

die Hamiltonfunktion der klassischen Mechanik. Sie bestimmt die Änderung von $f(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t)$ in der Zeit.

Ausdrücklich sei betont: Die Wahrscheinlichkeitsdichte $f(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t)$ ist als Funktion von Ort und Impuls nicht unmittelbar beobachtbar. Wir können die Lage eines Teilchens im Phasenraum nur bestimmen, wenn es möglich ist, seinen Ort ständig zu beobachten, ohne seinen Lauf zu stören. Es ist hier nicht am Platze, diese Voraussetzung noch einmal zu analysieren. Wir wollen nur feststellen, daß sich Quantenmechanik und klassische statistische Mechanik an dieser Stelle trennen.

Ehe wir zur Quantenmechanik übergehen, wollen wir einige Sätze formulieren, die unmittelbar aus der Liouvilleschen Gleichung folgen bzw. aus den Voraussetzungen, die ihr zugrunde liegen. Es erleichtert die Sprechweise, wenn wir die transfinite Zahl der Punkte im Raum mit Z bezeichnen. Hiernach ist die Zahl der Punkte im Phasenraum gleich Z^2 und die der Funktionswerte von $f(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t)$ gleich $Z^2 - 1$, letzteres wegen der Nebenbedingung

$$(4) \quad \int f(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t) dV d\tilde{V} = 1.$$

¹ Vgl. etwa Cl. Schaefer, Einf. i. d. Theoretische Physik, Bd. II, S. 486, Gl. (35), W. de Gruyter 1929.

Nun zu den Sätzen: Die Bestimmung relativer Häufigkeiten im Phasenraum ist an folgende Voraussetzungen gebunden:

I. *Es ist möglich, die Lage eines Teilchens im Phasenraum festzustellen.*

Die relativen Häufigkeiten sind Wahrscheinlichkeiten, wenn wir nicht beliebige, sondern nur statistische Gesamtheiten betrachten. Voraussetzung hierzu ist:

II. *Es gibt statistische Gesamtheiten von Einteilchen-Systemen.*

Gl. (4) führt zu dem bereits erwähnten Satz:

III. *Die Zahl f der linear unabhängigen Wahrscheinlichkeiten oder der „statistischen Freiheitsgrade“ ist gleich $Z^2 - 1$:*

$$(5) \quad f = Z^2 - 1.$$

Bisher haben wir die Liouvilleschen Gleichungen noch nicht benutzt. Auf sie beziehen sich die weiteren Sätze:

IV. *Die statistischen Bewegungsgleichungen liefern lineare Transformationen der Wahrscheinlichkeiten.*

Eine lineare Transformation eines Vektors mit f Komponenten ist eine Matrix mit f^2 Elementen. Davon brauchen nicht alle unabhängig zu sein. In unserm Falle gibt es, da $H(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t)$ von denselben Argumenten abhängt wie $f(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t)$, ebensoviel Transformationsparameter wie Funktionswerte von $f(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t)$, also Z^2 . Darunter gibt es eine spezielle Hamiltonfunktion, die nach Gl. (2) beliebige Wahrscheinlichkeitsdichten unverändert läßt, nämlich $H = \text{const}$, so daß es nicht Z^2 , sondern nur $Z^2 - 1$ Bewegungstypen gibt.

V. *Die Zahl p der Bewegungstypen oder Transformationsparameter ist gleich der Zahl f der statistischen Freiheitsgrade, also gleich $Z^2 - 1$.*

$$(6) \quad p = f = Z^2 - 1.$$

Die bisherigen Sätze liegen ganz an der Oberfläche. Etwas tiefer führt nur der letzte Satz:

VI. *Die Transformationen der statistischen Bewegungsgleichungen bilden eine einfache Gruppe.*

Die Gruppeneigenschaft folgt daraus, daß die Operatoren aus Gl. (2)

$$(7) \quad L^{(e)} = \frac{\partial H^{(e)}}{\partial \mathbf{r}} \frac{\partial}{\partial \mathbf{p}} - \frac{\partial H^{(e)}}{\partial \mathbf{p}} \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}},$$

die die infinitesimalen Transformationen beschreiben, einen Lieschen Ring¹ bilden. Es ist nämlich

$$(8) \quad L' L'' - L'' L' = L.$$

Darin berechnet sich H in L aus H' in L' und H'' in L'' gemäß:

$$(9) \quad H = \frac{\partial H'}{\partial \mathbf{r}} \frac{\partial H''}{\partial \mathbf{p}} - \frac{\partial H'}{\partial \mathbf{p}} \frac{\partial H''}{\partial \mathbf{r}}.$$

