

Werk

Titel: Mathematische Grundlagen der Quantenmechanik

Autor: VonNeumann, John

Verlag: Springer

Ort: Berlin [u.a.]

Jahr: 1932

Kollektion: Mathematica

Digitalisiert: Niedersächsische Staats- und Universitätsbibliothek Göttingen

Werk Id: PPN379400774

PURL: <http://resolver.sub.uni-goettingen.de/purl?PPN379400774>

OPAC: <http://opac.sub.uni-goettingen.de/DB=1/PPN?PPN=379400774>

Terms and Conditions

The Goettingen State and University Library provides access to digitized documents strictly for noncommercial educational, research and private purposes and makes no warranty with regard to their use for other purposes. Some of our collections are protected by copyright. Publication and/or broadcast in any form (including electronic) requires prior written permission from the Goettingen State- and University Library.

Each copy of any part of this document must contain these Terms and Conditions. With the usage of the library's online system to access or download a digitized document you accept the Terms and Conditions.

Reproductions of material on the web site may not be made for or donated to other repositories, nor may be further reproduced without written permission from the Goettingen State- and University Library.

For reproduction requests and permissions, please contact us. If citing materials, please give proper attribution of the source.

Contact

Niedersächsische Staats- und Universitätsbibliothek Göttingen
Georg-August-Universität Göttingen
Platz der Göttinger Sieben 1
37073 Göttingen
Germany
Email: gdz@sub.uni-goettingen.de

DIE GRUNDLEHREN DER
MATHEMATISCHEN
WISSENSCHAFTEN

IN EINZELDARSTELLUNGEN MIT BESONDERER
BERÜCKSICHTIGUNG DER ANWENDUNGSGEBIETE

GEMEINSAM MIT

W. BLASCHKE
HAMBURG

M. BORN
GÖTTINGEN

C. RUNGE†
GÖTTINGEN

HERAUSGEGEBEN VON

R. COURANT
GÖTTINGEN

BAND XXXVIII

MATHEMATISCHE GRUNDLAGEN
DER QUANTENMECHANIK

VON

JOHANN V. NEUMANN



BERLIN
VERLAG VON JULIUS SPRINGER

1932

MATHEMATISCHE GRUNDLAGEN DER QUANTENMECHANIK

VON

JOHANN v. NEUMANN

MIT 4 ABBILDUNGEN



BERLIN
VERLAG VON JULIUS SPRINGER
1932

ALLE RECHTE, INSBESONDERE DAS DER ÜBERSETZUNG
IN FREMDE SPRACHEN, VORBEHALTEN.

COPYRIGHT 1932 BY JULIUS SPRINGER IN BERLIN.

PRINTED IN GERMANY.

DEM ANDENKEN MEINES VATERS

GEWIDMET

Inhaltsverzeichnis.

| | Seite |
|---|------------|
| Einleitung | 1 |
| I. Einleitende Betrachtungen | 4 |
| 1. Die Entstehung der Transformationstheorie | 4 |
| 2. Die ursprünglichen Formulierungen der Quantenmechanik | 5 |
| 3. Gleichwertigkeit der zwei Theorien: Die Transformationstheorie | 10 |
| 4. Gleichwertigkeit der zwei Theorien: Der Hilbertsche Raum. | 15 |
| II. Allgemeines über den abstrakten Hilbertschen Raum | 18 |
| 1. Charakterisierung des Hilbertschen Raumes | 18 |
| 2. Geometrie des Hilbertschen Raumes | 24 |
| 3. Exkurs über die Bedingungen A.-E. | 31 |
| 4. Abgeschlossene Linearmannigfaltigkeiten | 38 |
| 5. Operatoren im Hilbertschen Raume | 46 |
| 6. Das Eigenwertproblem | 53 |
| 7. Fortsetzung | 56 |
| 8. Orientierende Betrachtungen über das Eigenwertproblem. | 62 |
| 9. Exkurs über die Eindeutigkeit und Lösbarkeit des Eigenwertproblems | 75 |
| 10. Vertauschbare Operatoren | 88 |
| 11. Die Spur | 93 |
| III. Die quantenmechanische Statistik | 101 |
| 1. Die statistischen Aussagen der Quantenmechanik | 101 |
| 2. Die statistische Deutung | 107 |
| 3. Gleichzeitige Meßbarkeit und Meßbarkeit im allgemeinen | 110 |
| 4. Unbestimmtheitsrelationen. | 121 |
| 5. Die Projektionsoperatoren als Aussagen. | 130 |
| 6. Lichttheorie | 135 |
| IV. Deduktiver Aufbau der Theorie | 157 |
| 1. Prinzipielle Begründung der statistischen Theorie | 157 |
| 2. Beweis der statistischen Formeln | 167 |
| 3. Folgerungen aus Experimenten | 173 |
| V. Allgemeine Betrachtungen | 184 |
| 1. Messung und Reversibilität | 184 |
| 2. Thermodynamische Betrachtungen | 191 |
| 3. Reversibilitäts- und Gleichgewichtsfragen | 202 |
| 4. Die makroskopische Messung | 212 |
| VI. Der Meßprozeß. | 222 |
| 1. Formulierung des Problems | 222 |
| 2. Zusammengesetzte Systeme | 225 |
| 3. Diskussion des Meßprozesses | 233 |
| Anmerkungen | 238 |



Einleitung.

Der Gegenstand dieses Buches ist die einheitliche, und, soweit als möglich und angebracht, mathematisch einwandfreie Darstellung der neuen Quantenmechanik, die im Laufe der letzten Jahre eine in ihren wesentlichen Teilen voraussichtlich definitive Form gewonnen hat: die sog. „Transformationstheorie“. Dabei soll das Hauptgewicht auf die allgemeinen und prinzipiellen Fragen, die im Zusammenhange mit dieser Theorie entstanden sind, gelegt werden. Insbesondere sollen die schwierigen und vielfach noch immer nicht restlos geklärten Interpretationsfragen näher untersucht werden. Besonders das Verhältnis der Quantenmechanik zur Statistik und zur klassischen statistischen Mechanik ist hierbei von Bedeutung. Von der Erörterung der Anwendungen der quantenmechanischen Methoden auf Einzelprobleme sowie einer Darlegung der einzelnen spezielleren, von der allgemeinen Theorie abgezwigten Theorien werden wir dagegen in der Regel absehen — wenigstens soweit dies ohne Gefahr für das Verständnis der allgemeinen Zusammenhänge möglich ist. Dies erscheint um so mehr geboten, als über diese Dinge mehrere ausgezeichnete Darstellungen existieren bzw. im Erscheinen sind¹.

Andererseits wird eine Darstellung der für die Zwecke dieser Theorie notwendigen mathematischen Hilfsmittel gegeben, d. h. eine Theorie des Hilbertschen Raumes und der sog. Hermiteschen Operatoren desselben. Dabei ist ein genaues Eingehen auch auf unbeschränkte Operatoren notwendig, d. h. eine Erweiterung der Theorie über ihren klassischen (von HILBERT und E. HELLINGER, F. RIESZ, E. SCHMIDT, O. TOEPLITZ geschaffenen) Umfang hinaus. Zur Methodik dieser Behandlungsweise sei Folgendes gesagt: es soll in der Regel mit den Operatoren selbst (die physikalische Größen repräsentieren) gerechnet werden, und nicht mit den Matrizen, welche erst nach Einführung eines (speziellen und willkürlichen) Koordinatensystems im Hilbertschen Raume aus ihnen entstehen. Diese „koordinatenfreie“, d. h. invariante, und stark geometrisch orientierte Behandlungsweise ist mit beträchtlichen formalen Vorteilen verbunden.

Eine an Kürze und Eleganz kaum zu überbietende Darstellung der Quantenmechanik, die ebenfalls von invariantem Charakter ist, hat DIRAC in mehreren Abhandlungen sowie in seinem kürzlich erschie-

nenen Buche gegeben². Daher ist es vielleicht angebracht, für unsere, von der genannten wesentlich abweichende, Methodik hier einige Argumente beizubringen.

Die erwähnte, infolge ihrer Durchsichtigkeit und Eleganz heute in einen großen Teil der quantenmechanischen Literatur übergegangene Methodik von DIRAC wird den Anforderungen der mathematischen Strenge in keiner Weise gerecht — auch dann nicht, wenn diese natürlicher- und billigerweise auf das sonst in der theoretischen Physik übliche Maß reduziert werden. So wird z. B. konsequent an der Fiktion festgehalten, daß jeder selbstadjungierte Operator auf die Diagonalform gebracht werden kann, was bei denjenigen Operatoren, für die dies tatsächlich nicht der Fall ist, das Einführen „uneigentlicher“ Funktionen mit selbstwidersprechenden Eigenschaften notwendig macht. Ein solches Einschalten mathematischer „Fiktionen“ ist u. U. selbst dann unvermeidlich, wenn es sich nur darum handelt, das Resultat eines anschaulich definierten Versuches numerisch zu berechnen. Dies wäre kein Einwand, wenn diese in den heutigen Rahmen der Analysis nicht passenden Begriffsbildungen für die neue physikalische Theorie wirklich wesentlich wären. So wie die Newtonsche Mechanik zunächst das Entstehen des in seiner damaligen Form zweifellos selbstwidersprechenden Infinitesimalkalküls mit veranlaßte, würde die Quantenmechanik einen Neuaufbau unserer „Analysis der unendlich vielen Variablen“ nahelegen — d. h. der mathematische Apparat müßte geändert werden, und nicht die physikalische Theorie. Das ist aber keineswegs der Fall, es soll vielmehr gezeigt werden, daß die Transformationstheorie auf eine ebenso klare und einheitliche Weise auch mathematisch einwandfrei begründet werden kann. Dabei ist zu betonen, daß der korrekte Aufbau nicht etwa aus einer mathematischen Präzisierung und Explizierung der Diracschen Methode besteht, sondern daß er ein von vornherein abweichendes Vorgehen nötig macht, nämlich das Anlehnen an die Hilbertsche Spektraltheorie der Operatoren.

Bei der Analyse der prinzipiellen Fragen wird insbesondere gezeigt werden, wie die statistischen Formeln der Quantenmechanik aus einigen qualitativen Grundannahmen hergeleitet werden können. Ferner wird die Frage ausführlich diskutiert, ob es möglich ist, den statistischen Charakter der Quantenmechanik auf eine Mehrdeutigkeit (d. h. Unvollständigkeit) unserer Naturbeschreibung zurückzuführen: diese Erklärung entspräche ja am besten dem allgemeinen Prinzip, wonach jede Wahrscheinlichkeitsaussage aus der Unvollständigkeit unserer Kenntnisse entsteht. Diese Erklärung „durch verborgene Parameter“ sowie eine andere, damit verwandte, die die „verborgenen Parameter“ dem Beobachter und nicht dem beobachteten System zuschreibt, ist auch mehrfach vorgeschlagen worden, Indessen zeigt es sich, daß dies kaum in befriedigender Weise gelingen kann, genauer: eine solche Erklärung

ist mit gewissen qualitativen Grundpostulaten der Quantenmechanik unvereinbar³.

Das Verhältnis dieser Statistik zur Thermodynamik wird auch betrachtet. Eine nähere Untersuchung zeigt, daß die aus der klassischen Mechanik wohlbekannten Schwierigkeiten, die mit den zur Begründung der Thermodynamik erforderlichen „Unordnungsannahmen“ zusammenhängen, hier behoben werden können⁴.

I. Einleitende Betrachtungen.

1. Die Entstehung der Transformationstheorie.

Es ist hier nicht der Ort, auf die großen Erfolge hinzuweisen, die die Quantentheorie im Laufe der Periode 1900 bis 1925 errungen hat, einer Entwicklung, die durch die Namen PLANCK, EINSTEIN und BOHR beherrscht ist⁵. Am Schluß dieses Entwicklungsganges stand es klar und so gut wie unbezweifelbar fest, daß alle Elementarprozesse, d. h. alles Geschehen in atomar-molekularer Größenordnung, durch die „diskontinuierlichen“ Gesetze der Quanten geregelt werden. Nach fast allen Richtungen lagen auch quantitative quantentheoretische Methoden vor, die meistens mit der Erfahrung gut oder leidlich übereinstimmende Ergebnisse lieferten. Und was prinzipiell von großer Bedeutung war: die Gedankenwelt der theoretisch-physikalischen Forschung hatte die Idee rezipiert, daß das in der wahrgenommenen makroskopischen Welt herrschende Prinzip der Kontinuität („*natura non facit saltus*“), bloß durch einen Mittelungsprozeß in der ihrem Wesen nach diskontinuierlichen Welt vorgetäuscht wird — dadurch, daß der Mensch meistens nur die Summe vieler Quadrillionen von Elementarprozessen auf einmal apperzipiert, so daß das alles nivellierende Gesetz der großen Zahlen die wahre Natur der einzelnen Prozesse völlig verschleiert.

Trotzdem lag zur genannten Zeit kein mathematisch-physikalisches System der Quantentheorie vor, das einheitlich alles bis dahin Bekannte umfaßt hätte; geschweige denn eins, das die monumentale Geschlossenheit des (durch die Quantenerscheinungen gesprengten) Systems Mechanik-Elektrodynamik-Relativitätstheorie hätte aufweisen können. Trotz des offenbar gerechtfertigten Anspruchs der Quantentheorie auf Universalität fehlte der dazu notwendige formale und gedankliche Apparat, sie war ein schwer entwirrbares Gemisch wesentlich verschiedener, unabhängiger, unhomogener und teilweise einander widersprechender Ansätze. Die auffallendsten Punkte waren: das halb in die klassische Mechanik und Elektrodynamik gehörende Korrespondenzprinzip (das aber bei der schließlichen Aufklärung der Dinge eine entscheidende Rolle spielte), und die selbstwidersprechende Duplizität der Natur des Lichtes (Wellen und Korpuskeln, vgl. Anm.⁵ und Anm.¹⁴⁸). Schließlich die Existenz ungequantelter (aperiodischer) und gequantelter (periodischer bzw. mehrfachperiodischer) Bewegungen⁶.

Das Jahr 1925 brachte die Auflösung. Ein Ansatz von HEISENBERG konnte von BORN, HEISENBERG, JORDAN, und kurz nachher von DIRAC

zu einem neuen System der Quantentheorie ausgebaut werden, dem ersten geschlossenen System der Quantentheorie, das die Physik besessen hat. Um wenig später fand SCHRÖDINGER von einem ganz anderen Ausgangspunkte her die „Wellenmechanik“, die das gleiche leistete und sich bald als mit dem Heisenberg-Born-Jordanschen und Diracschen System gleichwertig (wenigstens im mathematischen Sinne, vgl. I. 3, 4) herausstellte⁷. Die beiden Theorien konnten auf Grund der Bornschen statistischen Deutung der quantentheoretischen Naturbeschreibung⁸ von DIRAC und JORDAN zu einer Theorie, der „Transformationstheorie“, verschmolzen werden⁹, in der sich beide ergänzend vereinigen und eine mathematisch besonders einfache Beherrschung der physikalischen Fragen ermöglichen.

Es sei noch erwähnt (obwohl es nicht mehr zu unserem eigentlichen Gegenstande gehört), daß nun, nachdem noch GOUDSMIT und UHLENBECK das magnetische und Drehmoment des Elektrons entdeckt hatten, fast alle Schwierigkeiten der früheren Quantentheorie schwanden, so daß wir heute im Besitz eines so gut wie restlos befriedigenden mechanischen Systems sind. Freilich ist die eingangs erwähnte große Einheit mit der Elektrodynamik und Relativitätstheorie noch nicht wiedergewonnen, aber zumindest ist eine allgemeingültige Mechanik da, in die sich die Quantengesetzmäßigkeiten mit selbstverständlicher Notwendigkeit einfügen, und die den größten Teil unserer Erfahrungen befriedigend erklärt¹⁰.

2. Die ursprünglichen Formulierungen der Quantenmechanik.

Um eine vorläufige Orientierung zu gewinnen, wollen wir die prinzipiellen Fragestellungen der Heisenberg-Born-Jordanschen „Matrizenmechanik“ und der Schrödingerschen „Wellenmechanik“ kurz darlegen.

In beiden Theorien ist zunächst ein klassisch-mechanisches Problem gegeben, das durch eine Hamiltonsche Funktion $H(q_1, \dots, q_k, p_1, \dots, p_k)$ charakterisiert ist. (Dies bedeutet, wie man in den Lehrbüchern der Mechanik näher ausgeführt findet, bekanntlich folgendes: Das System habe k Freiheitsgrade, d. h. sein jeweiliger Zustand ist durch die Angabe der Zahlenwerte von k Koordinaten q_1, \dots, q_k festzulegen. Die Energie ist eine gegebene Funktion der Koordinaten und ihrer zeitlichen Ableitungen:

$$E = L(q_1, \dots, q_k, \dot{q}_1, \dots, \dot{q}_k),$$

und zwar in der Regel quadratisch in den Ableitungen $\dot{q}_1, \dots, \dot{q}_k$. Durch

$$p_1 = \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_1}, \dots, p_k = \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_k}$$

werden die „konjugierten Impulse“ p_1, \dots, p_k der Koordinaten q_1, \dots, q_k eingeführt — welche im Falle der obigen Annahme über L von den

$\dot{q}_1, \dots, \dot{q}_k$ linear abhängen. Allenfalls können wir aus L die $\dot{q}_1, \dots, \dot{q}_k$ mit Hilfe der p_1, \dots, p_k eliminieren, so wird:

$$E = L(q_1, \dots, q_k, \dot{q}_1, \dots, \dot{q}_k) = H(q_1, \dots, q_k, p_1, \dots, p_k).$$

Dieses H ist die Hamiltonsche Funktion.) In beiden Theorien möchte man nun aus dieser Hamiltonschen Funktion möglichst viel über das wahre, d. h. quantentheoretische Verhalten dieses Systems erfahren¹¹ — in erster Linie also die möglichen Energieniveaus bestimmen, dann die dazugehörigen „stationären Zustände“ kennenlernen, ihre „Übergangswahrscheinlichkeiten“ berechnen usw.¹².

Die Anweisung, die die Matrizen­theorie zur Lösung dieser Aufgabe gibt, lautet folgendermaßen: Man suche ein System von $2k$ Matrizen $Q_1, \dots, Q_k, P_1, \dots, P_k$ auf¹³, das erstens die Relationen

$$\left. \begin{aligned} Q_m Q_n - Q_n Q_m &= 0, & P_m P_n - P_n P_m &= 0 \\ P_m Q_n - Q_n P_m &\begin{cases} = 0 & \text{für } m \neq n \\ = \frac{\hbar}{2\pi i} \mathbf{1} & \text{für } m = n \end{cases} \end{aligned} \right\} (m, n = 1, \dots, k)$$

erfüllt, und für welches zweitens die Matrix $W = H(Q_1, \dots, Q_k, P_1, \dots, P_k)$ eine Diagonalmatrix wird. (Auf die Herkunft dieser Gleichungen, insbesondere der ersten Gruppe, der sog. „Vertauschungsrelationen“, die den ganzen nicht-kommutativen Matrizenkalkül dieser Theorie beherrschen, sei hier nicht näher eingegangen. Der Leser findet diesbezüglich in den in Anm. ¹ zitierten Werken erschöpfende Auskunft. \hbar ist das Plancksche Wirkungsquantum.) Die Diagonalelemente von W , etwa w_1, w_2, \dots , sind dann die verschiedenen möglichen Energieniveaus des Systems. Die Elemente der Matrizen $Q_1, \dots, Q_k - q_{mn}^{(1)}, \dots, q_{mn}^{(k)}$ — sind auf eine gewisse Weise maßgebend für die Übergangswahrscheinlichkeiten des Systems (aus dem m -ten Zustand mit der Energie w_m in den n -ten Zustand mit der Energie $w_n, w_m > w_n$) und die dabei emittierte Strahlung.

Zusätzlich ist noch zu bemerken, daß die Matrix

$$W = H(Q_1, \dots, Q_k, P_1, \dots, P_k)$$

durch $Q_1, \dots, Q_k, P_1, \dots, P_k$ und die klassisch-mechanische Hamiltonsche Funktion $H(q_1, \dots, q_k, p_1, \dots, p_k)$ insofern nicht vollkommen festgelegt wird, als die Q_i und P_i nicht alle miteinander kommutieren (bei der Multiplikation) — während es bei $H(q_1, \dots, q_k, p_1, \dots, p_k)$ im klassisch-mechanischen Sinne völlig sinnlos wäre, etwa zwischen einem Gliede $p_1 q_1$ und einem Gliede $q_1 p_1$ zu unterscheiden. Man muß daher in H über den klassischen Sinn dieses Ausdruckes hinaus die Reihenfolge der Faktoren q_i und p_i seiner Glieder festlegen. Dieser Prozeß ist ganz allgemein gar nicht durchgeführt worden, für die wichtigsten Spezialfälle sind aber die zweckmäßigen Normierungen bekannt.