Wäre die Gruppe nicht einfach, so müßte es mindestens eine Transformation geben, die mit allen anderen vertauschbar wäre². Es müßte also eine spezielle Funktion H'' geben, die, mit beliebigem H' gemäß Gl. (9) kombiniert, stets zu $H = 0$ führt. Das ist nicht der Fall. Denn für bestimmtes H' kennt man die Integrale der Gleichung

$$(10) \quad \frac{\partial H'}{\partial \mathbf{r}} \frac{\partial H''}{\partial \mathbf{p}} - \frac{\partial H'}{\partial \mathbf{p}} \frac{\partial H''}{\partial \mathbf{r}} = 0.$$

Es sind beliebige Funktionen der Konstanten der durch H' definierten Bewegung. Da es keine universellen Konstanten der Bewegung gibt, gibt es auch kein H'' , das Gl. (10) identisch in H' befriedigt.

In der Quantenmechanik müssen wir Satz I aufgeben. Zwar halten wir an der Vorstellung von Teilchen fest, die sich im Raum bewegen. Aber wir geben die Annahme preis, daß es möglich sei, Ort und Impuls gleichzeitig zu bestimmen. Darum treten an die Stelle der Wahrscheinlichkeiten im Phasenraum die im Ortsraum. An die Stelle von Satz I tritt der modifizierte Satz:

I. Nur den Ort der Teilchen können wir beobachten.*

Wir könnten hier noch einschalten: „... oder nur den Impuls...“; denn es kommt allein darauf an, daß Ort und Impuls

¹ S. Lie, Vorlesungen über kontinuierliche Gruppen, herausgeg. v. G. Scheffers, Leipzig 1893.

² G. Racah, Group theory and spectroscopy, S. 11, Lectures given at the Institute for Advanced Study, Princeton 1951.

nicht zugleich beobachtbar sind. Doch ist der Impuls in der Quantenmechanik wie in der klassischen Mechanik eine abgeleitete Größe, so daß wir in den Grundgesetzen noch nicht von ihm zu sprechen brauchen.

Die übrigen römisch numerierten Sätze, also die Sätze II–VI, gelten in der Quantenmechanik wörtlich genau so wie in der klassischen statistischen Mechanik. Sie bestimmen sogar zusammen mit I* die Quantenmechanik vollständig. Die Korrespondenz zwischen Quantenmechanik und klassischer statistischer Mechanik ist also eine überraschend enge. Wir möchten geradezu, einen Ausdruck v. Weizsäckers leicht variierend, von der *Persistenz der Grundgesetze der klassischen statistischen Mechanik*¹ sprechen.

Ehe wir diese Behauptung beweisen, wollen wir das Problem zu einem finiten machen. Zu diesem Behufe betrachten wir nur ein endliches Raumgebiet, welches aber so groß gewählt sei, daß außerhalb praktisch keine Teilchen der Gesamtheit vorhanden sind. Dieses Gebiet teilen wir lückenlos und, ohne daß Überschneidungen vorkommen, in sehr kleine endliche Zellen gleicher Größe. Ihre Anzahl Z ist also nicht mehr transfinit. Doch muß sie im allgemeinen außerordentlich groß sein, wenn die Genauigkeit der Darstellung die der Beobachtung nicht unterschreiten soll. Tatsächlich spielen sich alle Beobachtungen in einem solchen finiten Zellenraum ab. Der Übergang zur kontinuierlichen Darstellung ist stets eine Idealisierung. Hieraus folgt, daß jede aus der Beobachtung ableitbare Kontinuumstheorie vom Finiten her verständlich sein muß, so daß gegen die Methode, den Beweis im Finiten zu führen, keine Bedenken bestehen.

Der Beweis zerfällt in zwei Teile. Zunächst formulieren wir die statistischen Bewegungsgleichungen, so wie sie unmittelbar aus den oben angegebenen Sätzen folgen. Nachher müssen wir sie in die übliche Form der Quantenmechanik transformieren.

Numerieren wir die Zellen in beliebiger Reihenfolge mit $n = 1, 2, \dots, Z$, so können wir die nach I* und II existierenden Wahrscheinlichkeiten, ein Teilchen zur Zeit t in den verschiede-

¹ C. F. v. Weizsäcker, Das Weltbild der Physik, Hirzel 1944, S. 81, Zeile 25.

nen Zellen antreffen, mit $w_n(t)$ bezeichnen. Für diese Wahrscheinlichkeiten gilt analog zu Gl. (4), da die Zellen den ganzen Raum einfach überdecken:

$$(11) \quad \sum_{n=1}^Z w_n(t) = 1.$$

Nach Satz IV müssen sich diese Wahrscheinlichkeiten im Laufe der Zeit linear ändern. Infinitesimal gesprochen müssen darum die Wahrscheinlichkeiten w_n einem System linearer Differentialgleichungen genügen. Sei dessen Ordnung k , so lautet es:

$$(12) \quad \frac{d^k w_m(t)}{dt^k} = \left(\sum_{n=1}^Z \sum_{\varrho=0}^{k-1} A_{mn}^{(\varrho)} \frac{d^\varrho}{dt^\varrho} \right) w_n(t).$$

Die Ordnung k ist hier noch unbestimmt. Doch folgt sie aus Satz III. Da die Lösung einer Differentialgleichung k -ter Ordnung erst bestimmt ist, wenn wir in einem Augenblick neben den $Z - 1$ unabhängigen Funktionen w_n noch ihre Zeitableitungen bis zur Ordnung $k - 1$ kennen, ist die Zahl der Anfangsbedingungen und damit die Zahl der Freiheitsgrade gleich $k(Z - 1)$. Diese soll nach Satz III mit $Z^2 - 1$ übereinstimmen. Somit ist die Ordnung des obigen Systems von Differentialgleichungen:

$$(13) \quad k = Z + 1.$$

Ähnlich wie wir in der Theorie der Siebketten die Differentialgleichung

$$\ddot{\varphi} = A\varphi + B\dot{\varphi}$$

durch die Matrixgleichung

$$\frac{d}{dt} \begin{pmatrix} \varphi \\ \dot{\varphi} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0, & 1 \\ A, & B \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \varphi \\ \dot{\varphi} \end{pmatrix}$$

ersetzen können, schreiben wir für Gl. (12)

$$(14) \quad \dot{W} = TW.$$

Darin ist W eine einspaltige Matrix, deren Elemente die Wahrscheinlichkeiten w_n und ihre Zeitableitungen bis zur Z -ten sind:

$$\begin{aligned} (W_1 \dots W_{Z-1}) &= (w_1 \dots w_{Z-1}), \quad (W_Z \dots W_{2Z-2}) = (\dot{w}_1 \dots \dot{w}_{Z-1}), \\ &\dots (W_{Z^2-Z+1} \dots W_{Z^2-1}) = (w_1^{(Z)} \dots w_{Z-1}^{(Z)}). \end{aligned}$$

Die Zahl der Elemente dieser Spaltungsmatrix ist also gleich der Zahl f der statistischen Freiheitsgrade. W ist hiernach eine vektorartige Größe, die den Zustand der Gesamtheit beschreibt; es ist der *Zustandsvektor der Gesamtheit*.

T ist eine quadratische Matrix von f Zeilen und Spalten. Sie beschreibt die Änderung des Zustandsvektors pro Zeiteinheit. Darum spielt sie eine ähnliche Rolle wie die Hamiltonfunktion in der Liouvilleschen Gleichung. Nach den Sätzen V und VI bilden sämtliche *das Geschehen beschreibende Matrizen* T eine f -parametrische einfache Gruppe im f -dimensionalen Raum.

Nun sind die einfachen Gruppen in endlich-dimensionalen Räumen vollständig bekannt.¹ Da unsere Zelleneinteilung willkürlich ist, kommen hier nur solche einfachen Gruppen in Frage, die für beliebige Z brauchbar sind. Damit scheiden von vornherein die singulären² einfachen Gruppen aus. Es bleiben nur übrig: Die lineare unimodulare Gruppe (und die damit isomorphe unitäre unimodulare Gruppe), die orthogonale Gruppe und die symplektische Gruppe. Im m -dimensionalen Darstellungsraum haben die beiden ersten Gruppen die Parameterzahl $m^2 - 1$ und die beiden letzten $m(m - 1)/2$, wobei die symplektische Gruppe nur für gerade m definiert ist.

Auch die orthogonale und die symplektische Gruppe kommen nicht in Frage. Denn die erforderliche Parameterzahl ist $Z^2 - 1$. Es müßte also die Gleichung

$$\frac{m(m-1)}{2} = Z^2 - 1$$

für beliebige Z „diophantisch“ lösbar sein. Das ist aber nicht der Fall; denn die Wurzel der quadratischen Gleichung für m ,

$$m = \frac{1}{2} (1 + \sqrt{8Z^2 - 7}),$$

ist im allgemeinen nicht ganzzahlig.