(Im einfachen Falle, wenn das zu untersuchende System aus ν Teilchen besteht, also $k = 3\nu$ Koordinaten $q_1, \dots, q_{3\nu}$ hat — so daß etwa $q_{3\mu-2}, q_{3\mu-1}, q_{3\mu}$ die drei cartesischen Koordinaten des μ -ten Teilchens, $\mu = 1, \dots, \nu$, sind — wobei die Wechselwirkung dieser Teilchen durch eine potentielle Energie $V(q_1, \dots, q_{3\nu})$ gegeben ist, besteht allerdings kein derartiger Zweifel. Die klassische Hamiltonsche Funktion ist dann

$$H(q_1, \dots, q_{3\nu}, \dot{p}_1, \dots, \dot{p}_{3\nu}) = \sum_{\mu=1}^{\nu} \frac{1}{2m_{\mu}} (\dot{p}_{3\mu-2}^2 + \dot{p}_{3\mu-1}^2 + \dot{p}_{3\mu}^2) + V(q_1, \dots, q_{3\nu}),$$

wobei m_{μ} die Masse des μ -ten Teilchens ist, und $\dot{p}_{3\mu-2}, \dot{p}_{3\mu-1}, \dot{p}_{3\mu}$ seine Impulse. Es ist ganz klar, was dies nach Einsetzung der Matrizen $Q_1, \dots, Q_{3\nu}, P_1, \dots, P_{3\nu}$ bedeutet: insbesondere verursacht das V -Glied keinerlei Schwierigkeiten, da alle $Q_1, \dots, Q_{3\nu}$ miteinander kommutieren.) Wichtig ist nämlich, daß ausschließlich Hermitesche Matrizen zugelassen werden, d. h. solche Matrizen $A = \{a_{mn}\}$, für die identisch $a_{mn} = \bar{a}_{nm}$ gilt (komplex dürfen die Elemente a_{mn} sein!). Daher muß $H(Q_1, \dots, Q_k, P_1, \dots, P_k)$ Hermitesch sein, wenn es die $Q_1, \dots, Q_k, P_1, \dots, P_k$ alle sind — was eine gewisse Einschränkung in der vorhin gestreiften Frage der Reihenfolge der Faktoren involviert, allerdings keine genügend enge, um $H(Q_1, \dots, Q_k, P_1, \dots, P_k)$ aus dem klassischen $H(q_1, \dots, q_k, \dot{p}_1, \dots, \dot{p}_k)$ eindeutig zu bestimmen¹⁴. —

Demgegenüber lautet die Anweisung der Wellenmechanik wie folgt: Zunächst bilde man die Hamiltonsche Funktion $H(q_1, \dots, q_k, \dot{p}_1, \dots, \dot{p}_k)$, dann setze man für eine willkürliche Funktion $\psi(q_1, \dots, q_k)$ im Zustandsraume des Systems (und nicht im Phasenraume, d. h. die $\dot{p}_1, \dots, \dot{p}_k$ sollen nicht in ψ eingehen!) die Differentialgleichung

$$H\left(q_1, \dots, q_k, \frac{\hbar}{2\pi i} \frac{\partial}{\partial q_1}, \dots, \frac{\hbar}{2\pi i} \frac{\partial}{\partial q_k}\right) \psi(q_1, \dots, q_k) = \lambda \psi(q_1, \dots, q_k)$$

an. Dabei ist $H\left(q_1, \dots, q_k, \frac{\hbar}{2\pi i} \frac{\partial}{\partial q_1}, \dots, \frac{\hbar}{2\pi i} \frac{\partial}{\partial q_k}\right)$ in leichtverständlichem Sinne als Funktionaloperation aufzufassen, z. B. führt dieselbe im vorhin genannten Falle

$$H(q_1, \dots, q_{3\nu}, \dot{p}_1, \dots, \dot{p}_{3\nu}) = \sum_{\mu=1}^{\nu} \frac{1}{2m_{\mu}} (\dot{p}_{3\mu-2}^2 + \dot{p}_{3\mu-1}^2 + \dot{p}_{3\mu}^2) + V(q_1, \dots, q_{3\nu})$$

die Funktion $\psi(q_1, \dots, q_{3\nu})$ in

$$\sum_{\mu=1}^{\nu} \frac{1}{2m_{\mu}} \left(\frac{\hbar}{2\pi i}\right)^2 \left(\frac{\partial^2}{\partial q_{3\mu-2}^2} \psi + \frac{\partial^2}{\partial q_{3\mu-1}^2} \psi + \frac{\partial^2}{\partial q_{3\mu}^2} \psi\right) + V\psi$$

über (wir ließen in V und ψ die Variablen $q_1, \dots, q_{3\nu}$ weg). Da die Operation $q_1 \frac{h}{2\pi i} \frac{\partial}{\partial q_1}$ von der Operation $\frac{h}{2\pi i} \frac{\partial}{\partial q_1} q_1$ verschieden ist¹⁵, besteht hier wieder eine Ungewißheit wegen der Reihenfolge der Faktoren q_m und p_m in $H(q_1, \dots, q_k, p_1, \dots, p_k)$ — aber SCHRÖDINGER zeigte, wie diese Unbestimmtheit durch Zurückführung auf ein bestimmtes Variationsprinzip behoben werden kann, und zwar so, daß die entstehende Differentialgleichung selbstadjungiert wird¹⁶.

Diese Differentialgleichung (die „Wellengleichung“) hat nun ganz den Charakter eines Eigenwertproblems: indem man λ als Eigenwertparameter auffaßt, und der Eigenfunktion $\psi = \psi(q_1, \dots, q_k)$ etwa das Verschwinden am Rande des Zustandsraumes (des Raumes der q_1, \dots, q_k) — und Regularität sowie Eindeutigkeit in ihm — auferlegt. Im Sinne der Wellentheorie sind die Eigenwerte von λ (sowohl im Punkt- als auch im Streckenspektrum¹⁷) die möglichen Energieniveaus. Und auch die dazugehörigen (komplexen!) Eigenfunktionen ψ stehen im Zusammenhange mit den entsprechenden (im Bohrschen Sinne stationären) Zuständen des Systems: so ist bei einem ν -Elektronensystem ($k = 3\nu$, vgl. w. o., e ist die Ladung des Elektrons) die im Punkte x, y, z gemessene Ladungsdichte des μ -ten Systemelektrons, welches nach SCHRÖDINGER über den ganzen $x, y, z (= q_{3\mu-2}, q_{3\mu-1}, q_{3\mu})$ Raum „verschmiert“ zu denken ist, durch den folgenden Ausdruck gegeben:

$$e \underbrace{\int \dots \int}_{3\nu-3\text{-fach}} |\psi(q_1 \dots q_{3\mu-3} x y z q_{3\mu+1} \dots q_{3\nu})|^2 dq_1 \dots dq_{3\mu-3} dq_{3\mu+1} \dots dq_{3\nu}.$$

(Damit die Gesamtladung e herauskommt, muß ψ durch die Bedingung

$$\underbrace{\int \dots \int}_{3\nu\text{-fach}} |\psi(q_1 \dots q_{3\nu})|^2 dq_1 \dots dq_{3\nu} = 1$$

[Integration über alle 3ν Variablen!] normiert sein. Und zwar kommt für jedes $\mu = 1, \dots, \nu$ dieselbe Gleichung heraus.)

Außerdem vermag die Wellenmechanik auch über Systeme, die sich nicht in Bohrschen stationären Zuständen befinden, Aussagen zu machen¹⁸, und zwar so: Wenn der Zustand nicht stationär ist, d. h. sich mit der Zeit ändert, so enthält die Wellenfunktion $\psi = \psi(q_1, \dots, q_k; t)$ die Zeit t , und sie ändert sich gemäß der Differentialgleichung

$$\begin{aligned} -H\left(q_1, \dots, q_k, \frac{h}{2\pi i} \frac{\partial}{\partial q_1}, \dots, \frac{h}{2\pi i} \frac{\partial}{\partial q_k}\right) \psi(q_1, \dots, q_k; t) \\ = \frac{h}{2\pi i} \frac{\partial}{\partial t} \psi(q_1, \dots, q_k; t). \quad 19 \end{aligned}$$

D. h.: ψ kann für $t = t_0$ willkürlich vorgegeben werden und ist dann für alle t eindeutig bestimmt. Auch die stationären ψ sind, wie der Vergleich der zwei Differentialgleichungen SCHRÖDINGERS lehrt, eigent-

lich t -abhängig, nur geht bei diesen t nach

$$\psi(q_1, \dots, q_k; t) = e^{-\frac{2\pi i}{\hbar} \lambda t} \psi(q_1, \dots, q_k; 0)$$

ein. D. h. t tritt nur in einem von q_1, \dots, q_k unabhängigen (d. h. im Zustandsraume konstanten) Faktor vom Absolutwerte 1 auf, so daß sich z. B. die w. o. definierte Ladungsdichtenverteilung nicht ändert. (Man wird überhaupt vermuten — und wir werden es durch die späteren genaueren Überlegungen bestätigt finden —, daß ein [Zustandsraum-] konstanter Faktor vom Absolutwert 1 bei ψ prinzipiell un beobachtbar ist.)

Da die Eigenfunktionen der ersten Differentialgleichung ein vollständiges Orthogonalsystem bilden²⁰, können wir jedes $\psi = \psi(q_1, \dots, q_k)$ nach ihnen entwickeln. Die Eigenfunktionen seien ψ_1, ψ_2, \dots (alles wieder t -unabhängig!), ihre bzw. Eigenwerte $\lambda_1, \lambda_2, \dots$, die Entwicklung lautet:

$$\psi(q_1, \dots, q_k) = \sum_1^{\infty} a_n \psi_n(q_1, \dots, q_k). \quad 21$$

Ist ψ doch t -abhängig, so wird t in die Entwicklungskoeffizienten a_n eingehen (die Eigenfunktionen ψ_1, ψ_2, \dots dagegen sollen, jetzt wie auch stets im folgenden, von t nicht abhängen). Ist also das vorliegende $\psi = \psi(q_1, \dots, q_k)$ in Wahrheit $\psi(q_1, \dots, q_k; t_0)$, so folgt mit Rücksicht auf

$$\begin{aligned} \psi &= \psi(q_1, \dots, q_k; t) = \sum_1^{\infty} a_n(t) \psi_n, \\ H\psi &= \sum_1^{\infty} a_n(t) H\psi_n = \sum_1^{\infty} \lambda_n a_n(t) \psi_n, \\ \frac{\hbar}{2\pi i} \frac{\partial}{\partial t} \psi &= \sum_1^{\infty} \frac{\hbar}{2\pi i} \dot{a}_n(t) \psi_n, \end{aligned}$$

durch Koeffizientenvergleich aus der zweiten Differentialgleichung:

$$\frac{\hbar}{2\pi i} \dot{a}_n(t) = -\lambda_n a_n(t), \quad a_n(t) = c_n e^{-\frac{2\pi i}{\hbar} \lambda_n t},$$

d. h.

$$\dot{a}_n(t) = e^{-\frac{2\pi i}{\hbar} \lambda_n (t-t_0)} \dot{a}_n(t_0) = e^{-\frac{2\pi i}{\hbar} \lambda_n (t-t_0)} a_n,$$

$$\psi \doteq \psi(q_1, \dots, q_k; t) = \sum_1^{\infty} e^{-\frac{2\pi i}{\hbar} \lambda_n (t-t_0)} a_n \psi_n(q_1, \dots, q_k).$$

Wenn also ψ nicht stationär ist, d. h. nicht alle a_n bis auf eines verschwinden, so ändert sich ψ (bei variablem t) nicht mehr bloß um einen (Zustandsraum-) konstanten Faktor vom Absolutwerte 1. Daher werden sich im allgemeinen auch die oben definierten Ladungsdichten ändern, d. h. es finden im Raume wirkliche elektrische Schwingungen statt²².

Man sieht, die Begriffsbildungen und die praktischen Anweisungen der beiden Theorien lauten ziemlich verschieden. Trotzdem lieferten sie von Anfang an stets dieselben Resultate, selbst dort, wo beide von den älteren Fassungen der Quantentheorie abweichende Details ergaben²³. Diese bemerkenswerte Tatsache wurde, wie in I. 1. erwähnt, alsbald durch den Beweis ihrer mathematischen Äquivalenz durch SCHRÖDINGER erklärt²⁴. Diesem Gleichwertigkeitsbeweise wollen wir uns nun zuwenden, und dabei gleichzeitig die Dirac-Jordansche allgemeine „Transformationstheorie“ (die beide Theorien umfaßt) darlegen.

3. Gleichwertigkeit der zwei Theorien: Die Transformationstheorie.

Das Grundproblem der Matrizen­theorie war, die Matrizen $Q_1, \dots, Q_k, P_1, \dots, P_k$ so zu bestimmen, daß erstens die Vertauschungsrelationen aus I. 2. (Seite 5) erfüllt sind, und zweitens eine gewisse Funktion derselben, $H(Q_1, \dots, Q_k, P_1, \dots, P_k)$, eine Diagonalmatrix wird. Diese Aufgabe wurde von BORN und JORDAN schon in ihrer ersten Veröffentlichung folgendermaßen in zwei Schritte zerlegt:

Zunächst wurden irgendwelche Matrizen $\bar{Q}_1, \dots, \bar{Q}_k, \bar{P}_1, \dots, \bar{P}_k$ aufgesucht, die nur den Vertauschungsrelationen zu genügen brauchten — was leicht gelingt²⁵; dabei wurde in der Regel

$$\bar{H} = H(\bar{Q}_1, \dots, \bar{Q}_k, \bar{P}_1, \dots, \bar{P}_k)$$

keine Diagonalmatrix. Sodann wurden die richtigen Lösungen in der Form

$$Q_1 = S^{-1} \bar{Q}_1 S, \dots, Q_k = S^{-1} \bar{Q}_k S, P_1 = S^{-1} \bar{P}_1 S, \dots, P_k = S^{-1} \bar{P}_k S$$

angesetzt, wobei S eine willkürliche Matrix sein durfte (immerhin nur eine, die eine Inverse S^{-1} mit den Eigenschaften $S^{-1}S = SS^{-1} = I$ besitzt). Da aus der Gültigkeit der Vertauschungsrelationen für $\bar{Q}_1, \dots, \bar{Q}_k, \bar{P}_1, \dots, \bar{P}_k$ auch diejenige für $Q_1, \dots, Q_k, P_1, \dots, P_k$ folgt (identisch in S !), und da $\bar{H} = H(\bar{Q}_1, \dots, \bar{Q}_k, \bar{P}_1, \dots, \bar{P}_k)$ in $H = \bar{H}(Q_1, \dots, Q_k, P_1, \dots, P_k)$ mit $H = S^{-1} \bar{H} S$ übergeht²⁶, ist von S überhaupt nur dieses zu verlangen: $S^{-1} \bar{H} S$ soll eine Diagonalmatrix sein, wobei \bar{H} gegeben ist. (Es wäre allerdings auch noch darauf zu achten, daß $S^{-1} \bar{Q}_1 S$, usw. hermitesch ausfallen, ebenso wie es die \bar{Q}_1 , usw. waren. Indessen zeigt es sich bei näherem Zusehen, daß diese weitere Anforderung an S immer nachträglich erfüllt werden kann, und deshalb soll sie bei der gegenwärtigen orientierenden Betrachtung überhaupt unbeachtet bleiben.)

Es gilt somit, ein gegebenes H nach dem Schema $S^{-1} \bar{H} S$ auf die Diagonalform zu transformieren. Formulieren wir darum genau, was dies bedeutet!

Die Matrix H habe diese Elemente $h_{\mu\nu}$, die gesuchte Matrix S die Elemente $s_{\mu\nu}$, die (gleichfalls unbekannt) Diagonalmatrix \bar{H} die Diagonalelemente w_μ , d. h. das allgemeine Element $w_\mu \delta_{\mu\nu}$ ²⁷. $H = S^{-1} \bar{H} S$ besagt dasselbe wie $SH = \bar{H}S$, und dies bedeutet (wenn wir die, nach den bekannten Regeln der Matrizenmultiplikation bestimmten, entsprechenden Elemente einander auf beiden Seiten gleichsetzen):

$$\sum_\nu s_{\mu\nu} \cdot w_\nu \delta_{\nu\varrho} = \sum_\nu h_{\mu\nu} \cdot s_{\nu\varrho},$$

d. h.

$$\sum_\nu h_{\mu\nu} \cdot s_{\nu\varrho} = w_\varrho \cdot s_{\mu\varrho}.$$

Die einzelnen Spalten $s_{1\varrho}, s_{2\varrho}, \dots$ der Matrix S ($\varrho = 1, 2, \dots$) und die entsprechenden Diagonalelemente w_ϱ der Matrix H sind also Lösungen des sog. Eigenwertproblems, welches so lautet:

$$\sum_\nu h_{\mu\nu} x_\nu = \lambda \cdot x_\mu \quad (\mu = 1, 2, \dots).$$

(Die triviale Lösung $x_1 = x_2 = \dots = 0$ ist natürlich auszuschließen.) In der Tat ist $x_\nu = s_{\nu\varrho}, \lambda = w_\varrho$ eine Lösung. ($x_\nu \equiv 0$, d. h. $s_{\nu\varrho} \equiv 0$ [für alle ν] kommt nicht in Frage, denn dann verschwände die ϱ -te Spalte von S identisch, obwohl S eine Inverse S^{-1} besitzt!) Bemerkenswert ist nun, daß dies im wesentlichen die einzigen Lösungen sind.

Die obige Gleichung besagt nämlich: das Transformieren des Vektors $x = \{x_1, x_2, \dots\}$ mit der Matrix \bar{H} kommt seiner Multiplikation mit der Zahl λ gleich. Wir transformieren $x = \{x_1, x_2, \dots\}$ mit S^{-1} , es entsteht ein Vektor $y = \{y_1, y_2, \dots\}$. Transformieren wir y mit H , so ist dies ein Transformieren von x mit $H S^{-1} = S^{-1} \bar{H} S \cdot S^{-1} = S^{-1} \cdot \bar{H}$. D. h. ein Transformieren von λx mit S^{-1} , das Resultat ist also λy . Nun hat $\bar{H}y$ die Komponenten $\sum_\nu w_\nu \delta_{\mu\nu} y_\nu = w_\mu y_\mu$, λy die Komponenten λy_μ . Also wird $w_\mu y_\mu = \lambda y_\mu$ für alle $\mu = 1, 2, \dots$ verlangt, d. h. $y_\mu = 0$, solange $w_\mu \neq \lambda$ ist. Nennen wir denjenigen Vektor, dessen ϱ -te Komponente 1 ist, alle anderen aber 0, η^ϱ , so besagt dies: y ist ein Linearaggregat derjenigen η^e , für die $w_e = \lambda$ ist — insbesondere Null, wenn dies nie stattfindet. x entsteht durch Anwenden von S auf y , also ist es ein Linearaggregat der mit S transformierten η^e von vorhin. Die μ -te Komponente von $S\eta^e$ ist (da die ν -te von η^e $\delta_{\nu e}$ war) $\sum_\nu s_{\mu\nu} \delta_{\nu e} = s_{\mu e}$. Fassen wir also die ϱ -te Spalte von $S, s_{1\varrho}, s_{2\varrho}, \dots$ als Vektor auf, so ist x Linearaggregat aller Spalten, für die $w_e = \lambda$ ist — insbesondere Null, wenn dies nie stattfindet. Damit ist unsere ursprüngliche Behauptung bewiesen: die w_1, w_2, \dots sind die einzigen Eigenwerte, und die $x_\nu = s_{\nu\varrho}, \lambda = w_\varrho$ die im wesentlichen einzigen Lösungen.

Dies ist sehr wichtig: denn es bestimmt nicht nur die Kenntnis von S, H alle Lösungen des Eigenwertproblems, sondern wir können auch umgekehrt, sobald wir das Eigenwertproblem vollständig gelöst haben, daraus S, H bestimmen. H z. B. so: die w_μ sind einfach alle Lösungen λ , und jedes solche λ kommt in der Reihe w_1, w_2, \dots so oft vor,

als es zu ihm gehörige linear unabhängige Lösungen x_1, x_2, \dots gibt²⁸ — damit sind die w_1, w_2, \dots schon bis auf ihre Reihenfolge festgelegt²⁹.

Das Kernproblem der Matrizenlehre ist also die Auflösung der Eigenwertgleichung

$$E_1. \quad \sum^{\nu} h_{\mu\nu} x_{\nu} = \lambda \cdot x_{\mu} \quad (\mu = 1, 2, \dots).$$

Gehen wir nun zur Wellentheorie über. Die Grundgleichung dieser Theorie ist die „Wellengleichung“

$$E_2. \quad H \varphi(q_1 \cdots q_k) = \lambda \cdot \varphi(q_1 \cdots q_k),$$

wobei H der bereits erörterte Differentialoperator ist, — man sucht alle Lösungen $\varphi(q_1 \cdots q_k)$ und λ , mit Ausschluß der trivialen $\varphi(q_1 \cdots q_k) \equiv 0$, λ beliebig. Dies ist dem analog, was bei E_1 verlangt wurde: die Folge x_1, x_2, \dots , die wir auch als Funktion x_{ν} der „unstetigen“ Variablen ν (mit den Variablenwerten $1, 2, \dots$) ansehen können, entspricht der Funktion $\varphi(q_1 \cdots q_k)$ mit den „stetigen“ Variablen q_1, \dots, q_k ; λ spielt beidemal dieselbe Rolle. Nur zeigt die lineare Transformation

$$x_{\mu} \rightarrow \sum^{\nu} h_{\mu\nu} x_{\nu}$$

recht wenig Ähnlichkeit mit der anderen

$$\varphi(q_1 \cdots q_k) \rightarrow H \varphi(q_1 \cdots q_k).$$

Wie soll hier eine Analogie erreicht werden?

Wir haben den Index ν als Variable angesehen, und mit den k Variablen q_1, \dots, q_k in Parallele gestellt, d. h. eine positive ganze Zahl mit dem allgemeinen Punkte des k -dimensionalen Zustandsraumes (der von nun an Ω heißen möge). Daher dürfen wir nicht erwarten, daß \sum^{ν} als Summe in Ω übertragen werden kann, vielmehr ist das Integral $\int_{\Omega} \cdots \int \cdots dq_1 \cdots dq_k$ (oder kürzer $\int_{\Omega} \cdots dv$, dv ist das Volumenelement $dq_1 \cdots dq_k$ in Ω) das richtige Analogon. Dem Matrizenelement $h_{\mu\nu}$, das von zwei Variablen von der Art des Index ν abhängt, entspricht somit eine Funktion $h(q_1, \dots, q_k; q'_1 \cdots q'_k)$, bei der q_1, \dots, q_k und q'_1, \dots, q'_k unabhängig Ω durchlaufen. Die Transformation

$$x_{\mu} \rightarrow \sum^{\nu} h_{\mu\nu} x_{\nu} \quad \text{oder} \quad x_{\nu} \rightarrow \sum^{\nu'} h_{\nu\nu'} x_{\nu'}$$

geht dadurch in

$$\varphi(q_1 \cdots q_k) \rightarrow \int_{\Omega} \cdots \int_{\Omega} h(q_1 \cdots q_k; q'_1 \cdots q'_k) \varphi(q'_1 \cdots q'_k) dq'_1 \cdots dq'_k$$

über, und das Eigenwertproblem E_1 , daß wir auch als

$$E_1. \quad \sum^{\nu'} h_{\nu\nu'} x_{\nu'} = \lambda \cdot x_{\nu}$$

schreiben können, in

$$E_3. \quad \int_{\Omega} \cdots \int_{\Omega} h(q_1 \cdots q_k; q'_1 \cdots q'_k) \varphi(q'_1 \cdots q'_k) dq'_1 \cdots dq'_k \\ = \lambda \cdot \varphi(q_1 \cdots q_k).$$

Eigenwertprobleme von der Art E_3 , sind in der Mathematik vielfach untersucht worden, und können in der Tat in weitgehender Analogie zu den Problemen E_1 behandelt werden. Sie heißen „Integralgleichungen“³⁰.

Leider hat aber E_2 nicht diese Form, bzw. es kann nur dann auf diese Form gebracht werden, wenn zum Differentialoperator

$$H = H\left(q_1, \dots, q_k, \frac{\hbar}{2\pi i} \frac{\partial}{\partial q_1}, \dots, \frac{\hbar}{2\pi i} \frac{\partial}{\partial q_k}\right)$$

eine Funktion $h(q_1 \dots q_k; q'_1 \dots q'_k)$ gefunden werden kann, so daß identisch (d. h. für alle $\varphi(q_1 \dots q_k)$)

$$I. \quad H\varphi(q_1 \dots q_k) = \int \dots \int_{\Omega} h(q_1 \dots q_k; q'_1 \dots q'_k) \varphi(q'_1 \dots q'_k) dq'_1 \dots dq'_k.$$

Dieses $h(q_1 \dots q_k; q'_1 \dots q'_k)$ wird übrigens, falls es existiert, „Integral-kern“ der Funktionaloperation H genannt, und H selbst heißt dann ein „Integraloperator“.