Im Falle der linearen und unitären unimodularen Gruppe lautet die diophantische Gleichung

$$m^2 - 1 = Z^2 - 1.$$

¹ H. Weyl, „Classical Groups“, Princeton 1939.

² l. c. 1, S. 7.

Ihre Lösung ist trivial; es ist

$$(15) \quad m = Z.$$

Für die statistischen Bewegungsgleichungen kommen also nur die beiden folgenden isomorphen Gruppen in Frage:

1. die Gruppe der unitären-unimodularen Transformationen im R_Z ,
2. die Gruppe der linearen-unimodularen Transformationen im R_Z .

Hier sind zunächst die abstrakten Gruppen gemeint. Die unitären und affinen unimodularen Transformationen U und A im R_Z , die den Bedingungen

$$(16) \quad U^+U = 1, \quad \det U = 1 \quad \text{bzw.} \quad A^* = A, \quad \det A = 1$$

genügen, kommen primär nicht in Betracht, weil wir nicht eine Z -dimensionale, sondern eine f -dimensionale Darstellung jeder dieser Gruppen brauchen. Nun sind die höherdimensionalen Darstellungen der unitären und der linearen Gruppe Tensorabbildungen¹ und hängen über die Definition der Tensoren mit den Transformationen (16) zusammen. Speziell $Z^2 - 1$ Komponenten haben die hermiteschen bzw. die reellen gemischten ko-kontravarianten Tensoren zweiter Stufe mit der Spur 1. Geeignet gewählte Linearkombinationen der Komponenten des Zustandsvektors W der Gesamtheit müssen hiernach einen Tensor der einen oder anderen Art bilden, einen hermiteschen im unitären oder einen reellen im affinen Raum.

Zum Schluß werden nur die unitären Transformationen hermitescher Matrizen von der Spur 1 übrigbleiben. Die affinen Transformationen der reellen Matrizen mit der Spur 1 scheiden aus, weil mit ihnen keine positiv definiten Wahrscheinlichkeiten gebildet werden können. Wir wollen darum zunächst nur von den unitären Transformationen sprechen und erst weiter unten auf die affinen zurückkommen.

¹ H. Weyl, Math. Z. S. 23, 272 (1925); 24, 328 (1925); 24, 377 (1925); hier l. c. 23, Kap. 1.

Die hermiteschen Matrizen mit der Spur 1 bezeichnen wir mit P . Es sind die v. Neumannschen statistischen Matrizen¹ ($P = \text{probability matrix}$), die den Bedingungen genügen:

$$(17) \quad P^+ = P, \quad \text{Spur } P = 1.$$

Für die statistischen Bewegungsgleichungen erhält man die unitären Transformationen

$$(18) \quad P(t) = U(t, t_0) P(t_0) U^+(t, t_0).$$

Die infinitesimalen Transformationen haben die Form:

$$(19) \quad i\hbar \dot{P}(t) = H(t) P(t) - P(t) H(t).$$

Darin ist H die durch die Gleichung

$$(20) \quad H = i\hbar \dot{U}(t, t_0) U^+(t, t_0) = -i\hbar U(t, t_0) \dot{U}^+(t, t_0) = H^+$$

definierte hermitesche Matrix. Die Gl. (19) und (20) sind in integraler und differentieller Schreibweise die vollständigen Bewegungsgleichungen der Quantenmechanik. H ist der Schrödingeroperator.

Wir müssen noch die Frage beantworten, wie sich die Elemente der statistischen Matrix aus den Komponenten des Zustandsvektors berechnen. Von vorneherein steht fest, daß die Antwort nicht eindeutig sein kann. Es muß noch die Freiheit bleiben, die sich in der Transformationstheorie der Quantenmechanik ausdrückt. Haben wir willkürlich eine bestimmte Zuordnung gewählt, die zu Gl. (19) führt, so können wir mit jeder zeitlich konstanten unitären Transformation S ($S^+ S = 1$) zu einer äquivalenten Darstellung gelangen, die ebenfalls Gl. (19) befriedigt. Wir brauchen nur P und U durch

$$(21) \quad P' = S P S^+ \quad \text{und} \quad U' = S U S^+$$

zu ersetzen und H entsprechend durch

$$(21a) \quad H' = S H S^+.$$

¹ J. v. Neumann, Mathematische Grundlagen der Quantenmechanik, Springer 1932, S. 157 ff.; bei J. v. N. steht U statt P .

G. Molière u. M. Delbrück, S.-B. preuß. Akad. Wiss., physik.-math. Kl. 1936, Nr. 1.

Eine offensichtliche Bindung, der die Zuordnung unterworfen ist, besteht darin, daß die Spur von P und die Summe der Wahrscheinlichkeiten w_n gleich 1 sein müssen. Man kann dieser Forderung z. B. dadurch Rechnung tragen, daß man verlangt: Zu allen Zeiten stehen in der Diagonale von P die Wahrscheinlichkeiten w_n :

$$(22) \quad P(t) = \begin{pmatrix} w_1(t) & & & * \\ & w_2(t) & & \\ & & \ddots & \\ * & & & w_n(t) \end{pmatrix}.$$

Die übrigen Elemente sind Linearkombinationen derselben Wahrscheinlichkeiten und ihrer Z ersten Ableitungen nach t .

Wenn wir U als bekannt voraussetzen, genügt Gl. (22) zur vollständigen Bestimmung von P . Zunächst können wir in jedem Augenblick $w_n(t)$ aus P berechnen unter Heranziehung der idempotenten Matrizen:

$$(23) \quad F_1 = \begin{pmatrix} 1 & & & 0 \\ & 0 & & \\ & & 0 & \\ 0 & & & 0 \end{pmatrix}, \quad F_2 = \begin{pmatrix} 0 & & & 0 \\ & 1 & & \\ & & 0 & \\ 0 & & & 0 \end{pmatrix} \dots$$

$$F_Z = \begin{pmatrix} 0 & & & 0 \\ & 0 & & \\ & & 0 & \\ 0 & & & 1 \end{pmatrix},$$

die den Gleichungen

$$(24) \quad F_m^+ = F_m, \quad F_m F_n = F_m \delta_{mn}, \quad \sum_{m=1}^Z F_m = 1$$

genügen. Denn es gelten die Gleichungen:

$$(25) \quad w_n(t) = \text{Spur} (F_n P(t)),$$

und zwar zu allen Zeiten. Nun ist es möglich, $w_n(t')$ auch aus $P(t)$ zu berechnen. Wenn U die Transformation ist, die gemäß

Gl. (19) zwischen t und t' vermittelt, gilt:

$$(26) \quad w_n(t') = \text{Spur}(F_n P(t')) = \text{Spur}(F_n U P(t) U^+) = \text{Spur}(F'_n P(t)).$$

Darin sind die Matrizen F'_n durch die Gleichungen

$$(27) \quad F'_n = U^+ F_n U$$

definiert. Sie bilden einen idempotenten Satz, der wie der der Matrizen F_n den Gl. (25) genügt. Nach Gl. (27) gibt es ebensoviel linear unabhängige idempotente Matrizen wie Transformationen U , also $Z^2 - 1$. Umgekehrt sind zwei beliebige idempotente Matrizen durch unitäre Transformationen verbunden, können also durch eine Bewegung der Gesamtheit auseinander hervorgehen und definieren darum eine Wahrscheinlichkeit. Alle irgendwie bestimmten Ortswahrscheinlichkeiten, auch die mittels Meßanordnungen gefundenen, haben also die Form:

$$(28) \quad w = \text{Spur}(FP), \quad F^2 = F.$$

Auf diese Gleichung stützt sich daher die quantenmechanische Definition solcher physikalischer Größen, die wie Impuls, Energie usw. nicht direkter Beobachtung zugänglich sind und erst aus Ortsbeobachtungen erschlossen werden. Auf diesen Punkt wollen wir hier nicht eingehen.

Aus Gl. (28) folgt sofort die Bedingung, unter der die Wahrscheinlichkeiten positiv definiert sind. Jede hermitesche idempotente Matrix hat die Form

$$(29) \quad F_{\mu\nu} = u_\mu u_\nu^*, \quad \sum_\nu u_\nu u_\nu^+ = 1,$$

so daß Gl. (28) auch folgendermaßen geschrieben werden kann:

$$(30) \quad w = u^+ P u, \quad u^+ u = 1.$$

Das ist eine hermitesche Form. Sie ist positiv definit, wenn die Matrix P nur positive Eigenwerte hat. Man muß also die Zuordnung zwischen W und P so wählen, daß dies der Fall ist, und man kann es tun, weil die Eigenwerte von P nach Gl. (18) Konstante der Bewegung sind.