Nun ist eine solche Umformung im allgemeinen unmöglich, d. h. Differentialoperatoren H sind nie Integraloperatoren. Selbst der aller-einfachste Funktionaloperator, der jedes φ in sich selbst überführt — er heiße 1 — ist keiner. Überzeugen wir uns hiervon, und zwar sei der Einfachheit halber $k = 1$. Verlangt wird:

$$A_1. \quad \varphi(q) \equiv \int_{-\infty}^{\infty} h(q, q') \varphi(q') dq'.$$

Ersetzen wir hierin $\varphi(q)$ durch $\varphi(q_0 + q)$, setzen wir $q = 0$, und führen wir die Integrationsvariable $q'' = q' - q_0$ ein. Dann wird $\varphi(q_0) = \int_{-\infty}^{\infty} h(0, q'' - q_0) \varphi(q'') dq''$. Ersetzen wir q_0, q'' durch q, q' , so sehen wir, daß mit $h(q, q')$ auch $h(0, q' - q)$ unsere Aufgabe löst, — daß wir also $h(q, q')$ als nur von $q' - q$ abhängig voraussetzen dürfen. Dann wird

$$A_2. \quad \varphi(q) \equiv \int_{-\infty}^{\infty} h(q' - q) \varphi(q') dq' \quad (h(q, q') = h(q' - q))$$

verlangt. Wie nochmaliges Ersetzen von $\varphi(q)$ durch $\varphi(q_0 + q)$ beweist, genügt es, $q = 0$ ins Auge zu fassen, d. h.

$$A_3. \quad \varphi(0) \equiv \int_{-\infty}^{\infty} h(q) \varphi(q) dq.$$

Ersetzen von $\varphi(q)$ durch $\varphi(-q)$ zeigt, daß mit $h(q)$ auch $h(-q)$ Lösung ist, also auch $h_1(q) = \frac{h(q) + h(-q)}{2}$, so daß $h(q)$ als gerade Funktion von q angenommen werden darf.

Daß diese Bedingungen unerfüllbar sind, ist klar: wählen wir $\varphi(q) > 0$ für $q \geq 0$, $\varphi(0) = 0$, so folgt aus A_3 , $h(q) = 0$ für $q \geq 0$ ³¹.

Wählen wir aber $\varphi(q) \equiv 1$, so ergibt sich $\int_{-\infty}^{\infty} h(q) dq = 1$ — während aus dem Obigen mit Sicherheit $\int_{-\infty}^{\infty} h(q) dq = 0$ folgt.

DIRAC fingierte trotzdem die Existenz einer solchen Funktion

$$A_4. \quad \delta(q) = 0 \quad \text{für } q \gtrsim 0, \quad \delta(q) = \delta(-q), \quad \int_{-\infty}^{\infty} \delta(q) dq = 1.$$

Dieselbe würde A_3 erfüllen:

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{\infty} \delta(q) \varphi(q) dq &= \varphi(0) \int_{-\infty}^{\infty} \delta(q) dq + \int_{-\infty}^{\infty} \delta(q) (\varphi(q) - \varphi(0)) dq \\ &= \varphi(0) \cdot 1 + \int_{-\infty}^{\infty} 0 \cdot dq = \varphi(0), \end{aligned}$$

also auch A_1 , A_2 . Man soll sie sich somit überall, außer im Nullpunkte, verschwindend vorstellen, aber in ihm derartig unendlich groß, daß insgesamt doch das Integral 1 für $\delta(q)$ herauskommt³².

Hat man einmal diese Fiktion akzeptiert, so gelingt es, die verschiedensten Differentialoperatoren als Integraloperatoren darzustellen — falls man neben $\delta(q)$ auch seine Differentialquotienten einführt. So findet man:

$$\begin{aligned} \frac{d^n}{dq^n} \varphi(q) &= \frac{d}{dq^n} \int_{-\infty}^{\infty} \delta(q - q') \varphi(q') dq' = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\partial^n}{\partial q'^n} \delta(q - q') \cdot \varphi(q') dq' \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} \delta^{(n)}(q - q') \varphi(q') dq', \\ q^n \cdot \varphi(q) &= \int_{-\infty}^{\infty} \delta(q - q') q^n \cdot \varphi(q') dq', \end{aligned}$$

d. h. $\frac{d^n}{dq^n}$ bzw. $q^n \dots$ haben die Integralkerne $\delta^{(n)}(q - q')$, bzw. $\delta(q - q') q^n$. Nach dem gleichen Schema kann man auch die Integralkerne beliebig komplizierter Differentialoperatoren aufsuchen. Bei mehreren Variablen q_1, \dots, q_k führen δ -Produkte ans Ziel, z. B.:

$$\begin{aligned} &\underbrace{\int_{\Omega} \dots \int}_{\Omega} \delta(q_1 - q'_1) \delta(q_2 - q'_2) \dots \delta(q_k - q'_k) \varphi(q'_1 \dots q'_k) dq'_1 \dots dq'_k \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} \left[\dots \left[\int_{-\infty}^{\infty} \left[\int_{-\infty}^{\infty} \varphi(q'_1 q'_2 \dots q'_k) \delta(q_1 - q'_1) dq'_1 \right] \delta(q_2 - q'_2) dq'_2 \right] \dots \right] \\ &\quad \delta(q_k - q'_k) dq'_k \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} \left[\dots \left[\int_{-\infty}^{\infty} \varphi(q_1 q'_2 \dots q'_k) \delta(q_2 - q'_2) dq'_2 \right] \dots \right] \delta(q_k - q'_k) dq'_k = \dots \\ &= \varphi(q_1 q_2 \dots q_k), \\ &\underbrace{\int_{\Omega} \dots \int}_{\Omega} \delta'(q_1 - q'_1) \delta(q_2 - q'_2) \dots \delta(q_k - q'_k) \varphi(q'_1 \dots q'_k) dq'_1 \dots dq'_k \\ &= \frac{d}{dq_1} \underbrace{\int_{\Omega} \dots \int}_{\Omega} \delta(q_1 - q'_1) \delta(q_2 - q'_2) \dots \delta(q_k - q'_k) \varphi(q'_1 \dots q'_k) dq'_1 \dots dq'_k \\ &= \frac{d}{dq_1} \varphi(q_1 \dots q_k), \quad \text{usw.} \end{aligned}$$

So kann die Integraldarstellung I. praktisch für alle Operatoren[†] erzwungen werden.

Sobald man diese Darstellung hat, ist die Analogie der Probleme E_1 und E_2 eine vollkommene: man hat nur $\nu, \nu', \sum \nu', x$ durch $q_1 \cdots q_k, q'_1 \cdots q'_k, \int \cdots \int \cdots d q'_1 \cdots d q'_k, \varphi$ zu ersetzen. Wie die Vektoren x_ν den

Funktionen $\varphi(q_1 \cdots q_k)$ entsprechen, müssen den Matrizen $h_{\nu, \nu'}$ die Integralkerne $h(q_1 \cdots q_k; q'_1 \cdots q'_k)$ zur Seite gestellt werden; noch zweckmäßiger aber ist es, die Integralkerne direkt als Matrizen anzusehen, und dabei die $q_1 \cdots q_k$ als Zeilen und die $q'_1 \cdots q'_k$ als Spaltenindices zu bezeichnen (ν bzw. ν' entsprechend). Man hat dann neben den gewöhnlichen Matrizen $\{h_{\nu, \nu'}\}$ mit diskreter (durch die Nummern $1, 2, \dots$ gekennzeichneten) Zeilen- und Spaltengesamtheit auch andere $\{h(q_1 \cdots q_k; q'_1 \cdots q'_k)\}$ (die Integralkerne), für welche beide Gesamtheiten durch je k , kontinuierlich über ganz Ω laufenden, Variablen gekennzeichnet sind.

Diese Analogie mag bloß formal erscheinen, ist es aber in Wahrheit nicht: denn auch die Indices ν bzw. ν' können als Koordinaten in einem Zustandsraume angesehen werden, nämlich wenn man sie als Quantenzahlen (im Sinne der Bohrschen Theorie: als Nummern der, durch die Verbote der Quantenbedingungen diskret gewordenen, möglichen Bahnkurven im Phasenraume) deutet.

Wir wollen diese Gedankengänge, die durch DIRAC und JORDAN zu einer einheitlichen Theorie der Quantenvorgänge ausgestaltet wurden, hier nicht weiter verfolgen. Die „uneigentlichen“ Gebilde (wie $\delta(x), \delta'(x), \dots$) spielen in ihnen eine entscheidende Rolle — sie liegen außerhalb des Rahmens der allgemein üblichen mathematischen Methoden, und wir wollen die Quantenmechanik mit Hilfe dieser letzteren beschreiben. Wir gehen daher zur anderen (Schrödingerschen) Methode der Vereinheitlichung beider Theorien über.

4. Gleichwertigkeit der zwei Theorien: Der Hilbertsche Raum.

Die in I. 3. skizzierte Methode kam darauf heraus, den „diskreten“ Raum der Indexwerte, $Z = (1, 2, \dots)$, mit dem kontinuierlichen Zustandsraum Ω des mechanischen Systems (Ω ist k -dimensional, wenn k die Zahl der klassisch-mechanischen Freiheitsgrade ist) in Analogie zu setzen. Daß dies nicht ohne einige Gewalttätigkeit an Formalismus und Mathematik gelingen kann, ist kein Wunder: die Räume Z und Ω sind wirklich sehr verschieden, und jeder Versuch, sie in Beziehung zu setzen, muß auf große Schwierigkeiten stoßen³³.

Das, worauf es uns aber in Wahrheit ankommt, ist gar nicht eine Beziehung von Z zu Ω , sondern nur eine solche zwischen ihren bzw.

Funktionen: d. h. zwischen den Folgen x_1, x_2, \dots , die die Funktionen in Z sind, und den Wellenfunktionen $\varphi(q_1 \cdots q_k)$, die die Funktionen in Ω sind. Denn diese sind es allein, die in die Fragestellungen der Quantenmechanik eingehen.

In der Schrödingerschen Theorie spielte das Integral

$$\int_{\Omega} \cdots \int |\varphi(q_1 \cdots q_k)|^2 dq_1 \cdots dq_k$$

eine große Rolle — es mußte $= 1$ sein, damit φ zu physikalischen Aussagen verwendbar sei (vgl. I. 2.). In der Matrizenlehre dagegen (vgl. das Problem E_1 in I. 3.) spielt der Vektor x_1, x_2, \dots eine entscheidende Rolle, und diesem wird, im Sinne der Hilbertschen Theorie solcher Eigenwertprobleme (vgl. a. a. O. Anm. ³⁰) stets die Bedingung der Endlichkeit von $\sum^v |x_v|^2$ auferlegt. Es ist sogar üblich, schon um die triviale Lösung $x_v \equiv 0$ auszuschließen, die Normierung $\sum^v |x_v|^2 = 1$ vorzunehmen. Somit ist es in Z bzw. Ω nahegelegt, den Kreis der zulässigen Funktionen auf solche mit endlichem

$$\sum^v |x_v|^2 \quad \text{bzw.} \quad \int_{\Omega} \cdots \int |\varphi(q_1 \cdots q_k)|^2 dq_1 \cdots dq_k$$

einzuschränken, denn nur bei solchen Funktionen kann man durch Multiplizieren mit einer Konstanten die genannte \sum^v bzw. $\int_{\Omega} \cdots \int$ gleich 1

machen — d. h. eine Lösung im üblichen Sinne normieren³⁴. Wir nennen diese Funktionengesamtheiten F_Z bzw. F_{Ω} .

Nun gilt der Satz: F_Z und F_{Ω} sind isomorph (FISCHER und F. RIESZ³⁵). Das bedeutet präzise folgendes: Es ist möglich, eine ein-eindeutige Zuordnung zwischen F_Z und F_{Ω} zu stiften, d. h. jeder Folge x_1, x_2, \dots mit endlicher $\sum^v |x_v|^2$ eine Funktion $\varphi(q_1 \cdots q_k)$ mit endlichem $\int_{\Omega} \cdots \int |\varphi(q_1 \cdots q_k)|^2 dq_1 \cdots dq_k$ zuzuordnen, und umgekehrt — derart,

daß diese Zuordnung linear und längentreu ist. Dabei bedeutet „Linearität“: entspricht x_1, x_2, \dots $\varphi(q_1 \cdots q_k)$ und y_1, y_2, \dots $\psi(q_1 \cdots q_k)$, so entsprechen ax_1, ax_2, \dots und $x_1 + y_1, x_2 + y_2, \dots$ bzw. $a\varphi(q_1 \cdots q_k)$ und $\varphi(q_1 \cdots q_k) + \psi(q_1 \cdots q_k)$; und „Längentreue“: für einander zugeordnete x_1, x_2, \dots und $\varphi(q_1 \cdots q_k)$ ist $\sum^v |x_v|^2 = \int_{\Omega} \cdots \int |\varphi(q_1 \cdots q_k)|^2 dq_1 \cdots dq_k$. (Das Wort „Längentreue“ rührt

daher, daß es üblich ist, die x_1, x_2, \dots und $\varphi(q_1 \cdots q_k)$ als Vektoren aufzufassen, und $\sqrt{\sum^v |x_v|^2}$ bzw. $\sqrt{\int_{\Omega} \cdots \int |\varphi(q_1 \cdots q_k)|^2 dq_1 \cdots dq_k}$ als ihre „Längen“ anzusehen.) Es gilt sogar etwas mehr: sind nämlich x_1, x_2, \dots und y_1, y_2, \dots bzw. $\varphi(q_1 \cdots q_k)$ und $\psi(q_1 \cdots q_k)$ zugeordnet, so ist

$$\sum^v x_v \bar{y}_v = \int_{\Omega} \cdots \int \varphi(q_1 \cdots q_k) \overline{\psi(q_1 \cdots q_k)} dq_1 \cdots dq_k$$

(und zwar sind beide Seiten absolut konvergent). Zu diesem letzteren Punkte ist noch zu bemerken, daß man wohl eigentlich

$$\sum_{\nu} x_{\nu} = \int_{\Omega} \cdots \int_{\Omega} \varphi(q_1 \cdots q_k) dq_1 \cdots dq_k,$$

oder etwas Ähnliches, wünschen sollte, d. h. volle Analogie zwischen Addition einerseits und Integration andererseits — aber näheres Zusehen zeigt, daß die Addition \sum_{ν} und die Integration $\int_{\Omega} \cdots \int_{\Omega} \cdots dq_1 \cdots dq_k$ in der Quantenmechanik immer nur auf Ausdrücke $x_{\nu} \bar{y}_{\nu}$ bzw. $\varphi(q_1 \cdots q_k) \overline{\psi(q_1 \cdots q_k)}$ angewendet werden.

Wie diese Zuordnung zu erfolgen hat, wollen wir hier nicht näher untersuchen, da sie uns im nächsten Kapitel ohnehin sehr eingehend beschäftigen wird. Es sei aber hervorgehoben, was ihr Bestehen bedeutet: Z und Ω sind sehr verschieden, eine Beziehung zwischen ihnen herzustellen, muß in unlösbare mathematische Schwierigkeiten führen. Hingegen sind F_Z und F_{Ω} isomorph, d. h. ihrer inneren Struktur nach identisch (sie realisieren in verschiedenen mathematischen Gebilden dieselben abstrakten Eigenschaften) — und da sie (und nicht etwa Z und Ω selbst!) das eigentliche analytische Substrat der Matrizen- bzw. Wellentheorie sind, bedeutet diese Isomorphie, daß die beiden Theorien stets dieselben numerischen Resultate ergeben müssen. D. h. dies ist der Fall, wenn der genannte Isomorphismus die Matrix

$$\bar{H} = H(\bar{Q}_1, \dots, \bar{Q}_k; \bar{P}_1, \dots, \bar{P}_k)$$

und den Operator $H = H\left(q_1, \dots, q_k; \frac{\hbar}{2\pi i} \frac{\partial}{\partial q_1}, \dots, \frac{\hbar}{2\pi i} \frac{\partial}{\partial q_k}\right)$ einander zuordnet. Da beide durch dieselben algebraischen Operationen aus den Matrizen \bar{Q}_l, \bar{P}_l ($l = 1, \dots, k$) bzw. den Funktionaloperatoren $q_1 \cdots, \frac{\hbar}{2\pi i} \frac{\partial}{\partial q_1} \cdots$ ($l = 1, \dots, k$) entstehen, genügt es zu zeigen, daß $q_1 \cdots$ der Matrix \bar{Q}_l und $\frac{\hbar}{2\pi i} \frac{\partial}{\partial q_l} \cdots$ der Matrix \bar{P}_l entspricht. Nun wurde von den \bar{Q}_l, \bar{P}_l ($l = 1, \dots, k$) nichts weiter verlangt, als daß sie die in I. 2. genannten „Vertauschungsrelationen“ erfüllen:

$$\left. \begin{aligned} \bar{Q}_m \bar{Q}_n - \bar{Q}_n \bar{Q}_m &= 0, & P_m P_n - P_n P_m &= 0 \\ Q_m P_n - P_n Q_m &\begin{cases} = 0 & \text{für } m \neq n \\ = \frac{\hbar}{2\pi i} \mathbf{1} & \text{für } m = n \end{cases} \end{aligned} \right\} (m, n = 1, 2, \dots).$$

Dies werden aber die den $q_1 \cdots, \frac{\hbar}{2\pi i} \frac{\partial}{\partial q_1} \cdots$ entsprechenden Matrizen gewiß tun, denn die Funktionaloperatoren $q_1 \cdots, \frac{\hbar}{2\pi i} \frac{\partial}{\partial q_1} \cdots$ besitzen

selbst die genannten Eigenschaften³⁶, und diese gehen bei der isomorphen Übertragung auf F_Z nicht verloren.

Da die Systeme F_Z und F_Ω isomorph, und die auf sie aufgebauten Theorien der Quantenmechanik mathematisch gleichwertig sind, ist es zu erwarten, daß ein einheitlicher, von den Zufälligkeiten des jeweils gewählten formalen Rahmens unabhängiger und nur die sachlich wesentlichen Züge der Quantenmechanik aufweisender Aufbau dann gelingen wird, wenn man nach den inneren, F_Z und F_Ω gemeinsamen Eigenschaften der Funktionengesamtheiten sucht, und diese zum Ausgangspunkte wählt.

F_Z wird allgemein als „Hilbertscher Raum“ bezeichnet. Es wird uns also in erster Linie darauf ankommen, die inneren, von der speziellen Einkleidung F_Z oder F_Ω unabhängigen, Eigenschaften des Hilbertschen Raumes aufzusuchen. Das mathematische Gebilde, das durch diese Eigenschaften beschrieben ist (und das im konkreten Einzelfalle der Rechnung F_Z oder F_Ω gleichzusetzen ist, aber für allgemeine Zwecke bequemer zu handhaben ist als diese), heiße der „abstrakte Hilbertsche Raum“.

Wir wollen also den abstrakten Hilbertschen Raum beschreiben, und dann in aller Strenge die folgenden Punkte beweisen:

1. Daß der abstrakte Hilbertsche Raum (kurz: H. R.) durch die anzugebenden Eigenschaften eindeutig gekennzeichnet ist, d. h. daß er keine wesentlich verschiedenen Interpretationen mehr zuläßt.

2. Daß seine Eigenschaften sowohl F_Z als auch F_Ω zukommen. (Damit werden die in I. 4. nur qualitativ erläuterten Dinge streng bewiesen sein.) Wenn das erfolgt ist, werden wir den so gewonnenen mathematischen Apparat zum Aufbau der Quantenmechanik verwenden.

II. Allgemeines über den abstrakten Hilbertschen Raum.

1. Charakterisierung des H. R.

Wir haben das am Schluß von I. 4. aufgestellte Programm durchzuführen: Den H. R., der die mathematische Basis zur Behandlung der Quantenmechanik abgibt, so zu charakterisieren, daß dabei keine anderen Begriffe Verwendung finden als diejenigen, die nachher in der Quantenmechanik gebraucht werden, und die demgemäß im „diskreten“ Funktionenraume F_Z der Folgen x_ν ($\nu = 1, 2, \dots$) genau so Sinn haben wie im „kontinuierlichen“ F_Ω der Wellenfunktionen $\varphi(q_1 \dots q_k)$ (q_1, \dots, q_k durchlaufen den Zustandsraum Ω). Diese Begriffe sind, wie wir schon andeuteten, die folgenden:

α) Das „skalare Multiplizieren“, d. h. das Multiplizieren einer (komplexen) Zahl a mit einem Element f des H. R.: af . In F_Z wird so aus x_ν , $a x_\nu$, in F_Ω aus $\varphi(q_1 \cdots q_k)$, $a \varphi(q_1 \cdots q_k)$.

β) Das Addieren und Subtrahieren von zwei Elementen f, g des H. R.: $f \pm g$. In F_Z wird so aus x_ν und y_ν bzw. $x_\nu \pm y_\nu$, in F_Ω aus $\varphi(q_1 \cdots q_k)$ und $\psi(q_1 \cdots q_k)$ bzw. $\varphi(q_1 \cdots q_k) \pm \psi(q_1 \cdots q_k)$.

γ) Das „innere Multiplizieren“ von zwei Elementen f, g des H. R., welches aber nicht wie α), β) ein Element des H. R., sondern eine (komplexe) Zahl ergibt: (f, g) . In F_Z wird so aus x_ν und y_ν , $\sum_\nu x_\nu \bar{y}_\nu$, in F_Ω aus $\varphi(q_1 \cdots q_k)$ und $\psi(q_1 \cdots q_k)$ $\int \cdots \int_\Omega \varphi(q_1 \cdots q_k) \bar{\psi}(q_1 \cdots q_k) dq_1 \cdots dq_k$.

(Die Definitionen in F_Z und F_Ω sind noch durch entsprechende Konvergenzbeweise zu ergänzen. Diese werden wir in II. 3. erbringen.)

Übrigens werden wir im folgenden die Punkte des H. R. konsequenterweise mit $f, g, \dots, \varphi, \psi, \dots$ bezeichnen, komplexe Zahlen mit a, b, \dots, x, y, \dots , und positive ganze Zahlen mit $k, l, m, \dots, \mu, \nu, \dots$. Den H. R. wollen wir, wo es notwendig ist, auch \mathfrak{R}_∞ nennen (als Abkürzung für „ ∞ -dimensionaler Euklidischer Raum“, analog zur üblichen Bezeichnung \mathfrak{R}_n für den „ n -dimensionalen Euklidischen Raum“ [$n = 1, 2, \dots$]).