Das sieht zunächst so aus, als ob man mit reellen Matrizen Q an Stelle von P und den affinen Transformationen

$$Q(t) = A Q(t_0) A^{-1}$$

an Stelle von Gl. (18) ebenfalls zum Ziele käme. Auch hier sind die Eigenwerte von Q Konstante der Bewegung. Auch hier können wir die Q wie P in Gl. (22) definieren, so daß für die Wahrscheinlichkeiten die Gl. (28) mit Q statt P gelten. Aber reelle idempotente Matrizen ohne Symmetrieeigenschaften haben die Form:

$$F_{\mu\nu} = u_\mu v_\nu, \quad \sum_\nu u_\nu v_\nu = 1,$$

so daß die zu Gl. (30) analoge Gleichung lautet:

$$w = v^T F u, \quad v^T u = 1.$$

Das ist eine Bilinearform, die im allgemeinen keineswegs positiv definit ist. Nur wenn wir $u = v$ setzen, wenn an die Stelle der Bilinearformen quadratische Formen treten, liefern die Matrizen Q mit positiven Eigenwerten positiv definite Werte für die Wahrscheinlichkeiten. Dadurch wird aber sowohl die Zahl der statistischen Freiheitsgrade herabgesetzt, weil nur symmetrische Matrizen in Betracht kommen, als auch die Zahl der Parameter, weil nicht beliebige affine Transformationen, sondern nur orthogonale die Symmetrie von Q nicht stören. Damit scheidet die affine Gruppe aus. Es bleibt höchstens die orthogonale Gruppe übrig. Diese fügt sich aber nicht den Sätzen III und V. Sie kann im übrigen nicht nur als Untergruppe der affinen, sondern auch als Untergruppe der unitären Gruppe betrachtet werden.

In üblicher Weise kommen wir von der Transformation der statistischen Matrix zur Schrödingergleichung. Die Eigenwerte von P sind zeitlich konstant, nicht kleiner als 0 und ihre Summe ist gleich 1. Ein extremer Fall liegt also vor, wenn einer der Eigenwerte gleich 1 ist und wenn demzufolge die übrigen gleich 0 sind. Man nennt solche Gesamtheiten „rein“ und spricht bei beliebigen Gesamtheiten von „Gemengen reiner Gesamtheiten“. Im reinen Fall ist

$$(31) \quad P^2 = P, \quad P_{\mu\nu} = \Phi_\mu \Phi_\nu^*$$

so daß Gl. (28) die bekannte Schrödingersche Form annimmt.

$$(32) \quad w = \Phi^+ F \Phi.$$

An die Stelle von Gl. (18) und Gl. (19) treten die Transformation

$$(33) \quad \Phi(t) = U(t, t_0) \Phi(t_0)$$

und die Schrödingergleichung

$$(33a) \quad i\hbar \dot{\Phi}(t) = H(t) \Phi(t).$$

Die Φ spielen die Rolle von Vektoren im Hilbertraum, der hier allerdings nur endlich viele Dimensionen hat. Linearkombinationen zweier Lösungen der Schrödingergleichung ergeben wieder eine, die eine reine Gesamtheit beschreibt. Denn wären nicht alle Linearkombinationen physikalisch möglich, so würde Satz III nicht gelten. Die Korrespondenz wäre weniger eng als die der Quantenmechanik.

Gelegentlich hat man versucht,¹ durch Preisgabe des Satzes, daß beliebige Superpositionen vom physikalisch-sinnvollen Hilbertvektoren wiederum physikalisch-sinnvolle Vektoren sein sollen, die Möglichkeit einer determinierten Darstellung zu retten. Hier hat sich gezeigt, daß dies, wenn überhaupt, nur unter Abänderung klassischer Vorstellungen an anderer Stelle möglich ist. Solchen Bemühungen steht jedoch entgegen, daß die Abänderung von Satz I, die offensichtlich allein zur Begründung der Quantenmechanik genügt, der tatsächlichen Situation des Beobachters aufs beste angemessen ist. Planck² hat schon früh darauf hingewiesen, daß Satz I eine sehr einschneidende und durchaus nicht plausible Hypothese enthält.

¹ Fack, unveröffentlichter Vortrag im Mathematischen Seminar der Universität Hamburg; s. H. Sauer, „Der Begriff der Wahrscheinlichkeit“ in „Das Problem der Gesetzlichkeit“, herausgeg. v. d. J.-Jungius-Gesellschaft, Hamburg, R. Meiner 1949.

² l. c. 1, S. 2.