Das Bemerkenswerte an den Operationen af , $f \pm g$, (f, g) ist, daß es genau die Grundoperationen der Vektorrechnung sind; etwa die, die die Begründung der Strecken- und Winkelrechnung in der Euklidischen Geometrie ermöglichen oder in der Punktmechanik das Rechnen mit Kraft und Arbeit. Am klarsten wird die Analogie bei F_Z , wenn man statt der x_1, x_2, \dots in \mathfrak{R}_∞ die gewöhnlichen Punkte x_1, \dots, x_n eines \mathfrak{R}_n betrachtet (für die ja die Operationen α), β), γ) genau so ausführbar sind). Für $n = 3$ insbesondere hat man die Verhältnisse des gewöhnlichen Raumes; u. U. ist es zweckmäßiger, die x_1, \dots, x_n nicht als Punkte, sondern als Vektoren (etwa vom Punkte $0, \dots, 0$ nach dem Punkte x_1, \dots, x_n weisend) aufzufassen.

Um den abstrakten H. R. zu kennzeichnen, legen wir also die vektoriellen Grundbeziehungen af , $f \pm g$, (f, g) zugrunde. Und zwar werden wir gleichzeitig mit dem \mathfrak{R}_∞ auch alle \mathfrak{R}_n mit erfassen, wie die nun folgende Diskussion es zeigen wird. Daher verwenden wir dort, wo wir uns noch nicht zwischen \mathfrak{R}_∞ und den \mathfrak{R}_n entscheiden wollen, als Terminus neutralis für den Raum, \mathfrak{R} .

Als erstes postulieren wir für \mathfrak{R} die typischen Vektoreigenschaften³⁷:

A. \mathfrak{R} ist ein linearer Raum.

D. h.: in \mathfrak{R} ist eine Addition $f + g$ und eine „skalare“ Multiplikation af definiert (f, g Elemente von \mathfrak{S} , a eine komplexe Zahl — $f + g, af$ gehören zu \mathfrak{S}) und es hat ein Element 0 ³⁸. Für diese gelten die bekannten Rechenregeln der Vektoralgebra:

$$\begin{aligned}
 f + g &= g + f && \text{(Kommutativität der Addition),} \\
 (f + g) + h &= f + (g + h) && \text{(Assoziativität der Addition),} \\
 a(f + g) &= af + ag, \quad (a + b)f = af + bf && \text{(Distributivität der} \\
 &&& \text{Multiplikation),} \\
 (ab)f &= a(bf) && \text{(Assoziativität der Multiplikation),} \\
 0f &= 0, \quad 1f = f && \text{(Rolle von Null und Eins).}
 \end{aligned}$$

Die hier nicht erwähnten Rechengesetze folgen aus diesen Postulaten mühelos. Z. B. die Rolle der Null bei der Addition:

$$f + 0 = 1 \cdot f + 0 \cdot f = (1 + 0) \cdot f = 1 \cdot f = f.$$

Oder die eindeutige Möglichkeit der Subtraktion: Wir definieren

$$\text{dann ist} \quad -f = (-1) \cdot f, \quad f - g = f + (-g),$$

$$\left. \begin{aligned}
 (f - g) + g &= (f + (-g)) + g \\
 &= f + ((-g) + g), \\
 (f + g) - g &= (f + g) + (-g) \\
 &= f + (g + (-g)),
 \end{aligned} \right\} \begin{aligned}
 &= f + ((-1) \cdot g + 1 \cdot g) \\
 &= f + ((-1) + 1) \cdot g \\
 &= f + 0 \cdot g = f + 0 = f.
 \end{aligned}$$

Oder die Distributivgesetze der Multiplikation beim Subtrahieren:

$$\begin{aligned}
 a \cdot (f - g) &= a \cdot f + a \cdot (-g) = af + a \cdot ((-1) \cdot g) = af + (a \cdot (-1)) \cdot g \\
 &= af + ((-1) \cdot a) \cdot g = af + (-ag) = af - ag, \\
 (a - b) \cdot f &= a \cdot f + (-b) \cdot f = af + ((-1)b) \cdot f = af + (-bf) = af - bf.
 \end{aligned}$$

Es lohnt sich nicht, diese Dinge weiter zu verfolgen, da es ohne weiteres einleuchtet, daß hier alle Rechenregeln der linearen Vektorrechnung gültig bleiben.

Wir können daher, wie bei Vektoren, definieren, wann gewisse Elemente f_1, \dots, f_k von \mathfrak{S} linear unabhängig sind:

Definition 1. f_1, \dots, f_k sind linear unabhängig, wenn aus $a_1 f_1 + \dots + a_k f_k = 0$ (a_1, \dots, a_k komplexe Zahlen) $a_1 = \dots = a_k = 0$ folgt.

Weiter definieren wir das Analogon der linearen Gebilde der Vektorrechnung (durch den Nullpunkt gehende Gerade, Ebene, usw.), die lineare Mannigfaltigkeit.

Definition 2. Eine Teilmenge \mathfrak{M} von \mathfrak{R} heißt lineare Mannigfaltigkeit, wenn sie mit irgendwelchen $k (= 1, 2, \dots)$ ihrer Elemente f_1, \dots, f_k auch deren Linearaggregate $a_1 f_1 + \dots + a_k f_k$ mit enthält³⁹. — Wenn \mathfrak{M} eine beliebige Teilmenge von \mathfrak{R} ist, so ist die Menge aller $a_1 f_1 + \dots + a_k f_k$ ($k = 1, 2, \dots$, a_1, \dots, a_k beliebige komplexe Zahlen, f_1, \dots, f_k beliebige Elemente von \mathfrak{M}) eine lineare Mannigfaltigkeit, die offenbar \mathfrak{M} enthält; und es ist klar, daß sie Teilmenge einer jeden

anderen, \mathfrak{A} enthaltenden linearen Mannigfaltigkeit ist. Sie heie „die von \mathfrak{A} aufgespannte lineare Mannigfaltigkeit“, in Zeichen: $\{\mathfrak{A}\}$.

Ehe wir diese Begriffe weiter ausgestalten, formulieren wir das nchste Grundprinzip der Vektorrechnung, die Existenz des inneren Produktes:

B. In \mathfrak{R} ist ein Hermitesches inneres Produkt definiert.

D. h.: Es ist (f, g) definiert (f, g von \mathfrak{S} — (f, g) eine komplexe Zahl), und es hat die folgenden Eigenschaften:

$$(f' + f'', g) = (f', g) + (f'', g) \quad (\text{Distributivitt des ersten Faktors}),$$

$$(a \cdot f, g) = a \cdot (f, g) \quad (\text{Assoziativitt des ersten Faktors}),$$

$$(f, g) = \overline{(g, f)} \quad (\text{Hermitesche Symmetrie}),$$

$$(f, f) \geq 0, \quad \text{und nur } = 0 \text{ fr } f = 0 \quad ^{40} \quad (\text{Definitt}).$$

Aus den zwei Eigenschaften des ersten Faktors folgt brigens wegen der Hermiteschen Symmetrie Entsprechendes fr den zweiten Faktor (man vertausche die f und g , und nehme von beiden Seiten das komplex Konjugierte):

$$(f, g' + g'') = (f, g') + (f, g''),$$

$$(f, a \cdot g) = \bar{a} \cdot (f, g).$$

Dieses innere Produkt ist von groer Wichtigkeit, weil es die Definition der Entfernung ermglicht. Im Euklidischen Raume wird bekanntlich der Betrag eines Vektors f durch $\|f\| = \sqrt{(f, f)}$ definiert⁴¹, und die Entfernung von zwei Punkten f, g durch $\|f - g\|$. Hieran wollen wir anknpfen.

Definition 3. Der „Betrag“ eines f von \mathfrak{R} ist $\|f\| = \sqrt{(f, f)}$, die „Entfernung“ zweier f, g $\|f - g\|$ ⁴².

Da dieser Begriff wirklich alle Eigenschaften der Entfernung hat, werden wir gleich sehen. Wir beweisen zu diesem Zwecke:

Satz I. Es ist stets $|(f, g)| \leq \|f\| \cdot \|g\|$.

Beweis: Zunchst ist (wenn $z = u + iv$ eine komplexe Zahl ist — u, v reell —, so sind $\text{Re } z, \text{Im } z$ der Real- bzw. Imaginrteil von z , d. h. $\text{Re } z = u, \text{Im } z = v$)

$$\|f\|^2 + \|g\|^2 - 2\text{Re}(f, g) = (f, f) + (g, g) - (f, g) - (g, f) = (f - g, f - g) \geq 0,$$

$$\text{Re}(f, g) \leq \frac{1}{2}(\|f\|^2 + \|g\|^2).$$

Ersetzen wir f, g durch $af, \frac{1}{a}g$ (a reell und > 0), so ndert sich die linke Seite, wie man leicht erkennt, nicht. Aus der rechten aber wird $\frac{1}{2}(a^2\|f\|^2 + \frac{1}{a^2}\|g\|^2)$. Da dies $\geq \text{Re}(f, g)$ ist, gilt dies auch noch fr sein Minimum, welches $\|f\| \cdot \|g\|$ betrgt (wird fr $f, g \neq 0$ bei $a = \sqrt{\frac{\|g\|}{\|f\|}}$ angenommen, fr $f = 0$ bzw. $g = 0$ fr $a \rightarrow +\infty$ bzw.

→ + 0 approximiert). Also ist

$$\operatorname{Re}(f, g) \leq \|f\| \cdot \|g\|.$$

Ersetzen wir hierin f, g durch $e^{i\alpha}f, g$ (α reell), so ändert sich die rechte Seite nicht (weil

$$(af, af) = a\bar{a}(f, f) = |a|^2(f, f), \quad \|af\| = |a| \cdot \|f\|$$

ist, also für $|a| = 1$ ($\|af\| = \|f\|$)), während die linke in

$$\operatorname{Re}(e^{i\alpha}(f, g)) = \cos \alpha \operatorname{Re}(f, g) - \sin \alpha \operatorname{Im}(f, g)$$

übergeht. Dies hat offenbar das Maximum

$$\sqrt{(\operatorname{Re}(f, g))^2 + (\operatorname{Im}(f, g))^2} = |(f, g)|,$$

woraus die Behauptung folgt:

$$|(f, g)| \leq \|f\| \cdot \|g\|.$$

Zusatz. Damit das Gleichheitszeichen gelte, müssen f, g bis auf einen konstanten (komplexen) Faktor übereinstimmen.

Beweis: Für $\operatorname{Re}(f, g) \leq \frac{1}{2}(\|f\|^2 + \|g\|^2)$ muß sogar $(f-g, f-g) = 0$ sein, d. h. $f = g$. Beim Übergang von dieser Beziehung zu $|(f, g)| \leq \|f\| \cdot \|g\|$ werden f, g durch $e^{i\alpha}af, \frac{1}{a}g$ (a, α reell, $a > 0$) ersetzt, wenn nicht f oder $g = 0$ ist. Damit darin = gelte, muß also $e^{i\alpha}af = \frac{1}{a}g$, $g = a^2e^{i\alpha}f = cf$ ($c \neq 0$) sein. Umgekehrt: für f oder $g = 0$ oder $g = cf$ ($c \neq 0$) gilt offenbar das =-Zeichen.

Satz 2. Es ist stets $\|f\| \geq 0$, und zwar = 0 nur für $f = 0$. Es ist $\|a \cdot f\| = |a| \cdot \|f\|$. Es ist stets $\|f + g\| \leq \|f\| + \|g\|$, das =-Zeichen gilt nur, wenn f, g bis auf einen konstanten, reellen und ≥ 0 , Faktor übereinstimmen.

Beweis: Die zwei ersten Behauptungen haben wir schon w. o. als richtig erkannt. Die Ungleichheit der dritten beweist man so:

$$(f + g, f + g) = (f, f) + (g, g) + (f, g) + (g, f) = \|f\|^2 + \|g\|^2 + 2\operatorname{Re}(f, g) \leq \|f\|^2 + \|g\|^2 + 2\|f\| \cdot \|g\| = (\|f\| + \|g\|)^2,$$

$$\|f + g\| \leq \|f\| + \|g\|.$$

Damit = gelte, muß $\operatorname{Re}(f, g) = \|f\| \cdot \|g\|$ sein, was auf Grund der Betrachtungen des obigen Zusatzes f oder $g = 0$ oder $g = a^2f = cf$ (c reell, > 0) nach sich zieht. Daß in diesem Falle wirklich = gilt, ist klar.

Aus Satz 2. folgt nun sofort, daß die Entfernung $\|f - g\|$ die folgenden Eigenschaften hat: f, g haben die Entfernung 0 für $f = g$, und sonst nie. g, f haben dieselbe Entfernung wie f, g . Die Entfernung von f, h ist \leq als die Summe der Entfernungen von f, g und g, h . Das =-Zeichen gilt nur, wenn $g = af + (1-a)h$ ist (a reell, $0 \leq a \leq 1$)⁴³. Die Entfernung von af, ag ist $|a|$ -mal die Entfernung von f, g .

Das sind aber gerade diejenigen Eigenschaften des Entfernungsbegriffes, die in der Geometrie (und Topologie) die Zurückführung der Begriffe Stetigkeit, Beschränktheit, Häufungspunkt usw. auf den Entfernungsbegriff ermöglichen. Hiervon wollen wir Gebrauch machen, und definieren:

Eine Funktion $F(f)$ in \mathfrak{R} (d. h. für die f von \mathfrak{R} definiert, und als Werte entweder stets Punkte von \mathfrak{R} oder stets komplexe Zahlen annehmend) ist an der Stelle f_0 (in \mathfrak{R}) stetig, wenn zu jedem $\varepsilon > 0$ ein $\delta > 0$ existiert, so daß $\|f - f_0\| < \delta$ die Ungleichheit $\|F(f) - F(f_0)\| < \varepsilon$ bzw. $|F(f) - F(f_0)| < \varepsilon$ (je nachdem die F -Werte \mathfrak{R} -Punkte sind oder Zahlen) nach sich zieht. Dieselbe Funktion heißt in \mathfrak{R} bzw. einer gegebenen Teilmenge von \mathfrak{R} beschränkt, wenn dort durchweg $\|F(f)\| \leq C$ bzw. $|F(f)| \leq C$ gilt (C eine geeignet, aber fest, gewählte Konstante). Analoge Definitionen gelten für mehrere Variablen. — Eine Folge f_1, f_2, \dots konvergiert gegen f oder hat den Limes f , wenn die Zahlen $\|f_1 - f\|, \|f_2 - f\|, \dots$ gegen Null konvergieren. Ein Punkt ist Häufungspunkt einer Menge \mathfrak{A} (Teilmenge von \mathfrak{R} !), wenn es Limes einer Folge aus \mathfrak{A} ist⁴⁴. — Insbesondere heißt \mathfrak{A} abgeschlossen, wenn alle seine Häufungspunkte zu ihm gehören; und es heißt überall dicht, wenn seine Häufungspunkte ganz \mathfrak{R} umfassen.

Wir stellen noch fest, daß $af, f + g, (f, g)$ in allen ihren Variablen \setminus stetig sind. Wegen

$$\|af - af'\| = |a| \cdot \|f - f'\|,$$

$$\|(f + g) - (f' + g')\| = \|(f - f') + (g - g')\| \leq \|f - f'\| + \|g - g'\|$$

sind die zwei ersten Behauptungen klar. Ferner folgt aus

$$\|f - f'\| < \varepsilon, \|g - g'\| < \varepsilon,$$

wenn wir $f' - f = \varphi, g' - g = \psi$ setzen,

$$\begin{aligned} |(f, g) - (f', g')| &= |(f, g) - (f + \varphi, g + \psi)| = |(\varphi, g) + (f, \psi) + (\varphi, \psi)| \\ &\leq |(\varphi, g)| + |(f, \psi)| + |(\varphi, \psi)| \\ &\leq \|\varphi\| \cdot \|g\| + \|f\| \cdot \|\psi\| + \|\varphi\| \cdot \|\psi\| \\ &\leq \varepsilon(\|f\| + \|g\| + \varepsilon). \end{aligned}$$

Mit $\varepsilon \rightarrow 0$ strebt dies gegen 0, kann also kleiner als jedes $\delta > 0$ gemacht werden.

Die Eigenschaften **A.**, **B.** lassen uns, wie man sieht, recht viel über \mathfrak{R} aussagen, aber doch nicht genug, um die \mathfrak{R}_n voneinander und von \mathfrak{R} unterscheiden zu können: von der Dimensionszahl war ja noch keine Rede. Diese hängt aber bekanntlich mit der Maximalzahl linear unabhängiger Vektoren zusammen. Wenn es eine solche Maximalzahl $n = 0, 1, 2, \dots$ gibt, so gilt für dieses n :

C⁽ⁿ⁾. Es gibt genau n linear unabhängige Vektoren.

D. h.: es ist wohl möglich, n solche Vektoren anzugeben, aber $n + 1$ gibt es nicht.

Existiert dagegen keine Maximalzahl, so haben wir:

$C^{(\infty)}$. Es gibt beliebige viele linear unabhängige Vektoren.

D. h.: für jedes $k = 1, 2, \dots$ kann man k solche Vektoren angeben.

C . ist also kein eigentliches neues Postulat: gelten $A.$, $B.$, so muß ein $C^{(n)}$. oder $C^{(\infty)}$. gelten. Je nachdem für welches wir uns entscheiden, erhalten wir einen anderen Raum \mathfrak{R} . Wir werden sehen, daß aus $C^{(n)}$. folgt, daß \mathfrak{R} alle Eigenschaften des n -dimensionalen (komplexen) Euklidischen Raumes hat. $C^{(\infty)}$. genügt dagegen noch nicht, um die Wesensgleichheit von \mathfrak{R} mit dem H. R. \mathfrak{R}_∞ zu sichern, wir brauchen vielmehr noch zwei Postulate $D.$, $E.$ dazu. Präziser stehen die Dinge so: Wir werden zeigen, daß ein \mathfrak{R} mit $A.$, $B.$, $C^{(n)}$. alle Eigenschaften des \mathfrak{R}_n hat, insbesondere auch die gleich zu nennenden $D.$, $E.$ (welche also aus $A.$, $B.$, $C^{(n)}$. folgen). Ferner werden wir zeigen, daß ein \mathfrak{R} mit $A.$, $B.$, $C^{(\infty)}$., $D.$, $E.$ alle Eigenschaften des \mathfrak{R}_∞ hat, aber daß dabei $D.$, $E.$ wesentlich sind (d. h. aus $A.$, $B.$, $C^{(\infty)}$. folgen sie nicht). Wir gehen also dazu über, $D.$, $E.$ zu formulieren, den Nachweis aber, daß alle \mathfrak{R}_n , \mathfrak{R}_∞ auch diese Eigenschaften besitzen, werden wir erst später erbringen (vgl. II. 3).

D. \mathfrak{R} ist vollständig⁴⁵.

D. h.: Wenn eine Folge f_1, f_2, \dots in \mathfrak{R} der Cauchyschen Konvergenzbedingung genügt (zu jedem $\varepsilon > 0$ existiert ein $N = N(\varepsilon)$, so daß aus $m, n \geq N$ $\|f_m - f_n\| < \varepsilon$ folgt), so ist sie konvergent, d. h. sie besitzt einen Limes f (vgl. die w. o. erfolgte Definition dieses Begriffes).

E. \mathfrak{R} ist separabel⁴⁵.

D. h.: Es gibt eine Folge f_1, f_2, \dots in \mathfrak{R} , die in \mathfrak{R} überall dicht ist.

In II. 2. werden wir, wie angekündigt, auf dieser Grundlage die „Geometrie“ von \mathfrak{R} entwickeln, und ihre Übereinstimmung mit derjenigen von \mathfrak{R}_n bzw. \mathfrak{R}_∞ erkennen.

2. Geometrie des H. R.

Wir beginnen mit zwei Definitionen. Die erste enthält von der geometrischen Winkelrechnung gerade soviel, als für unsere Zwecke nötig ist: den Begriff des rechten Winkels — der Orthogonalität.

Definition 4. Zwei f, g von \mathfrak{R} sind orthogonal, wenn $(f, g) = 0$ ist. Zwei lineare Mannigfaltigkeiten $\mathfrak{M}, \mathfrak{N}$ sind es, wenn jedes Element von \mathfrak{M} zu jedem von \mathfrak{N} orthogonal ist. — Eine Menge \mathfrak{D} heißt ein normiert orthogonales System, wenn für alle f, g von \mathfrak{D}

$$(f, g) = \begin{cases} 1 & \text{für } f = g \\ 0 & \text{für } f \neq g \end{cases}$$

ist (d. h.: je zwei verschiedene Elemente sind orthogonal, und jedes Element hat den Betrag 1⁴⁶). Insbesondere soll \mathfrak{D} vollständig heißen, wenn es nicht Teilmenge eines anderen normierten Orthogonalsystems sein kann, welches noch weitere Elemente besitzt⁴⁷.

Wir bemerken noch: Daß das normierte Orthogonalsystem \mathfrak{D} vollständig ist, besagt offenbar, daß kein f mit $\|f\| = 1$ existiert, das zu ganz \mathfrak{D} orthogonal ist (vgl. Anm. 46). Wäre aber bloß $f \neq 0$ und f zu ganz \mathfrak{D} orthogonal, so wäre für $f' = \frac{1}{\|f\|} \cdot f$ (es ist ja $\|f\| > 0$) alles Obige erfüllt: $\|f'\| = \frac{1}{\|f\|} \cdot \|f\| = 1$, f' zu \mathfrak{D} orthogonal. Also besagt die Vollständigkeit von \mathfrak{D} : jedes zu ganz \mathfrak{D} orthogonale f muß verschwinden.

Die zweite Definition ist derart, daß sie bloß in \mathfrak{R}_∞ eine wesentliche Rolle spielt, da in \mathfrak{R}_n jede lineare Mannigfaltigkeit von der in ihr beschriebenen Art ist (vgl. am Ende von II. 3). Daher können wir kein geometrisch-anschauliches Bild von ihr geben.

Definition 5. Eine lineare Mannigfaltigkeit, die gleichzeitig abgeschlossen ist, heie eine abgeschlossene lineare Mannigfaltigkeit. Wenn \mathfrak{A} irgendeine Menge in \mathfrak{R} ist, und wir zu $\{\mathfrak{A}\}$ (der von \mathfrak{A} aufgespannten linearen Mannigfaltigkeit) alle seine Hufungspunkte hinzufgen, so entsteht eine abgeschlossene lineare Mannigfaltigkeit, die \mathfrak{A} enthlt. Und zwar ist sie Teilmenge einer jeden anderen abgeschlossenen linearen Mannigfaltigkeit, die auch \mathfrak{A} enthlt⁴⁸. Wir nennen sie die von \mathfrak{A} aufgespannte abgeschlossene lineare Mannigfaltigkeit, in Zeichen: $[\mathfrak{A}]$.

Nunmehr gehen wir zur genaueren Analyse von \mathfrak{R} , insbesondere der vollstndigen normierten Orthogonalsysteme ber. Bei Stzen, die auer **A.**, **B.** auch **C⁽ⁿ⁾**. oder **C^(∞)**., **D.**, **E.** voraussetzen, fgen wir den Index ⁽ⁿ⁾ bzw. ^(∞) hinzu; solche aber, die in beiden Fllen gelten, erhalten keinen Index.

Satz 3⁽ⁿ⁾. Jedes normierte Orthogonalsystem hat $\leq n$ Elemente, vollstndig ist es dann und nur dann, wenn es n Elemente hat.

Bemerkung: Aus der ersten Behauptung folgt, da es fr normierte Orthogonalsysteme eine maximale Elementezahl gibt; diejenigen Systeme, die dieselbe erreichen, sind nach Definition vollstndig. Somit gibt es im Falle **C⁽ⁿ⁾**. vollstndige Orthogonalsysteme, sie haben nach obigem n Elemente: $\varphi_1, \varphi_2, \dots, \varphi_n$.

Beweis: Jedes normierte Orthogonalsystem ist (wenn es endlich ist) linear unabhngig. Es heie etwa $\varphi_1, \varphi_2, \dots, \varphi_m$, aus

$$a_1\varphi_1 + \dots + a_m\varphi_m = 0$$

folgt durch innere Produktbildung mit φ_μ ($\mu = 1, 2, \dots, m$) $a_\mu = 0$. Folglich kann es nach **C⁽ⁿ⁾**. nicht $n + 1$ Elemente haben, ein beliebiges normiertes Orthogonalsystem kann also keine Teilmenge mit $n + 1$ Elementen haben. Daher ist es endlich, und hat $\leq n$ Elemente.

Eines mit n Elementen läßt somit keine Erweiterung zu, ist also vollständig. Eines mit $m < n$ Elementen, $\varphi_1, \varphi_2, \dots, \varphi_m$, ist aber nicht vollständig: Denn da es unter den Linearaggregaten $a_1\varphi_1 + \dots + a_m\varphi_m$ keine $n > m$ linear unabhängige gibt, gibt es nach $C^{(n)}$ solche f , die von allen $a_1\varphi_1 + \dots + a_m\varphi_m$ verschieden sind, d. h.

$$\psi = f - a_1\varphi_1 - \dots - a_m\varphi_m \neq 0$$

ist immer $\neq 0$. Nun bedeutet $(\psi, \varphi_\mu) = 0$ $a_\mu = (f, \varphi_\mu)$ ($\mu = 1, 2, \dots, m$), es ist also für alle μ erreichbar — also unser System unvollständig.

Satz 3^(\infty). Jedes normierte Orthogonalsystem ist endlich oder eine (abzählbar-) unendliche Folge; wenn es vollständig ist, so ist sie sicher unendlich.

Bemerkung: Wir können daher alle normierten Orthogonalsysteme als (eventuell abbrechende, d. h. endliche) Folgen schreiben: $\varphi_1, \varphi_2, \dots$, was auch geschehen soll. Man beachte, daß die Anzahl der Elemente des Systems für seine Vollständigkeit nur notwendig ist, aber nicht hinreichend⁴⁹, nicht wie bei $C^{(n)}$.

Beweis: Sei \mathfrak{D} ein normiertes Orthogonalsystem, f, g zwei verschiedene Elemente von ihm. Dann ist

$$(f - g, f - g) = (f, f) + (g, g) - (f, g) - (g, f) = 2, \quad \|f - g\| = \sqrt{2}.$$

Sei nun f_1, f_2, \dots die nach **E.** vorhandene, in \mathfrak{R} überall dichte Folge. Für jedes f von \mathfrak{D} existiert ein f_m dieser Folge mit $\|f - f_m\| < \frac{1}{2}\sqrt{2}$. Für f, g müssen die entsprechenden f_m, f_n verschieden sein, denn aus $f_m = f_n$ folgte

$$\|f - g\| = \|(f - f_m) - (g - f_m)\| \leq \|f - f_m\| + \|g - f_m\| < \frac{1}{2}\sqrt{2} + \frac{1}{2}\sqrt{2} = \sqrt{2}.$$

Also entspricht jedem f von \mathfrak{D} ein f_m aus der Folge f_1, f_2, \dots , und zwar verschiedenen f verschiedene f_m . Daher ist \mathfrak{D} endlich oder eine Folge.

Wie beim Beweise von **Satz 3⁽ⁿ⁾**, zeigt man: wenn es $> m$ linear unabhängige Elemente in \mathfrak{R} gibt, kann ein System $\varphi_1, \varphi_2, \dots, \varphi_m$ nicht vollständig sein. Da aber dies nach $C^{(\infty)}$ für alle m gilt, muß ein vollständiges System unendlich sein.

Die nun folgenden Sätze beziehen sich, soweit in ihnen von Konvergenz die Rede ist, nur auf $C^{(\infty)}$, — es ist aber, schon wegen ihrer übrigen Aussagen, besser, sie allgemein zu formulieren.

Satz 4. $\varphi_1, \varphi_2, \dots$ sei ein normiertes Orthogonalsystem. Dann sind alle Reihen $\sum^v (f, \varphi_v) \overline{(g, \varphi_v)}$, soweit sie überhaupt unendlich viele Glieder haben, absolut konvergent. Insbesondere für $f = g$ ist stets $\sum^v |(f, \varphi_v)|^2 \leq \|f\|^2$.

Beweis: Sei $a_v = (f, \varphi_v)$, $v = 1, 2, \dots$, dann ist $f - \sum_1^N a_v \varphi_v = \psi$ zu allen φ_v , $v = 1, 2, \dots, N$, orthogonal (vgl. den Beweis von **Satz 3⁽ⁿ⁾**).

Es ist $f = \sum_1^N a_\nu \varphi_\nu + \psi$, also

$$\begin{aligned}(f, f) &= \sum_1^N a_\nu \overline{a_\nu} (\varphi_\nu, \varphi_\nu) + \sum_1^N a_\nu (\varphi_\nu, \psi) + \sum_1^N \overline{a_\nu} (\psi, \varphi_\nu) + (\psi, \psi) \\ &= \sum_1^N |a_\nu|^2 + (\psi, \psi) \geq \sum_1^N |a_\nu|^2,\end{aligned}$$

d. h. $\sum_1^N |a_\nu|^2 \leq \|f\|^2$. Ist das System $\varphi_1, \varphi_2, \dots$ endlich, so folgt hieraus sofort $\sum_\nu |a_\nu|^2 \leq \|f\|^2$; ist es unendlich, so ergibt $N \rightarrow \infty$, die (absolute) Konvergenz von $\sum_\nu |a_\nu|^2$, sowie daß es $\leq \|f\|^2$ ist. Die zweite Behauptung ist damit bewiesen.

Wegen $|(f, \varphi_\nu) \overline{(g, \varphi_\nu)}| \leq \frac{1}{2} \{ |(f, \varphi_\nu)|^2 + |(g, \varphi_\nu)|^2 \}$ folgt aber aus unserem Konvergenzresultat auch die allgemeinere Konvergenzaussage der ersten Behauptung.

Satz 5. Sei $\varphi_1, \varphi_2, \dots$ ein unendliches normiertes Orthogonalsystem. Dann konvergiert die Reihe $\sum_1^\infty x_\nu \varphi_\nu$ dann und nur dann, wenn es $\sum_1^\infty |x_\nu|^2$ tut (die letztere Reihe hat reelle Zahlen ≥ 0 als Glieder, ist also konvergent oder eigentlich divergent gegen $+\infty$).

Beweis: Nur für $C^{(\infty)}$ liegt eine Behauptung vor, wir dürfen also **D.**, das Cauchysche Konvergenzkriterium, verwenden. $\sum_1^\infty x_\nu \varphi_\nu$ konvergiert, d. h., die Folge der $\sum_1^N x_\nu \varphi_\nu$ konvergiert für $N \rightarrow \infty$ demnach dann, wenn zu jedem $\varepsilon > 0$ ein $N = N(\varepsilon)$ existiert, so daß für $L, M \geq N$ $\| \sum_1^L x_\nu \varphi_\nu - \sum_1^M x_\nu \varphi_\nu \| < \varepsilon$ ist. Wir nehmen $L > M \geq N$ an, dann ist

$$\| \sum_1^L x_\nu \varphi_\nu - \sum_1^M x_\nu \varphi_\nu \| = \| \sum_{M+1}^L x_\nu \varphi_\nu \| < \varepsilon,$$

$$\begin{aligned}\| \sum_{M+1}^L x_\nu \varphi_\nu \|^2 &= \left(\sum_{M+1}^L x_\nu \varphi_\nu, \sum_{M+1}^L x_\nu \varphi_\nu \right) = \sum_{M+1}^L a_\nu \overline{a_\nu} (\varphi_\nu, \varphi_\nu) = \sum_{M+1}^L |x_\nu|^2 \\ &= \sum_1^L |x_\nu|^2 - \sum_1^M |x_\nu|^2,\end{aligned}$$

also

$$0 \leq \sum_1^L |x_\nu|^2 - \sum_1^M |x_\nu|^2 < \varepsilon^2.$$

Dies ist aber genau die Cauchysche Konvergenzbedingung für die Folge $\sum_1^N |x_\nu|^2$, $N \rightarrow \infty$, d. h. für die Reihe $\sum_1^\infty |x_\nu|^2$.

Zusatz. Für $f = \sum_\nu x_\nu \varphi_\nu$ ist $(f, \varphi_\nu) = x_\nu$ (einerlei ob das Orthogonalsystem endlich oder unendlich ist, im letzteren Falle natürlich unter Voraussetzung der Konvergenz).

Beweis: Für $N \geq \nu$ ist $(\sum_1^N x_\mu \varphi_\mu, \varphi_\nu)$ gleich

$$\sum_1^N x_\mu (\varphi_\mu, \varphi_\nu) = x_\nu.$$

Bei endlichem System $\varphi_1, \varphi_2, \dots$ können wir N dem höchsten Index gleichsetzen; bei unendlichem System $\varphi_1, \varphi_2, \dots$ können wir, mit Rücksicht auf die Stetigkeit des inneren Produktes $N \rightarrow \infty$ lassen. In beiden Fällen wird $(f, \varphi_\mu) = x_\mu$ herauskommen.

Satz 6. Sei $\varphi_1, \varphi_2, \dots$ ein normiertes Orthogonalsystem, f beliebig. $f' = \sum_\nu x_\nu \varphi_\nu$, $x_\nu = (f, \varphi_\nu)$ ($\nu = 1, 2, \dots$) ist, wenn die Reihe überhaupt unendlich ist, immer konvergent. $f - f'$ ist zu $\varphi_1, \varphi_2, \dots$ orthogonal.

Beweis: Die Konvergenz folgt aus **Satz 4.**, **5.**, und nach dem Zusatz zu **Satz 5.** ist $(f', \varphi_\nu) = x_\nu = (f, \varphi_\nu)$, $(f - f', \varphi_\nu) = 0$.

Wir können nach diesen Vorbereitungen allgemeine, d. h. auch bei $C^{(\infty)}$ gültige Kriterien der Vollständigkeit normierter Orthogonalsysteme angeben.

Satz 7. Sei $\varphi_1, \varphi_2, \dots$ ein normiertes Orthogonalsystem. Für die Vollständigkeit ist dann eine jede der folgenden Bedingungen notwendig und hinreichend:

α) Die von $\varphi_1, \varphi_2, \dots$ aufgespannte abgeschlossene lineare Mannigfaltigkeit $[\varphi_1, \varphi_2, \dots]$ ist gleich \mathfrak{R} .

β) Es ist stets $f = \sum_\nu x_\nu \varphi_\nu$, $x_\nu = (f, \varphi_\nu)$ ($\nu = 1, 2, \dots$, Konvergenz nach **Satz 6.**).

γ) Es ist stets

$$(f, g) = \sum_\nu (f, \varphi_\nu) \overline{(g, \varphi_\nu)}.$$

(absolute Konvergenz nach **Satz 4.**).

Beweis: Wenn $\varphi_1, \varphi_2, \dots$ vollständig ist, so ist $f = \sum_\nu x_\nu \varphi_\nu$ ($x_\nu = (f, \varphi_\nu)$, $\nu = 1, 2, \dots$), da es nach **Satz 6.** zu $\varphi_1, \varphi_2, \dots$ orthogonal ist, gleich 0. D. h. **β)** ist erfüllt. Gilt **β)**, so ist jedes f der Limes seiner $\sum_1^N x_\nu \varphi_\nu$, $N \rightarrow \infty$ (wenn $\varphi_1, \varphi_2, \dots$ überhaupt unendlich ist), gehört also zu $[\varphi_1, \varphi_2, \dots]$. Daher ist dann $[\varphi_1, \varphi_2, \dots] = \mathfrak{R}$, d. h. **α)** erfüllt. Gilt **α)**, so schließen wir so: Ist f zu allen $\varphi_1, \varphi_2, \dots$ orthogonal, so ist es auch zu ihren Linearaggregaten und aus Stetigkeitsgründen auch zu deren Häufungspunkten orthogonal, d. h. zu ganz $[\varphi_1, \varphi_2, \dots]$. Also zu ganz \mathfrak{R} , also auch zu sich selbst: $(f, f) = 0$, $f = 0$. Somit ist $\varphi_1, \varphi_2, \dots$ vollständig.

Wir haben also das logische Schema

$$\text{Vollständigkeit} \rightarrow \beta) \rightarrow \alpha) \rightarrow \text{Vollständigkeit},$$

d. h. **α)**, **β)** sind als notwendig und hinreichend erkannt.

Aus **γ)** folgt: Ist f zu allen $\varphi_1, \varphi_2, \dots$ orthogonal, so setzen wir $f = g$, dann erhalten wir $(f, f) = \sum_\nu 0 \cdot 0 = 0$, $f = 0$; d. h. $\varphi_1, \varphi_2, \dots$

ist vollständig. Andererseits folgt aus β) (das ja der Vollständigkeit gleichbedeutend ist):

$$\begin{aligned}(f, g) &= \lim_{N \rightarrow \infty} \left(\sum_1^N (f, \varphi_\nu) \cdot \varphi_\nu, \sum_1^N (g, \varphi_\nu) \cdot \varphi_\nu \right) \\ &= \lim_{N \rightarrow \infty} \sum_1^N (f, \varphi_\mu) \overline{(g, \varphi_\nu)} \cdot (\varphi_\mu, \varphi_\nu) \\ &= \lim_{N \rightarrow \infty} \sum_1^N (f, \varphi_\nu) \overline{(g, \varphi_\nu)} = \sum_1^\infty (f, \varphi_\nu) \overline{(g, \varphi_\nu)}\end{aligned}$$

(ist das System $\varphi_1, \varphi_2, \dots$ endlich, so sind die Grenzübergänge überflüssig), d. h. γ). Also ist auch γ) notwendig und hinreichend.

Satz 8. Zu jeder Folge f_1, f_2, \dots gibt es ein normiertes Orthogonalsystem $\varphi_1, \varphi_2, \dots$, das dieselbe Linearmannigfaltigkeit aufspannt wie die ersteren (beide Folgen können im Endlichen abbrechen).

Beweis: Zunächst ersetzen wir f_1, f_2, \dots durch eine Teilfolge g_1, g_2, \dots , welche dieselbe Linearmannigfaltigkeit aufspannt, und aus lauter linear unabhängigen Elementen besteht. Das geschieht so: sei g_1 das erste f_n , das von 0 verschieden ist; g_2 das erste f_n , das von allen $a_1 g_1$ verschieden ist; g_3 das erste f_n , das von allen $a_1 g_1 + a_2 g_2$ verschieden ist; (Wenn für irgendein p kein f_n existiert, das von allen $a_1 g_1 + \dots + a_p g_p$ verschieden ist, so brechen wir mit g_p ab.) Diese g_1, g_2, \dots leisten offenbar das Gewünschte.

Und nun bilden wir (dies ist das sog. „Orthogonalisationsverfahren“ von E. SCHMIDT)

$$\begin{aligned}\gamma_1 &= g_1, & \varphi_1 &= \frac{1}{\|\gamma_1\|} \cdot \gamma_1, \\ \gamma_2 &= g_2 - (g_2, \varphi_1) \cdot \varphi_1, & \varphi_2 &= \frac{1}{\|\gamma_2\|} \cdot \gamma_2, \\ \gamma_3 &= g_3 - (g_3, \varphi_1) \cdot \varphi_1 - (g_3, \varphi_2) \cdot \varphi_2, & \varphi_3 &= \frac{1}{\|\gamma_3\|} \cdot \gamma_3, \\ & \dots & & \dots\end{aligned}$$

Jede φ_p -Konstruktion ist wirklich möglich, d. h. die Nenner $\|\gamma_p\|$ sind $\neq 0$: denn sonst wäre $\gamma_p = 0$, also g_p Linearaggregat der $\varphi_1, \dots, \varphi_{p-1}$, d. h. der g_1, \dots, g_{p-1} , entgegen der Annahme. Ferner ist klar, daß g_p Linearaggregat der $\varphi_1, \dots, \varphi_p$ ist und φ_p Linearaggregat der g_1, \dots, g_p — also bestimmen g_1, g_2, \dots und $\varphi_1, \varphi_2, \dots$ dieselbe Linearmannigfaltigkeit.

Schließlich ist nach Konstruktion $\|\varphi_p\| = 1$, und für $q < p$ $(\gamma_p, \varphi_q) = 0$, also $(\varphi_p, \varphi_q) = 0$. Da wir p, q vertauschen können, gilt letzteres stets für $p \neq q$. $\varphi_1, \varphi_2, \dots$ ist also ein normiertes Orthogonalsystem.

Satz 9. Zu jeder abgeschlossenen Linearmannigfaltigkeit \mathfrak{M} gibt es ein normiertes Orthogonalsystem, das gerade \mathfrak{M} als abgeschlossene Linearmannigfaltigkeit aufspannt.

Beweis: Im Falle $C^{(n)}$. ist dieser Satz selbstverständlich: Denn erfüllt \mathfrak{R} A , B , $C^{(n)}$, so erfüllt jede Linearmannigfaltigkeit \mathfrak{M} in \mathfrak{R} A , B , $C^{(m)}$ mit einem $m \leq n$, so daß die Bemerkung zu Satz 3⁽ⁿ⁾ auf \mathfrak{M} anwendbar ist: es gibt ein normiertes Orthogonalsystem $\varphi_1, \dots, \varphi_m$, das in \mathfrak{M} vollständig ist, was wegen Satz 7., α) gerade die Behauptung ist. (Wie man sieht, ist dann die Abgeschlossenheitsprämisse auch unnötig, sie wird sogar bewiesen. Vgl. hierzu das vor Definition 5. Gesagte.)

Im Falle $C^{(\infty)}$. erinnern wir daran, daß \mathfrak{R} nach E . separabel ist, wir wollen zeigen, daß auch \mathfrak{M} es ist — überhaupt jede Teilmenge von \mathfrak{R} ist separabel. Wir bilden nämlich die in \mathfrak{R} überall dichte Folge f_1, f_2, \dots (vgl. E . in II. 1.), und zu jedem f_n und jedem $m = 1, 2, \dots$ die aus allen f mit $\|f - f_n\| < \frac{1}{m}$ bestehende Kugel $\mathfrak{K}_{n,m}$. Für jedes $\mathfrak{K}_{n,m}$, das Punkte aus \mathfrak{M} enthält, wählen wir einen solchen Punkt aus: $g_{n,m}$. Für gewisse n, m mag also $g_{n,m}$ undefiniert sein, die definierten bilden aber eine Folge aus \mathfrak{M} ⁵⁰. Nun sei f irgendein Punkt von \mathfrak{M} , $\varepsilon > 0$. Dann existiert ein m mit $\frac{1}{m} < \frac{\varepsilon}{2}$, und ein f_n mit $\|f_n - f\| < \frac{1}{m}$. Da also $\mathfrak{K}_{n,m}$ einen Punkt von \mathfrak{M} enthält (nämlich f), ist $g_{n,m}$ definiert, und $\|f_n - g_{n,m}\| < \frac{1}{m}$, also $\|f - g_{n,m}\| < \frac{2}{m} < \varepsilon$. Somit ist f Häufungspunkt der definierten $g_{n,m}$, diese Folge leistet daher das Gewünschte.

Heiße nunmehr die in \mathfrak{M} überall dichte Folge aus \mathfrak{M} f_1, f_2, \dots . Die durch sie bestimmte abgeschlossene Linearmannigfaltigkeit $[f_1, f_2, \dots]$ umfaßt alle ihre Häufungspunkte, also ganz \mathfrak{M} ; da aber \mathfrak{M} eine abgeschlossene Linearmannigfaltigkeit ist und f_1, f_2, \dots dazugehören, ist $[f_1, f_2, \dots]$ auch Teil von \mathfrak{M} — also ist es $= \mathfrak{M}$. Wir wählen nun das normierte Orthogonalsystem $\varphi_1, \varphi_2, \dots$ nach Satz 8. Dann ist $\{\varphi_1, \varphi_2, \dots\} = \{f_1, f_2, \dots\}$, fügen wir beiderseits die Häufungspunkte hinzu, so wird daraus $[\varphi_1, \varphi_2, \dots] = [f_1, f_2, \dots] = \mathfrak{M}$. Das aber war unsere Behauptung.

Wir brauchen in Satz 9. nur $\mathfrak{M} = \mathfrak{R}$ zu setzen, und wir haben nach Satz 7., α) ein vollständiges normiertes Orthogonalsystem $\varphi_1, \varphi_2, \dots$ vor uns. Also: Es gibt vollständige normierte Orthogonalsysteme: Damit sind wir aber in der Lage zu zeigen, daß \mathfrak{R} ein \mathfrak{R}_n oder \mathfrak{R}_∞ ist (je nachdem ob $C^{(n)}$. oder $C^{(\infty)}$. gilt), d. h. in allen seinen Eigenschaften festgelegt.

Es ist bloß zu zeigen, daß \mathfrak{R} ein-eindeutig auf die Menge aller $\{x_1, \dots, x_n\}$ bzw. aller $\{x_1, x_2, \dots\}$ ($\sum_1^\infty |x_\nu|^2$ endlich) abgebildet werden kann, derart daß

$$1. \text{ Aus } f \leftrightarrow \{x_1, x_2, \dots\} \quad af \leftrightarrow \{ax_1, ax_2, \dots\} \text{ folgt.}$$

$$2. \text{ Aus } \left\{ \begin{array}{l} f \leftrightarrow \{x_1, x_2, \dots\} \\ g \leftrightarrow \{y_1, y_2, \dots\} \end{array} \right\} \quad f + g \leftrightarrow \{x_1 + y_1, x_2 + y_2, \dots\} \text{ folgt.}$$

$$3. \text{ Aus } \left\{ \begin{array}{l} f \longleftrightarrow \{x_1, x_2, \dots\} \\ g \longleftrightarrow \{y_1, y_2, \dots\} \end{array} \right\} \quad (f, g) = \sum_1^{n \text{ bzw. } \infty} x_\nu \bar{y}_\nu \quad \text{folgt.}$$

(Im Falle ∞ ist in **3.** noch die absolute Konvergenz zu zeigen.) Diese Zuordnung $f \longleftrightarrow \{x_1, x_2, \dots\}$ geben wir jetzt an.

Sei $\varphi_1, \varphi_2, \dots$ ein vollständiges normiertes Orthogonalsystem, im Falle $C^{(n)}$. bricht es mit φ_n ab, im Falle $C^{(\infty)}$. ist es unendlich (Satz $3^{(n)}$, $3^{(\infty)}$). Wir setzen

$$f = \sum_1^{n \text{ bzw. } \infty} x_\nu \varphi_\nu.$$

Nach Satz 5. konvergiert diese Reihe auch im ∞ -Falle (da $\sum_1^\infty |x_\nu|^2$ endlich ist), d. h. \mathfrak{R}_n bzw. \mathfrak{R}_∞ wird gerade erschöpft. Nach Satz 7., β) und weil $\sum_1^{n \text{ bzw. } \infty} |(f, \varphi_\nu)|^2$ endlich ist (Satz 4.) wird aber auch \mathfrak{R} erschöpft [es ist $x_\nu = (f, \varphi_\nu)$ zu setzen]. Daß jedem $\{x_1, x_2, \dots\}$ nur ein f entspricht, ist klar, die Umkehrung folgt aus dem Zusatz zu Satz 5.

1., 2. sind offenbar erfüllt, 3. folgt aus Satz 7., γ).

3. Exkurs über die Bedingungen A.—E⁵¹.

Wir haben noch die Behauptung 2. am Schlusse von I. 4. zu verifizieren: daß F_Z, F_Ω die Bedingungen A.—E. wirklich erfüllen. Dabei genügt es, F_Ω zu betrachten, denn wir zeigten schon in II. 2., daß ein \mathfrak{R} mit A.—E. in allen Eigenschaften mit \mathfrak{R}_∞ , d. h. F_Z , übereinstimmen muß, so daß darum A.—E. auch für F_Z gelten müssen. Außerdem werden wir die in II. 2. erwähnte Unabhängigkeit der Bedingungen D., E. von A.—C^(∞). zeigen, sowie die Tatsache, daß sie aus A.—C^(n). folgen, d. h. daß sie in \mathfrak{R}_n gelten. Diese drei rein mathematischen Fragen bilden den Gegenstand dieses Kapitels.

Wir beginnen mit dem Verifizieren von A.—E. in F_Ω . Dabei werden wir uns auf den Lebesgueschen Integralbegriff zu stützen haben, bezüglich dessen Begründung wir auf die einschlägigen Spezialwerke verweisen müssen⁵². (Das Lebesguesche Integral spielt aber nur bei dieser Gelegenheit eine Rolle, und seine Kenntnis ist für die späteren Kapitel nicht erforderlich.)

In I. 4. hatten wir Ω als den k -dimensionalen Raum der q_1, \dots, q_k eingeführt, und F_Ω als Gesamtheit aller Funktionen $f(q_1 \dots q_k)$ mit endlichem $\int_\Omega |\varphi(q_1 \dots q_k)|^2 dq_1 \dots dq_k$; wir lassen dabei alle q_1, \dots, q_k von $-\infty$ bis $+\infty$ variieren. Alle unsere Herleitungen würden allerdings gültig bleiben, und auch ihre Beweise meistens wörtlich übertragbar sein, wenn wir die Variabilitätsbereiche der q_1, \dots, q_k einschränkten (so daß Ω z. B. ein Halbraum, oder das Innere eines Würfels, oder das Innere einer Kugel, oder das Äußere dieser Figuren, usw. würde) — ja sogar wenn wir Ω als gekrümmte Fläche wählten

(z. B. als Kugeloberfläche usw.). Um uns aber nicht in unwesentliche Komplikationen zu verlieren (deren Diskussion der Leser, an Hand unseres typischen Beweises, mühelos selbst durchführen kann), beschränken wir uns auf den genannten einfachsten Fall. Wir gehen nun **A.—E.** hintereinander durch:

Ad A. Es ist zu zeigen: mit f, g gehören auch $af, f \pm g$ zu F_Ω , d. h. mit

$$\int_\Omega |f|^2, \int_\Omega |g|^2$$

$$\left(\int_\Omega \cdots \int |f(q_1 \cdots q_k)|^2 dq_1 \cdots dq_k, \quad \int_\Omega \cdots \int |g(q_1 \cdots q_k)|^2 dq_1 \cdots dq_k \right)$$

kürzen wir, da kein Mißverständnis möglich ist, so ab) sind auch $\int_\Omega |af|^2 = |a|^2 \int_\Omega |f|^2$, $\int |f \pm g|^2$ endlich. Ersteres ist trivial, letzteres steht wegen $|f \pm g|^2 = |f|^2 + |g|^2 \pm 2 \operatorname{Re}(f \cdot \bar{g})$ ⁵³ fest, sobald die Endlichkeit von $\int_\Omega |f \bar{g}| = \int_\Omega |f| |g|$ gesichert ist. Wegen $|f| |g| \leq \frac{1}{2} (|f|^2 + |g|^2)$ folgt aber diese aus den Annahmen.

Ad B. (f, g) wollen wir als $\int_\Omega f \bar{g}$ definieren, dieses Integral ist, wie wir soeben sahen, absolut konvergent. Alle in **B.** postulierten Eigenschaften sind evident, bis auf die letzte: daß $(f, f) = 0 \Rightarrow f \equiv 0$ nach sich zieht. $(f, f) = 0$ besagt $\int_\Omega |f|^2 = 0$, so daß die Menge der Stellen, wo $|f|^2 > 0$, d. h. $f(q_1 \cdots q_k) \neq 0$ ist, das Lebesguesche Maß 0 haben muß. Sehen wir nun zwei Funktionen f, g , für welche $f \neq g$ [d. h. $f(q_1 \cdots q_k) \neq g(q_1 \cdots q_k)$] nur in einer $q_1 \cdots q_k$ -Menge vom Lebesgueschen Maße 0 stattfindet, als nicht wesentlich verschieden an⁵⁴, so können wir $f \equiv 0$ feststellen.

Ad C. Seien O_1, \dots, O_n n Gebiete in Ω , von denen keine zwei einen gemeinsamen Punkt haben, und die Lebesgueschen Maße aller seien > 0 , aber endlich. $f_l(q_1 \cdots q_k)$ sei in $O_l = 1$, sonst $= 0$, da $\int_\Omega |f_l|^2 =$ Maß von O_l ist, gehört es zu F_Ω ($l = 1, \dots, k$). Die f_1, \dots, f_n sind nun linear unabhängig: denn aus $a_1 f_1 + \cdots + a_n f_n \equiv 0$ folgt, daß die links stehende Funktion nicht nur in einer Menge vom Lebesgueschen Maße 0 verschwindet, also in jedem O_l Nullstellen hat, da sie aber in O_l konstant $= a_l$ ist, muß $a_l = 0$, $l = 1, \dots, n$, sein. Diese Konstruktion geht für alle n , also gilt $C^{(\infty)}$.

Ad D. Die Folge f_1, f_2, \dots genüge der Cauchyschen Konvergenzbedingung, d. h. es existiere zu jedem $\varepsilon > 0$ ein $N = N(\varepsilon)$, so daß $\int_\Omega |f_m - f_n|^2 < \varepsilon$ ist, wenn $m, n \geq N$ ist. Wir wählen $n_1 = N\left(\frac{1}{8}\right)$; $n_2 \geq n_1, N\left(\frac{1}{8^2}\right)$; $n_3 \geq n_1, n_2, N\left(\frac{1}{8^3}\right)$; Somit ist $n_1 \leq n_2 \leq \dots, n_\nu, n_{\nu+1} \geq N\left(\frac{1}{8^\nu}\right)$, also $\int_\Omega |f_{n_{\nu+1}} - f_{n_\nu}|^2 < \frac{1}{8^\nu}$. Betrachten wir nun

die Menge $P^{(\nu)}$ aller Punkte, in denen $|f_{n_{\nu+1}} - f_{n_{\nu}}| > \frac{1}{2^{\nu}}$ ist. Ist ihr Lebesguesches Maß $\mu^{(\nu)}$, so gilt

$$\int_{\Omega} |f_{n_{\nu+1}} - f_{n_{\nu}}|^2 \geq \mu^{(\nu)} \left(\frac{1}{2^{\nu}}\right)^2 = \frac{\mu^{(\nu)}}{4^{\nu}}, \quad \frac{\mu^{(\nu)}}{4^{\nu}} < \frac{1}{8^{\nu}}, \quad \mu^{(\nu)} < \frac{1}{2^{\nu}}.$$

Betrachten wir nun die Menge $Q^{(\nu)}$, die durch Zusammenfassung von $P^{(\nu)}$, $P^{(\nu+1)}$, $P^{(\nu+2)}$, ... entsteht. Ihr Lebesguesches Maß ist

$$\leq \mu^{(\nu)} + \mu^{(\nu+1)} + \mu^{(\nu+2)} + \dots < \frac{1}{2^{\nu}} + \frac{1}{2^{\nu+1}} + \frac{1}{2^{\nu+2}} + \dots = \frac{1}{2^{\nu-1}}.$$

Außerhalb von $Q^{(\nu)}$ gilt

$$|f_{n_{\nu+1}} - f_{n_{\nu}}| < \frac{1}{2^{\nu}}; \quad |f_{n_{\nu+2}} - f_{n_{\nu+1}}| < \frac{1}{2^{\nu+1}}; \quad |f_{n_{\nu+3}} - f_{n_{\nu+2}}| < \frac{1}{2^{\nu+2}}, \dots,$$

also allgemein für $\nu \leq \nu' \leq \nu''$

$$\begin{aligned} |f_{n_{\nu''}} - f_{n_{\nu'}}| &< |f_{n_{\nu''+1}} - f_{n_{\nu''}}| + |f_{n_{\nu''+2}} - f_{n_{\nu''+1}}| + \dots + |f_{n_{\nu''}} - f_{n_{\nu''-1}}| \\ &< \frac{1}{2^{\nu'}} + \frac{1}{2^{\nu'+1}} + \dots + \frac{1}{2^{\nu''-1}} < \frac{1}{2^{\nu'-1}}. \end{aligned}$$

Für $\nu' \rightarrow \infty$ strebt dies, unabhängig von ν'' , gegen 0, d. h. die Folge f_{n_1}, f_{n_2}, \dots erfüllt die Cauchysche Konvergenzbedingung, falls $q_1 \dots q_k$ nicht in $Q^{(\nu)}$ liegt. Da es sich (bei festem $q_1 \dots q_k$) um Zahlen handelt, konvergiert diese Folge auch. Also können wir umgekehrt sagen: Konvergiert die Folge f_{n_1}, f_{n_2}, \dots für ein gewisses $q_1 \dots q_k$ nicht, so liegt dieses in $Q^{(\nu)}$. Die Menge aller $q_1 \dots q_k$, wo Konvergenz nicht stattfindet, sei Q , dann ist Q Teil von $Q^{(\nu)}$, sein Maß ist also kleiner als dasjenige von $Q^{(\nu)}$, d. h. $< \frac{1}{2^{\nu-1}}$. Dies soll für alle ν gelten, obwohl Q unabhängig von ν definiert ist: also hat Q das Lebesguesche Maß 0. Somit macht es nichts aus, z. B. alle f_n in Q gleich 0 zu setzen (vgl. Anm. 54); dann konvergiert aber f_{n_1}, f_{n_2}, \dots auch in Q , also überall.

Wir haben also eine Teilfolge von f_1, f_2, \dots angegeben, f_{n_1}, f_{n_2}, \dots , die in allen Punkten $q_1 \dots q_k$ konvergiert (für f_1, f_2, \dots braucht dies nicht der Fall zu sein). Der Limes von f_{n_1}, f_{n_2}, \dots heiße $f = f(q_1 \dots q_k)$. Wir haben nun noch zu zeigen: 1. f gehört zu F_{Ω} , d. h. $\int_{\Omega} |f|^2$ ist endlich; 2. f ist nicht nur im Sinne der Konvergenz für jedes q_1, \dots, q_k , sondern auch im Sinne der „Betragkonvergenz“ des Hilbertschen Raumes Limes der f_{n_1}, f_{n_2}, \dots , d. h.: $\|f - f_{n_{\nu}}\| \rightarrow 0$, oder: $\int_{\Omega} |f - f_{n_{\nu}}|^2 \rightarrow 0$; 3. in diesem Sinne ist es sogar Limes der ganzen Folge f_1, f_2, \dots , d. h.: $\|f - f_n\| \rightarrow 0$, oder: $\int_{\Omega} |f - f_n|^2 \rightarrow 0$.

Sei $\varepsilon > 0$, ν_0 sei mit $n_{\nu_0} \geq N(\varepsilon)$ gewählt (z. B. $\frac{1}{8^{\nu_0}} \leq \varepsilon$), und $\nu \geq \nu_0$, $n \geq N(\varepsilon)$. Dann ist $\int_{\Omega} |f_{n_{\nu}} - f_n|^2 < \varepsilon$. Lassen wir $\nu \rightarrow \infty$, so

strebt der Integrand gegen $|f - f_n|^2$, also ist (nach einem Konvergenz-
satz Lebesguescher Integrale, vgl. a. a. O. Anm. ⁵³) $\int_{\Omega} |f - f_n|^2 \leq \varepsilon$.

Somit ist erstens $\int_{\Omega} |f - f_1|^2$ endlich, d. h. $f - f_1$ in F_{Ω} ; da auch f_1 zu F_{Ω} gehört, tut es f auch: 1. ist bewiesen. Zweitens folgt aus der obigen Ungleichheit $\int_{\Omega} |f - f_n|^2 \rightarrow 0$ für $n \rightarrow \infty$, d. h. 2. und 3.

Ad E. Es gilt eine in F_{Ω} überall dichte Funktionenfolge f_1, f_2, \dots anzugeben.

Sei $\Omega_1, \Omega_2, \dots$ eine Folge von Bereichen* in Ω , deren jeder ein endliches Maß hat, und die zusammen ganz Ω ausfüllen. (Z. B. sei Ω_N die Kugel vom Radius N um den Nullpunkt.) Sei $f = f(q_1 \dots q_k)$ irgendein Element von F_{Ω} , wir definieren für jedes $N = 1, 2, \dots$ ein $f_N = f_N(q_1 \dots q_k)$:

$$f_N(q_1 \dots q_k) = \begin{cases} f(q_1 \dots q_k) & \left\{ \begin{array}{l} \text{wenn } q_1 \dots q_k \text{ in } \Omega_N \text{ liegt} \\ \text{und } |f(q_1 \dots q_k)| \leq N \text{ ist,} \end{array} \right. \\ 0 & \left\{ \text{sonst.} \right. \end{cases}$$

Für $N \rightarrow \infty$ ist $f_N(q_1 \dots q_k) \rightarrow f(q_1 \dots q_k)$ (von einem gewissen N ab findet sogar Gleichheit statt), also $|f - f_N|^2 \rightarrow 0$. Ferner ist $f - f_N = 0$ oder f , also $|f - f_N|^2 \leq |f|^2$. Die Integrale $\int_{\Omega} |f - f_N|^2$ haben also die feste Majorante $\int_{\Omega} |f|^2$ (endlich!), da die Integranden gegen 0 streben, tun es die Integrale auch (vgl. den vorhin zitierten Konvergenz-
satz): $\int_{\Omega} |f - f_N|^2 \rightarrow 0$, $\|f - f_N\| \rightarrow 0$.

Die Klasse aller Funktionen $g = g(q_1 \dots q_k)$, für welche die Menge aller Punkte mit $g \neq 0$ endliches Maß hat, und welche im ganzen Raume eine Ungleichheit $|g| \leq C$ mit beliebigem, aber festem C erfüllen, heiße G . Die obigen f_N gehören alle zu G , also ist G überall dicht (in F_{Ω}).

Gehöre g zu G , sei $\varepsilon > 0$. Das Maß der $g \neq 0$ -Menge sei M , die obere Schranke für $|g|$ sei C . Wir wählen eine Kette rationaler Zahlen $-C < \varrho_1 < \varrho_2 < \dots < \varrho_t < C$, derart, daß $\varrho_1 < -C + \varepsilon$, $\varrho_2 < \varrho_1 + \varepsilon, \dots, \varrho_t < \varrho_{t-1} + \varepsilon$, $C < \varrho_t + \varepsilon$ gilt, was leicht erreichbar ist. Wir ändern nun jeden $\text{Re } g(q_1 \dots q_k)$ -Wert ins nächstliegende ϱ_s ($s = 1, 2, \dots, t$) ab, nur 0 bleibe 0. So entsteht eine neue Funktion $h_1(q_1 \dots q_k)$, die sich von $\text{Re } g$ überall um $< \varepsilon$ unterscheidet. Ebenso bilden wir zu $\text{Im } g$ ein $h_2(q_1 \dots q_k)$. Dann ist für $h = h_1 + ih_2$

$$\int_{\Omega} |g - h|^2 = \int_{\Omega} |\text{Re } g - h_1|^2 + \int_{\Omega} |\text{Im } g - h_2|^2 \leq M \varepsilon^2 + M \varepsilon^2 = 2M \varepsilon^2, \\ \|g - h\| \leq \sqrt{2M} \varepsilon.$$

Ist $\delta > 0$ gegeben, so setzen wir $\varepsilon < \frac{\delta}{\sqrt{2M}}$, und es ist $\|g - h\| < \delta$.

Die Klasse aller Funktionen $h = h(q_1 \cdots q_k)$, die nur endlich viele verschiedene Werte annehmen, und zwar nur solche von der Form $\varrho + i\sigma$, ϱ, σ rational, und jeden, außer 0, nur auf Mengen von endlichem Maße, heiße H . Die obigen h gehören zu H , also ist H überall dicht in G , also auch in F_Ω .

Sei Π eine Menge von endlichem Lebesgueschen Maß, wir definieren eine Funktion $f_\Pi = f_\Pi(q_1 \cdots q_k)$:

$$f_\Pi(q_1 \cdots q_k) = \begin{cases} 1 & \text{in } \Pi, \\ 0 & \text{sonst.} \end{cases}$$

Die Klasse H besteht offenbar aus allen

$$\sum_1^t (\varrho_s + i\sigma_s) f_{\Pi_s} \quad (t = 1, 2, \dots, \varrho_s, \sigma_s \text{ rational}).$$

Wir suchen nunmehr eine Π -Mengenfolge $\Pi^{(1)}, \Pi^{(2)}, \dots$ mit folgender Eigenschaft: zu jeder Π -Menge und jedem $\varepsilon > 0$ existiert ein $\Pi^{(n)}$, so daß das Maß der Menge aller Punkte, die zu Π , aber nicht zu $\Pi^{(n)}$ oder zu $\Pi^{(n)}$, aber nicht zu Π gehören (man nennt diese Menge die Unterschiedsmenge von $\Pi, \Pi^{(n)}$), $< \varepsilon$ ist. Haben wir nämlich eine solche Folge, so liegen die

$$\sum_1^t (\varrho_s + i\sigma_s) f_{\Pi^{(n_s)}}$$

($t = 1, 2, \dots, \varrho_s, \sigma_s$ rational, $n_s = 1, 2, \dots$) in H überall dicht: Denn wählen wir zu jedem Π_s von vorhin $\Pi^{(n_s)}$ nach dem oben Gesagten, so wird

$$\begin{aligned} & \int_\Omega \left| \sum_1^t (\varrho_s + i\sigma_s) f_{\Pi_s} - \sum_1^t (\varrho_s + i\sigma_s) f_{\Pi^{(n_s)}} \right|^2 \\ & \leq \sum_1^t \int_\Omega |(\varrho_s + i\sigma_s) f_{\Pi_s} - (\varrho_s + i\sigma_s) f_{\Pi^{(n_s)}}|^2 \\ & = \sum_1^t (\varrho_s^2 + \sigma_s^2) \int_\Omega |f_{\Pi_s} - f_{\Pi^{(n_s)}}|^2 \\ & = \sum_1^t (\varrho_s^2 + \sigma_s^2) \cdot \text{Maß der Unterschiedsmenge}(\Pi_s, \Pi^{(n_s)}) < \sum_1^t (\varrho_s^2 + \sigma_s^2) \cdot \varepsilon. \end{aligned}$$

Ist ein $\delta > 0$ gegeben, so leistet $\varepsilon = \frac{\delta^2}{\sum_1^t (\varrho_s^2 + \sigma_s^2)}$ schon

$$\left\| \sum_1^t (\varrho_s + i\sigma_s) f_{\Pi_s} - \sum_1^t (\varrho_s + i\sigma_s) f_{\Pi^{(n_s)}} \right\| < \delta.$$

Die $\sum_1^t (\varrho_s + i\sigma_s) f_{\Pi^{(n_s)}}$ bilden aber eine Folge, wenn man sie richtig anordnet. Heiße nämlich der Generalnenner aller $\varrho_1, \sigma_1, \dots, \varrho_t, \sigma_t$ etwa τ , die Zähler aber $\varrho'_1, \sigma'_1, \dots, \varrho'_t, \sigma'_t$, dann handelt es sich um die

$$\frac{1}{\tau} \sum_1^t (\varrho'_s + i\sigma'_s) f_{\Pi^{(n_s)}},$$

wobei gilt: $t, \tau = 1, 2, \dots$; $\varrho'_s, \sigma'_s = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$, $n_s = 1, 2, \dots$ für $s = 1, \dots, t$. Diese Funktionen als Folge anzuordnen, ist dieselbe Aufgabe, wie dasselbe für ihre Nummern $t, \tau, \varrho'_1, \sigma'_1, \dots, \varrho'_t, \sigma'_t, n_1, \dots, n_t$ zu tun. Ordnen wir aber die genannten Nummernkomplexe nach wachsendem

$$t + \tau + |\varrho'_1| + |\sigma'_1| + \dots + |\varrho'_t| + |\sigma'_t| + n_1 + \dots + n_t$$

an, so gehören zu jedem gegebenen Werte dieser Summe nur endlich viele der genannten Nummernkomplexe. Bringen wir auch noch jede dieser endlichen Gesamtheiten in irgendeine Reihenfolge, so haben wir in der Tat eine einfache Folge vor uns.

Um die genannte Mengenfolge $\Pi^{(1)}, \Pi^{(2)}, \dots$ angeben zu können, verwenden wir die Tatsache, daß zu jeder Menge Π mit endlichem Lebesgueschem Maße M , und zu jedem $\delta > 0$ eine offene Punktmenge Π' existiert, die Π umfaßt, aber dessen Maß um $< \delta$ übertrifft (vgl. a. a. O. Anm. ⁵², sowie Anm. ⁴⁵, wo auch der Begriff „offene Punktmenge“ definiert wird). Zu einem offenen Π' und einem $\varepsilon > 0$ existiert aber offenbar eine aus endlich vielen Würfeln zusammengesetzte Menge Π'' , die in Π' enthalten ist, und deren Maß dasjenige von Π'' um $< \delta$ unterschreitet. Dabei können die Würfelkantenlängen und Mittelpunktskoordinaten alle rational gewählt werden. Man erkennt nunmehr leicht, daß die oben definierte „Unterschiedsmenge“ von Π, Π'' ein Maß $< \delta + \delta = 2\delta$ hat, also für $\delta = \frac{\varepsilon}{2}$ eines $< \varepsilon$. Wir sind also am Ziele, wenn wir die Würfel Mengen der eben beschriebenen Art in eine Folge zu ordnen vermögen.

Diese Würfel Mengen sind nun charakterisiert durch die Anzahl $n = 1, 2, \dots$ ihrer Würfel sowie deren Kantenlängen $\kappa^{(\nu)}$ und Mittelpunktskoordinaten $\xi_1^{(\nu)}, \dots, \xi_k^{(\nu)}$ ($\nu = 1, \dots, n$). Die $\kappa^{(\nu)}, \xi_1^{(\nu)}, \dots, \xi_k^{(\nu)}$ sind rational, ihr Generalnenner sei $\eta = 1, 2, \dots$, ihre Zähler

$$\kappa^{(\nu)} = 1, 2, \dots, \xi_1^{(\nu)}, \dots, \xi_k^{(\nu)} = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$$

Somit sind unsere Würfel Mengen durch die Zahlenkomplexe

$$n, \eta, \kappa^{(1)}, \xi_1^{(1)}, \dots, \xi_k^{(1)}, \dots, \kappa^{(n)}, \xi_1^{(n)}, \dots, \xi_k^{(n)}$$

charakterisiert. Ordnen wir sie nach wachsenden Summen

$$n + \eta + \kappa^{(1)} + |\xi_1^{(1)}| + \dots + |\xi_k^{(1)}| + \dots + \kappa^{(n)} + |\xi_1^{(n)}| + \dots + |\xi_k^{(n)}|,$$

so gewinnen wir eine einfache Folge, genau wie beim früheren analogen Beispiel der Funktionen-Linearaggregate. —

Ehe wir weitergehen, beantworten wir die folgende Frage: Gegeben sei ein **A.—E.** (mit $C^{(\infty)}$) erfüllendes \mathfrak{R} , in welchen Teilmengen \mathfrak{M} von \mathfrak{R} sind [bei unveränderter Definition von $af, f \pm g$ sowie (f, g)] **A.—E.** wieder erfüllt?

Damit $A.$ gelte, muß \mathfrak{M} eine Linearmannigfaltigkeit sein. $B.$ gilt von selbst. $C.$ verschieben wir einen Augenblick: ein $C^{(n)}$ oder $C^{(\infty)}$ gilt jedenfalls. $D.$ besagt: erfüllt eine Folge in \mathfrak{M} die Cauchysche Konvergenzbedingung, so hat sie einen Limes in \mathfrak{M} . Da aber eine solche Folge jedenfalls einen Limes in \mathfrak{R} hat, handelt es sich bloß darum, daß dieser auch zu \mathfrak{M} gehöre, d. h.: \mathfrak{M} muß abgeschlossen sein. $E.$ gilt, wie wir beim Beweise von *Satz 9* sahen, immer. Also haben wir zusammenfassend: \mathfrak{M} muß eine abgeschlossene Linearmannigfaltigkeit sein. Das normierte Orthogonalsystem, das \mathfrak{M} aufspannt (*Satz 9*), heiße $\varphi_1, \varphi_2, \dots$. Ist es unendlich, so gilt offenbar $C^{(\infty)}$, und \mathfrak{M} ist \mathfrak{R}_∞ , also \mathfrak{R} selbst, isomorph; bricht es bei φ_n ab ($\varphi_1, \dots, \varphi_n$), so gilt (z. B. wegen *Satz 3⁽ⁿ⁾*) $C^{(n)}$, d. h. \mathfrak{M} ist \mathfrak{R}_n isomorph.

Da aber $D., E.$ in \mathfrak{M} jedenfalls gelten, gelten sie in jedem \mathfrak{R}_n : sie folgen also auch aus $A.—C^{(n)}$.

Wie man sieht, haben wir die direkte Verifizierung von $A.—E.$ (mit $C^{(n)}$ bzw. $C^{(\infty)}$) an \mathfrak{R}_n bzw. \mathfrak{R}_∞ durch logische Kunstgriffe vermieden. Indessen bereitet auch diese keine wesentlichen Schwierigkeiten, sie bleibe dem Leser überlassen.

Es bleibt noch übrig, die Unabhängigkeit von $D.$ und $E.$ von $A.—C^{(\infty)}$ zu zeigen. Wie wir soeben sahen, erfüllt jede Linearmannigfaltigkeit des \mathfrak{R}_∞ $A., B., E.$ sowie $C^{(n)}$ oder $C^{(\infty)}$, ist sie aber nicht abgeschlossen, so erfüllt sie $D.$ nicht. Dann muß aber $C^{(\infty)}$ in ihr gelten: denn aus $C^{(n)}$ folgt $D.$ Eine solche anzugeben ist aber leicht: Sei $\varphi_1, \varphi_2, \dots$ ein normiertes Orthogonalsystem, dann bilden die $\sum_1^N x_\nu \varphi_\nu$ ($N = 1, 2, \dots, x_1, \dots, x_N$ beliebig) eine Linearmannigfaltigkeit, aber keine abgeschlossene, denn $\sum_1^\infty \frac{1}{\nu} \varphi_\nu$ ($\sum_1^\infty (\frac{1}{\nu})^2$ ist endlich!) ist wohl Häufungspunkt, aber nicht Element von ihr

$$\left(\sum_1^N \frac{1}{\nu} \varphi_\nu \rightarrow \sum_1^\infty \frac{1}{\nu} \varphi_\nu \text{ für } N \rightarrow \infty \right).$$

Somit ist $D.$ von $A.—C^{(\infty)}, E.$ unabhängig.

Betrachten wir ferner alle komplexen Funktionen $x(\alpha)$, deren Parameter α kontinuierlich ist: $-\infty < \alpha < +\infty$. Dabei sei es möglich, die $x(\alpha) \neq 0$ in eine Folge zu schreiben, und die über diese erstreckte $\sum_\alpha |x(\alpha)|^2$ sei endlich⁵⁵. Alle diese Funktionen $x(\alpha)$ bilden einen Raum $\mathfrak{R}_{kont.}$. Da für irgend zwei Punkte $x(\alpha), y(\alpha)$ desselben nur für zwei α -Folgen $x(\alpha)$ bzw. $y(\alpha) \neq 0$ ist, und wir diese beiden Folgen zu einer einzigen vereinigen können, ist außerhalb einer gewissen α -Folge $\alpha_1, \alpha_2, \dots$ stets $x(\alpha) = y(\alpha) = 0$. Es sind also nur die Werte $x_n = x(\alpha_n), y_n = y(\alpha_n)$ für alle $n = 1, 2, \dots$ zu diskutieren, somit verhält sich alles, solange nur zwei $\mathfrak{R}_{kont.}$ -Punkte in Erscheinung treten, wie in \mathfrak{R}_∞ . Daher gelten $A., B.$ in $\mathfrak{R}_{kont.}$ genau wie in \mathfrak{R}_∞ ⁵⁶.

Bei $k (= 1, 2, \dots)$ $\mathfrak{R}_{kont.}$ -Punkten ist es ebenso, also gilt auch $C^{(\infty)}$. Auch bei einer Folge von $\mathfrak{R}_{kont.}$ -Punkten stimmt das noch — sie seien $x_1(\alpha), x_2(\alpha), \dots$, die α mit $x_n(\alpha) \neq 0$ bilden für jedes $n = 1, 2, \dots$ je eine Folge $\alpha_1^{(n)}, \alpha_2^{(n)}, \dots$, alle diese Folgen zusammen eine Doppelfolge $\alpha_m^{(n)}$ ($n, m = 1, 2, \dots$), die auch als einfache Folge $\alpha_1^{(1)}, \alpha_2^{(1)}, \alpha_1^{(2)}, \alpha_3^{(1)}, \alpha_2^{(2)}, \alpha_1^{(3)}, \dots$ geschrieben werden kann — also gilt auch $D.$ in $\mathfrak{R}_{kont.}$ ebenso wie in \mathfrak{R}_∞ . Anders ist es bei $E.$: dort spielen alle Punkte von \mathfrak{R} eine Rolle (alle sollen ja Häufungspunkte einer geeigneten Folge sein), dort können wir also nicht von \mathfrak{R}_∞ auf $\mathfrak{R}_{kont.}$ schließen. Und es ist wirklich nicht erfüllt, denn eine Folgerung aus ihm gilt nicht: es gibt ein normiertes Orthogonalsystem, das nicht als Folge geschrieben werden kann (entgegen Satz 3^(\infty)).

Sei $x_\beta(\alpha) \begin{cases} = 1 & \text{für } \alpha = \beta \\ = 0 & \text{für } \alpha \neq \beta \end{cases}$, für jedes β ist $x_\beta(\alpha)$ ein Element von $\mathfrak{R}_{kont.}$, und die $x_\beta(\alpha)$ bilden ein normiertes Orthogonalsystem. Als Folge ließen sie sich aber nur schreiben, wenn das für alle $\beta > -\infty$, $< +\infty$ möglich wäre, was bekanntlich nicht der Fall ist⁵⁷. Also ist auch $E.$ von $A. - C^{(\infty)}$, $D.$ unabhängig.

(Man beachte übrigens den fundamentalen Unterschied zwischen dem Funktionenraum der $f(x)$ mit endlichem $\int_{-\infty}^{\infty} |f(x)|^2 dx$ und demjenigen der $x(\alpha)$ mit endlichem $\sum \alpha |x(\alpha)|^2$. Wir könnten ja den ersteren ebensogut als Raum aller $x(\alpha)$ mit endlichem $\int_{-\infty}^{\infty} |x(\alpha)|^2 d\alpha$ bezeichnen!

Der ganze Unterschied ist das Ersetzen von $\int_{-\infty}^{\infty} \dots d\alpha$ durch $\sum \alpha \dots$, trotzdem ist der erstgenannte Raum ein F_Ω , erfüllt also $A. - E.$ und ist \mathfrak{R}_∞ isomorph, während der letztgenannte, $\mathfrak{R}_{kont.}$, $E.$ verletzt und von \mathfrak{R}_∞ wesentlich verschieden ist. Dabei sind die beiden Räume identisch, nur die Betragsdefinitionen in ihnen lauten verschieden!)

4. Abgeschlossene Linearmannigfaltigkeiten.

Der § II. 2. ist für uns nicht nur wegen des Isomorphiebeweises von Wichtigkeit, sondern auch weil dort mehrere Sätze über normierte Orthogonalsysteme bewiesen wurden. Wir wollen nämlich jetzt in der geometrischen Analyse des Hilbertschen Raumes weitergehen, und die abgeschlossenen Linearmannigfaltigkeiten näher untersuchen, die im \mathfrak{R}_∞ eine analoge Rolle spielen wie im \mathfrak{R}_n die Geraden, Ebenen usw. (d. h. die \mathfrak{R}_m , $m \leq n$).

Wir erinnern vorerst an die Bezeichnungsweise der *Definitionen 2., 5.*: wenn \mathfrak{A} irgendeine Menge in \mathfrak{R} ist, so sind $\{\mathfrak{A}\}$ bzw. $[\mathfrak{A}]$ die von \mathfrak{A} aufgespannte Linearmannigfaltigkeit bzw. abgeschlossene Linearmannigfaltigkeit, d. h. das kleinste Gebilde dieser Art, welches \mathfrak{A} umfaßt.

Wir erweitern nun diese Bezeichnung dahin, daß wir, wenn $\mathfrak{A}, \mathfrak{B}, \dots$ irgendwelche Teilmengen und f, g, \dots Elemente von \mathfrak{R} sind, unter $\{\mathfrak{A}, \mathfrak{B}, \dots, f, g, \dots\}$ bzw. $[\mathfrak{A}, \mathfrak{B}, \dots, f, g, \dots]$ die von derjenigen Menge aufgespannte Linearmannigfaltigkeit bzw. abgeschlossene Linearmannigfaltigkeit verstehen, welche durch Zusammenfassung der $\mathfrak{A}, \mathfrak{B}, \dots$ und der f, g, \dots entsteht.

Wenn insbesondere $\mathfrak{M}, \mathfrak{N}, \dots$ (endlich oder unendlich viele) abgeschlossene Linearmannigfaltigkeiten sind, so bezeichnen wir die abgeschlossene Linearmannigfaltigkeit $[\mathfrak{M}, \mathfrak{N}, \dots]$ mit $\mathfrak{M} + \mathfrak{N} + \dots$. $\{\mathfrak{M}, \mathfrak{N}, \dots\}$ besteht offenbar aus allen Summen $f + g + \dots$ (f durchlaufe \mathfrak{M} , g durchlaufe \mathfrak{N}, \dots), $[\mathfrak{M}, \mathfrak{N}, \dots] = \mathfrak{M} + \mathfrak{N} + \dots$ entsteht hieraus durch Hinzufügung der Häufungspunkte. Wenn nur endlich viele Mengen $\mathfrak{M}, \mathfrak{N}, \dots$ vorliegen, und jedes Element der einen zu jedem Element der übrigen unter ihnen orthogonal ist, so sind, wie wir bald sehen werden, diese zwei Bildungen einander gleich, was im allgemeinen nicht der Fall zu sein braucht.

Wenn \mathfrak{M} Teilmenge von \mathfrak{R} ist, so betrachten wir noch die Gesamtheit der Elemente von \mathfrak{R} , die zu allen Elementen von \mathfrak{M} orthogonal sind. Auch dies ist offenbar eine abgeschlossene Linearmannigfaltigkeit, die $\mathfrak{R} - \mathfrak{M}$ heißen möge. Über die Gründe, die dafür sprechen, dies als Subtraktion zu bezeichnen, wird *Satz 14*. Klarheit schaffen. Besonders wichtig ist $\mathfrak{R} - \mathfrak{M}$, die Menge aller zu ganz \mathfrak{M} orthogonalen f : sie heißt die zu \mathfrak{M} komplementäre abgeschlossene Linearmannigfaltigkeit.

Schließlich erwähnen wir drei besonders einfache abgeschlossene Linearmannigfaltigkeiten: erstens \mathfrak{R} selbst; zweitens die aus der 0 allein bestehende Menge $\{0\} = [0]$; und drittens die Menge aller af (f ein gegebenes Element von \mathfrak{R} , a variabel), die offenbar abgeschlossene Linearmannigfaltigkeit ist, und daher gleichzeitig $= \{f\} = [f]$.

Wir führen nun den Begriff des „Projizierens“ ein, der demjenigen der Euklidischen Geometrie völlig analog ist:

Satz 10. Sei \mathfrak{M} eine abgeschlossene Linearmannigfaltigkeit. Dann kann jedes f auf eine und nur eine Weise in zwei Addenden $f = g + h$, g aus \mathfrak{M} , h aus $\mathfrak{R} - \mathfrak{M}$, zerlegt werden.

Bemerkung: Wir nennen g die Projektion von f in \mathfrak{M} , h (das auf ganz \mathfrak{M} orthogonal steht) das Perpendikel von f auf \mathfrak{M} . Für g führen wir das Zeichen $P_{\mathfrak{M}}f$ ein.

Beweis: Sei $\varphi_1, \varphi_2, \dots$ das nach *Satz 9*. existierende, die abgeschlossene Linearmannigfaltigkeit \mathfrak{M} aufspannende, normierte Orthogonalsystem. Wir setzen $g = \sum^n (f, \varphi_n) \cdot \varphi_n$, nach *Satz 6*. konvergiert diese Reihe (wenn sie überhaupt unendlich ist), ihre Summe g gehört offenbar zu \mathfrak{M} . Ferner ist nach *Satz 6*. $h = f - g$ zu allen $\varphi_1, \varphi_2, \dots$ orthogonal, da aber die zu h orthogonalen Vektoren eine abgeschlossene Linearmannigfaltigkeit bilden, ist mit $\varphi_1, \varphi_2, \dots$ auch ganz \mathfrak{M} zu h orthogonal, d. h. h gehört zu $\mathfrak{R} - \mathfrak{M}$.

Gäbe es noch eine solche Zerlegung $f = g' + h'$, g' aus \mathfrak{M} , h' aus $\mathfrak{R} - \mathfrak{M}$, so wäre $g + h = g' + h'$, $g - g' = h' - h = j$. j müßte somit gleichzeitig zu \mathfrak{M} und zu $\mathfrak{R} - \mathfrak{M}$ gehören, wäre daher zu sich selbst orthogonal: $(j, j) = 0$, $j = 0$, und somit $g = g'$, $h = h'$.

$P_{\mathfrak{M}} f$ ist also eine Operation, die jedem f von \mathfrak{R} seine Projektion in \mathfrak{M} , $P_{\mathfrak{M}} f$ zuordnet. Wir werden im nächsten Paragraphen definieren: ein Operator R ist eine in einer Teilmenge von \mathfrak{R} definierte Funktion mit Werten aus \mathfrak{R} , d. h. eine Zuordnung, die gewissen f von \mathfrak{R} gewisse Rf von \mathfrak{R} zuordnet (nicht notwendig allen, sie kann für andere f von \mathfrak{R} undefiniert, „sinnlos“, sein!). $P_{\mathfrak{M}}$ ist somit ein überall (in \mathfrak{R}) definierter Operator, er heie der Projektionsoperator von \mathfrak{M} .

Satz 11. Der Operator $P_{\mathfrak{M}}$ hat die folgenden Eigenschaften:

$$\begin{aligned} P_{\mathfrak{M}}(a_1 f_1 + \dots + a_n f_n) &= a_1 P_{\mathfrak{M}} f_1 + \dots + a_n P_{\mathfrak{M}} f_n, \\ (P_{\mathfrak{M}} f, g) &= (f, P_{\mathfrak{M}} g), \\ P_{\mathfrak{M}}(P_{\mathfrak{M}} f) &= P_{\mathfrak{M}} f. \end{aligned}$$

\mathfrak{M} ist die Menge aller Werte von $P_{\mathfrak{M}}$, d. h. die Menge aller $P_{\mathfrak{M}} f$; es kann aber auch gekennzeichnet werden als Menge aller Lösungen von $P_{\mathfrak{M}} f = f$, während $\mathfrak{R} - \mathfrak{M}$ die Menge aller Lösungen von $P_{\mathfrak{M}} f = 0$ ist.

Bemerkung: Im nächsten Paragraphen werden wir sehen, daß die erste Eigenschaft die sog. linearen Operatoren kennzeichnet, und die zweite die sog. Hermiteschen. Die dritte drückt aus: zweimaliges Anwenden des Operators $P_{\mathfrak{M}}$ bewirkt dasselbe wie einmaliges — hierfür ist die allgemein übliche symbolische Ausdrucksweise: $P_{\mathfrak{M}} P_{\mathfrak{M}} = P_{\mathfrak{M}}$ oder $P_{\mathfrak{M}}^2 = P_{\mathfrak{M}}$.

Beweis: Aus

$$f_1 = g_1 + h_1, \dots, f_n = g_n + h_n$$

folgt

$$(g_1, \dots, g_n \text{ aus } \mathfrak{M}, h_1, \dots, h_n \text{ aus } \mathfrak{R} - \mathfrak{M})$$

$$a_1 f_1 + \dots + a_n f_n = (a_1 g_1 + \dots + a_n g_n) + (a_1 h_1 + \dots + a_n h_n)$$

$$(a_1 g_1 + \dots + a_n g_n \text{ aus } \mathfrak{M}, a_1 h_1 + \dots + a_n h_n \text{ aus } \mathfrak{R} - \mathfrak{M}),$$

also

$$P_{\mathfrak{M}}(a_1 f_1 + \dots + a_n f_n) = a_1 g_1 + \dots + a_n g_n$$

$$= a_1 P_{\mathfrak{M}} f_1 + \dots + a_n P_{\mathfrak{M}} f_n.$$

Das ist die erste Formel.

Zweitens sei:

$$f = g' + h', \quad g = g'' + h'' \quad (g', g'' \text{ aus } \mathfrak{M}, h', h'' \text{ aus } \mathfrak{R} - \mathfrak{M}),$$

dann sind g', g'' zu h', h'' orthogonal, also

$$(g', g) = (g', g'' + h'') = (g', g'') = (g' + h', g'') = (f, g''),$$

d. h. $(P_{\mathfrak{M}} f, g) = (f, P_{\mathfrak{M}} g)$. Das ist die zweite Formel.

Schließlich gehört $P_{\mathfrak{M}} f$ zu \mathfrak{M} , also ist $P_{\mathfrak{M}} f = P_{\mathfrak{M}} f + 0$ die von **Satz 10**, gewährleistete Zerlegung für $P_{\mathfrak{M}} f$, d. h. $P_{\mathfrak{M}}(P_{\mathfrak{M}} f) = P_{\mathfrak{M}} f$. Das ist die dritte Formel.

$P_{\mathfrak{M}}f = f$ bzw. $= 0$ heißt, daß in der Zerlegung $f = g + h$, g von \mathfrak{M} , h von $\mathfrak{R} - \mathfrak{M}$ (Satz 10.) $f = g$, $h = 0$ bzw. $g = 0$, $f = h$ zu sein hat: d. h. daß f zu \mathfrak{M} bzw. $\mathfrak{R} - \mathfrak{M}$ gehört. Das ist die fünfte und sechste Behauptung. Alle $P_{\mathfrak{M}}f$ gehören nach Definition zu \mathfrak{M} , und jedes f' von \mathfrak{M} ist einem $P_{\mathfrak{M}}f$ gleich: z. B. nach dem soeben Gesagten $P_{\mathfrak{M}}f'$. Das ist die vierte Behauptung. —

Wir bemerken noch, daß aus der zweiten und dritten Formel dieses Satzes folgt:

$$(P_{\mathfrak{M}}f, P_{\mathfrak{M}}g) = (f, P_{\mathfrak{M}}P_{\mathfrak{M}}g) = (f, P_{\mathfrak{M}}g) = (P_{\mathfrak{M}}f, g).$$

Wir wollen nun die Projektionsoperatoren $P_{\mathfrak{M}}$ unabhängig von den \mathfrak{M} definieren.

Satz 12. Ein überall sinnvoller Operator E (vgl. das vor Satz 11. Gesagte) ist dann und nur dann Projektionsoperator, d. h. $E = P_{\mathfrak{M}}$ für eine geeignete abgeschlossene Linearmannigfaltigkeit \mathfrak{M} , wenn er die folgenden Eigenschaften hat:

$$(Ef, g) = (f, Eg), \quad E^2 = E$$

(vgl. die Bemerkung zu Satz 11.). Und zwar ist \mathfrak{M} dann durch E (nach Satz 11.) eindeutig bestimmt.

Beweis: Die Notwendigkeit dieser Bedingungen sowie das Bestimmtheitsein von \mathfrak{M} durch E , ist nach Satz 11. klar, es ist also bloß zu zeigen: wenn E die obigen Eigenschaften besitzt, so gibt es eine abgeschlossene Linearmannigfaltigkeit \mathfrak{M} mit $E = P_{\mathfrak{M}}$.

Sei \mathfrak{M} die von allen Ef aufgespannte abgeschlossene Linearmannigfaltigkeit. $g - Eg$ ist zu allen Ef orthogonal:

$$(Ef, g - Eg) = (Ef, g) - (Ef, Eg) = (Ef, g) - (E^2f, g) = 0.$$

Die zu $g - Eg$ orthogonalen Elemente von \mathfrak{R} bilden eine abgeschlossene Linearmannigfaltigkeit, also umfassen sie mit den Ef auch \mathfrak{M} — somit gehört $g - Eg$ zu $\mathfrak{R} - \mathfrak{M}$. Die zu \mathfrak{M} gehörige Zerlegung von g ist somit $g = Eg + (g - Eg)$, also $P_{\mathfrak{M}}g = Eg$, wobei g beliebig war. Damit ist alles bewiesen. —

Wenn $\mathfrak{M} = \mathfrak{R}$ oder $= [0]$ ist, so ist $\mathfrak{R} - \mathfrak{M} = [0]$ bzw. \mathfrak{R} , also $f = f + 0$ bzw. $= 0 + f$ die Zerlegung nach Satz 11.; also ist dann $P_{\mathfrak{M}}f = f$ bzw. $= 0$. Den (überall sinnvollen!) durch $Rf = f$ definierten Operator nennen wir 1, den durch $Rf = 0$ definierten 0. Es ist also: $P_{\mathfrak{R}} = 1$, $P_{[0]} = 0$. Ferner ist es klar, daß die zu \mathfrak{M} gehörige Zerlegung $f = g + h$ (g von \mathfrak{M} , h von $\mathfrak{R} - \mathfrak{M}$) in der Form $f = h + g$ (h von $\mathfrak{R} - \mathfrak{M}$, g von \mathfrak{M}) auch für $\mathfrak{R} - \mathfrak{M}$ verwendbar ist. (Denn da g zu \mathfrak{M} gehört, ist es zu jedem Elemente von $\mathfrak{R} - \mathfrak{M}$ orthogonal, also gehört es zu $\mathfrak{R} - (\mathfrak{R} - \mathfrak{M})$.) Daher ist $P_{\mathfrak{M}}f = g$, $P_{\mathfrak{R} - \mathfrak{M}}f = h = f - g$, d. h. $P_{\mathfrak{R} - \mathfrak{M}}f = f - P_{\mathfrak{M}}f$. Diese Tatsache, $P_{\mathfrak{R} - \mathfrak{M}}f = 1f - P_{\mathfrak{M}}f$, drücken wir symbolisch so aus: $P_{\mathfrak{R} - \mathfrak{M}} = 1 - P_{\mathfrak{M}}$ (zum Addieren, Subtrahieren und Multiplizieren von Operatoren vgl. die Ausführungen von Satz 14.).

Man beachte: vorhin erkannten wir leicht, daß \mathfrak{M} Teilmenge von $\mathfrak{R} - (\mathfrak{R} - \mathfrak{M})$ ist, daß beide Mengen gleich sind, dürfte nur umständlicher direkt zu beweisen sein. Es folgt aber sofort aus

$$P_{\mathfrak{R} - (\mathfrak{R} - \mathfrak{M})} = 1 - P_{\mathfrak{R} - \mathfrak{M}} = 1 - (1 - P_{\mathfrak{M}}) = P_{\mathfrak{M}}.$$

Übrigens folgt aus dem Obigen, daß mit E auch $1 - E$ ein Projektionsoperator ist, und wegen $1 - (1 - E) = E$ gilt auch die Umkehrung.

Satz 13. Es ist stets

$$\|E f\|^2 = (E f, f), \quad \|E f\| \leq \|f\|,$$

$\|E f\| = 0$ bzw. $\|f\|$ ist für die f von $\mathfrak{R} - \mathfrak{M}$ bzw. \mathfrak{M} charakteristisch.

Bemerkung: Also ist insbesondere

$$\|E f - E g\| = \|E(f - g)\| \leq \|f - g\|,$$

d. h. der Operator E stetig (vgl. die Ausführungen nach *Satz 2.* in II. 1.).

Beweis: Es ist (vgl. das nach *Satz 11.* Gesagte)

$$\|E f\|^2 = (E f, E f) = (E f, f).$$

Da auch $1 - E$ ein Projektionsoperator ist:

$$\begin{aligned} \|E f\|^2 + \|f - E f\|^2 &= \|E f\|^2 + \|(1 - E)f\|^2 = (E f, f) + ((1 - E)f, f) \\ &= (f, f) = \|f\|^2. \end{aligned}$$

Da beide Addenden ≥ 0 sind, sind sie auch $\leq \|f\|^2$, insbesondere $\|E f\|^2 \leq \|f\|^2$, $\|E f\| \leq \|f\|$. Daß $\|E f\| = 0$, $E f = 0$ die Zugehörigkeit zu $\mathfrak{R} - \mathfrak{M}$ ausdrückt, wissen wir aus *Satz 11.*; $\|E f\| = \|f\|$ bedeutet wegen der obigen Relation $\|f - E f\| = 0$, $E f = f$, also nach *Satz 11.*, daß f zu \mathfrak{M} gehört. —

Wenn R, S zwei Operatoren sind, so verstehen wir unter $R \pm S$, aR (a eine komplexe Zahl), RS die durch

$$(R \pm S)f = Rf \pm Sf, \quad (aR)f = a \cdot Rf, \quad (RS)f = R(Sf)$$

definierten Operatoren; und setzen naturgemäß

$$R^0 = 1, \quad R^1 = R, \quad R^2 = RR, \quad R^3 = RRR, \dots$$

Die hierbei gültigen Rechenregeln sind leicht zu diskutieren: für $R \pm S$, aR verifiziert man mühelos alle für Zahlen gültigen elementaren Rechengesetze, nicht aber für RS . Wohl gelten, wie man verifizieren kann, die distributiven Gesetze: $(R \pm S)T = RT \pm ST$ und $R(S \pm T) = RS \pm RT$ (fürs letztere ist allerdings die Linearität von R erforderlich, vgl. die Bemerkung zu *Satz 11.* und das im nächsten Paragraphen zu sagende), sowie das assoziative: $(RS)T = R(ST) = RST$, aber das kommutative Gesetz $RS = SR$ gilt nicht allgemein. $[(RS)f = R(Sf)$ und $(SR)f = S(Rf)$ brauchen nicht einander gleich

zu sein!] Gilt es für zwei spezielle R, S doch, so heißen sie vertauschbar. So sind z. B. 0 und 1 mit allen überall sinnvollen R vertauschbar:

$$R0 = 0R = 0, R1 = 1R = R;$$

oder R^m, R^n , da $R^m R^n = R^{m+n}$ ist, also von der Reihenfolge von m, n nicht abhängt.

Satz 14. E, F seien Projektionsoperatoren, und zwar diejenigen der abgeschlossenen Linear Mannigfaltigkeiten $\mathfrak{M}, \mathfrak{N}$. EF ist dann und nur dann auch Projektionsoperator, wenn E, F vertauschbar sind, d. h. wenn $EF = FE$ ist. Und zwar gehört es dann zur abgeschlossenen Linear Mannigfaltigkeit \mathfrak{B} , die aus den gemeinsamen Elementen von $\mathfrak{M}, \mathfrak{N}$ besteht. $E + F$ ist dann und nur dann einer, wenn $EF = 0$ ist (oder auch: wenn $FE = 0$ ist). Dies bedeutet, daß ganz \mathfrak{M} zu ganz \mathfrak{N} orthogonal ist, $E + F$ gehört dann zu $\mathfrak{M} + \mathfrak{N} = [\mathfrak{M}, \mathfrak{N}]$, welches in diesem Falle $= \{\mathfrak{M}, \mathfrak{N}\}$ ist. $E - F$ ist dann und nur dann einer, wenn $EF = F$ ist (oder auch: wenn $FE = F$ ist). Dies bedeutet, daß \mathfrak{M} Teilmenge von \mathfrak{N} ist, $E - F$ gehört dann zu $\mathfrak{M} - \mathfrak{N}$.

Beweis: Bei EF müssen wir die zwei Bedingungen von Satz 12. nachprüfen:

$$(EFf, g) = (f, EFg), \quad (EF)^2 = EF.$$

Wegen $(EFf, g) = (f, Eg) = (f, FEg)$ besagt die erste:

$$(f, EFg) = (f, FEg), \quad (f, (EF - FE)g) = 0.$$

Da dies für alle f gilt, ist $(EF - FE)g = 0$, da dies für alle g gilt, ist $EF - FE = 0$, $EF = FE$. Die Vertauschbarkeit ist also schon für die erste Bedingung notwendig und hinreichend, aber sie hat auch die zweite zur Folge:

$$(EF)^2 = EFFE = EEFF = E^2F^2 = EF.$$

Da $E + F$ die Bedingung $((E + F)f, g) = (f, (E + F)g)$ immer erfüllt (weil E, F es tun), ist nur die zweite Bedingung $(E + F)^2 = E + F$ zu prüfen. Wegen

$$(E + F)^2 = E^2 + F^2 + EF + FE = (E + F) + (EF + FE)$$

besagt sie einfach $EF + FE = 0$. Nun ist für $EF = 0$ EF ein Projektionsoperator, also nach dem vorhin Bewiesenen $EF = FE$, also $EF + FE = 0$. Umgekehrt folgt aus $EF + FE = 0$

$$E(EF + FE) = E^2F + EFE = EF + EFE = 0,$$

$$E(EF + FE)E = E^2FE + EFE^2 = EFE + EFE = 2 \cdot EFE = 0,$$

also $EFE = 0$, und daher $EF = 0$. Somit ist $EF = 0$ notwendig und hinreichend oder, da E, F dieselbe Rolle spielen $FE = 0$.

$E - F$ ist dann und nur dann ein Projektionsoperator, wenn $1 - (E - F) = (1 - E) + F$ einer ist, und da $1 - E, F$ solche sind, ist

hierfür nach dem soeben Bewiesenen $(1-E)F=0$, $F-EF=0$, $EF=F$ charakteristisch, oder auch $F(1-E)=0$, $F-FE=0$, $FE=F$.

Wir haben noch die Behauptungen über \mathfrak{M} , \mathfrak{N} ($E=P_{\mathfrak{M}}$, $F=P_{\mathfrak{N}}$) zu beweisen. Sei erstens $EF=FE$. Dann gehört jedes $EFf=FEf$ zu \mathfrak{M} und zu \mathfrak{N} , also zu \mathfrak{P} , und für jedes g von \mathfrak{P} ist $Eg=Fg=g$, also $EFg=Eg=g$, d. h. es hat die Form EFf . Somit ist \mathfrak{P} der Wertevorrat von EF , nach Satz 11. ist also $EF=P_{\mathfrak{P}}$. Sei zweitens $EF=0$ (also auch $FE=0$). Jedes $(E+F)f=Ef+Ff$ gehört zu $\{\mathfrak{M}, \mathfrak{N}\}$, und jedes g von $\{\mathfrak{M}, \mathfrak{N}\}$ ist gleich $h+j$, h aus \mathfrak{M} , j aus \mathfrak{N} , also $Eh=h$, $Fh=FEh=0$, $Fj=j$, $Ej=EFj=0$, also

$$(E+F)(h+j) = Eh + Fh + Ej + Fj = h + j, (E+F)g = g,$$

g hat also die Form $(E+F)f$. Somit ist $\{\mathfrak{M}, \mathfrak{N}\}$ der Wertevorrat von $E+F$, da aber $E+F$ Projektionsoperator ist, ist $\{\mathfrak{M}, \mathfrak{N}\}$ die dazugehörige abgeschlossene Linearmannigfaltigkeit (Satz 11.). Da $\{\mathfrak{M}, \mathfrak{N}\}$ abgeschlossen ist, ist es $=[\mathfrak{M}, \mathfrak{N}] = \mathfrak{M} + \mathfrak{N}$. Sei drittens $EF=F$ (also auch $FE=F$). Dann ist $E=P_{\mathfrak{M}}$, $1-F=P_{\mathfrak{N}-\mathfrak{N}}$, also $E-F=E-EF=E(1-F)$ gleich $P_{\mathfrak{P}}$, wo \mathfrak{P} der gemeinsame Teil von \mathfrak{M} und $\mathfrak{N}-\mathfrak{N}$ ist, d. h. $\mathfrak{M}-\mathfrak{N}$.

Schließlich bedeutet $EF=0$, daß stets $(EFf, g) = 0$, d. h. $(Ff, Eg) = 0$ ist, d. h. daß ganz \mathfrak{M} zu ganz \mathfrak{N} orthogonal steht. Und $EF=F$ bedeutet $F(1-E)=0$, d. h. ganz \mathfrak{N} ist zu $\mathfrak{N}-\mathfrak{M}$ orthogonal oder auch: \mathfrak{N} ist Teilmenge von $\mathfrak{N}-(\mathfrak{N}-\mathfrak{M}) = \mathfrak{M}$. —

Wenn \mathfrak{N} Teilmenge von \mathfrak{M} ist, so wollen wir auch für $F=P_{\mathfrak{N}}$, $E=P_{\mathfrak{M}}$ sagen, daß F Teil von E ist, in Zeichen: $E \geq F$ oder $F \leq E$. (Dies bedeutet also $EF=F$, oder auch $FE=F$, und hat die Vertauschbarkeit zur Folge. Man erkennt, sei es durch Betrachten von $\mathfrak{M}, \mathfrak{N}$, sei es durch direktes Ausrechnen: Es ist stets $0 \leq E \leq 1$. Aus $E \leq F$, $F \leq E$ folgt $E=F$. Aus $E \leq F$, $F \leq G$ folgt $E \leq G$. Unser \leq hat also die Eigenschaften einer „Größenanordnung“. Man beachte ferner, daß $E \leq F$, $1-E \geq 1-F$, und E orthogonal zu $1-F$ alle drei gleichbedeutend sind. Ferner folgt aus der Orthogonalität von E, F die von E', F' , wenn $E' \leq E$, $F' \leq F$ ist.) Wenn $\mathfrak{M}, \mathfrak{N}$ orthogonal sind, nennen wir auch E, F orthogonal. (Dies bedeutet also $EF=0$, oder auch $FE=0$.) Umgekehrt wollen wir, wenn E, F vertauschbar sind, auch ihre $\mathfrak{M}, \mathfrak{N}$ vertauschbar nennen.

Satz 15. $E \leq F$ ist damitgleichbedeutend, daß stets $\|Ef\| \leq \|Ff\|$ ist.

Beweis: Aus $E \leq F$ folgt $E=EF$, also $\|Ef\| = \|EFf\| \leq \|Ff\|$ (vgl. Satz 13.). Umgekehrt hat diese Relation die Konsequenz: wenn $Ff=0$ ist, so ist $\|Ef\| \leq \|Ff\| = 0$, $Ef=0$ — wegen $F(1-F)f = (F-F^2)f=0$ ist also identisch $E(1-F)f=0$, d. h. $E(1-F) = E-EF=0$, $E=EF$, also $E \leq F$.

Satz 16. E_1, \dots, E_k seien Projektionsoperatoren, $E_1 + \dots + E_k$ ist dann und nur dann auch einer, wenn alle E_m, E_l ($m, l = 1, \dots, k, m \neq l$)

zueinander orthogonal sind. Eine andere notwendige und hinreichende Bedingung ist

$$\|E_1 f\|^2 + \dots + \|E_k f\|^2 \leq \|f\|^2,$$

(für alle f). Übrigens ist dann $E_1 + \dots + E_k$ der Projektionsoperator von $\mathfrak{M}_1 + \dots + \mathfrak{M}_k = [\mathfrak{M}_1, \dots, \mathfrak{M}_k]$, welches in diesem Falle $= \{\mathfrak{M}_1, \dots, \mathfrak{M}_k\}$ ist ($E_1 = P_{\mathfrak{M}_1}, \dots, E_k = P_{\mathfrak{M}_k}$).

Beweis: Die letzte Behauptung ergibt sich aus der wiederholten Anwendung von Satz 14., ebenso die Hinreichendheit des ersten Kriteriums. Wenn das zweite Kriterium erfüllt ist, so ist es auch das erste: Für $m \neq l$ $E_m f = f$ ist

$$\|f\|^2 + \|E_l f\|^2 = \|E_m f\|^2 + \|E_l f\|^2 \leq \|E_1 f\|^2 + \dots + \|E_k f\|^2 \leq \|f\|^2, \\ \|E_l f\|^2 = 0, \quad E_l f = 0.$$

Da aber identisch $E_m(E_m f) = E_m f$ gilt, ist $E_l(E_m f) = 0$, d. h. $E_l E_m = 0$. Schließlich ist die zweite Bedingung notwendig: wenn $E_1 + \dots + E_k$ ein Projektionsoperator ist, so ist (Satz 13.)

$$\|E_1 f\|^2 + \dots + \|E_k f\|^2 = (E_1 f, f) + \dots + (E_k f, f) \\ = ((E_1 + \dots + E_k) f, f) = \|(E_1 + \dots + E_k) f\|^2 \leq \|f\|^2.$$

Wir haben also das folgende logische Schema:

$$E_1 + \dots + E_k \text{ ist Projektionsoperator} \rightarrow \text{zweites Kriterium} \rightarrow \\ \rightarrow \text{erstes Kriterium} \rightarrow E_1 + \dots + E_k \text{ ist Projektionsoperator.}$$

Also sind alle drei gleichwertig. —

Zum Schluß beweisen wir noch einen Satz über die Konvergenz von Projektionsoperatoren:

Satz 17. Sei E_1, E_2, \dots eine auf- oder absteigende Folge von Projektionsoperatoren: $E_1 \leq E_2 \leq \dots$ oder $E_1 \geq E_2 \geq \dots$. Die konvergieren dann gegen einen Projektionsoperator E , in dem Sinne, daß für alle f $E_n f \rightarrow E f$; und zwar sind alle $E_n \leq E$ bzw. alle $E_n \geq E$.

Beweis: Es genügt, den zweiten Fall zu untersuchen, da der erste durch Ersetzen von E_1, E_2, \dots, E durch $1 - E_1, 1 - E_2, \dots, 1 - E$ auf ihn zurückgeführt werden kann. Sei also $E_1 \geq E_2 \geq \dots$.

Es ist (Satz 15.) $\|E_1 f\|^2 \geq \|E_2 f\|^2 \geq \dots \geq 0$, also existiert $\lim_{m \rightarrow \infty} \|E_m f\|^2$. Daher existiert zu jedem $\varepsilon > 0$ ein $N = N(\varepsilon)$, so daß für $m, l \geq N$ $|\|E_m f\|^2 - \|E_l f\|^2| < \varepsilon$ ist. Nun ist für $m \leq l$ $E_m \geq E_l$, $E_m - E_l$ Projektionsoperator, also

$$\|E_m f\|^2 - \|E_l f\|^2 = (E_m f, f) - (E_l f, f) = ((E_m - E_l) f, f) \\ = \|(E_m - E_l) f\|^2 = \|E_m f - E_l f\|^2,$$

woraus $\|E_m f - E_l f\| < \sqrt{\varepsilon}$ folgt. Die Folge $E_1 f, E_2 f, \dots$ genügt also der Cauchyschen Konvergenzbedingung, und hat daher einen Limes f^* (D. aus II. 1.). Durch $E f = f^*$ definieren wir demnach einen überall sinnvollen Operator.

Aus $(E_n f, g) = (f, E_n g)$ folgt durch Grenzübergang $(E f, g) = (f, E g)$, aus $(E_n f, E_n g) = (E_n f, g)$ $(E f, E g) = (E f, g)$ — also $(E^2 f, g) = (E f, g)$, $E^2 = E$: Somit ist E ein Projektionsoperator. Für $l \geq m$ ist $\|E_m f\| \geq \|E_n f\|$, $l \rightarrow \infty$ ergibt $\|E_m f\| \geq \|E f\|$, also ist $E_m \geq E$ (Satz 15.). —

Wenn E_1, E_2, \dots zueinander paarweise orthogonale Projektionsoperatoren sind, so sind $E_1, E_1 + E_2, E_1 + E_2 + E_3, \dots$ lauter Projektionsoperatoren (Satz 16.), und offenbar aufsteigend. Nach Satz 17. konvergieren sie also gegen einen Projektionsoperator, der \geq ist als sie alle, und den wir mit $E_1 + E_2 + \dots$ bezeichnen können. Sei etwa $E_1 = P_{\mathfrak{M}_1}, E_2 = P_{\mathfrak{M}_2}, \dots, E_1 + E_2 + \dots = P_{\mathfrak{M}}$. Da alle $E_m \leq E$ sind, ist \mathfrak{M}_m Teilmenge von \mathfrak{M} , also umfaßt \mathfrak{M} auch $[\mathfrak{M}_1, \mathfrak{M}_2, \dots] = \mathfrak{M}_1 + \mathfrak{M}_2 + \dots = \mathfrak{M}'$. Umgekehrt sind alle \mathfrak{M}_m Teilmengen von \mathfrak{M}' , also $E_m \leq P_{\mathfrak{M}'} = E'$. Aus Stetigkeitsgründen ist somit (vgl. die Überlegung beim obigen Beweise) $E \leq E'$, also \mathfrak{M} Teilmenge von \mathfrak{M}' . Daher ist $\mathfrak{M} = \mathfrak{M}', E = E'$, d. h. $\mathfrak{M} = \mathfrak{M}_1 + \mathfrak{M}_2 + \dots$; oder anders geschrieben:

$$P_{\mathfrak{M}_1 + \mathfrak{M}_2 + \dots} = P_{\mathfrak{M}_1} + P_{\mathfrak{M}_2} + \dots$$

Damit schließen wir unsere Betrachtungen über Projektionsoperatoren ab.

5. Operatoren im Hilbertschen Raume.

Wir sind nunmehr über die geometrischen Verhältnisse des unendlichvioldimensionalen (Hilbertschen) Raumes \mathfrak{R}_∞ hinreichend orientiert, um unsere Aufmerksamkeit seinen linearen Operatoren — d. h. den linearen Abbildungen von \mathfrak{R}_∞ auf sich selbst — zuwenden zu können. Dazu müssen wir einige Begriffe einführen, die allerdings teilweise schon im letzten Paragraphen vorweggenommen wurden.

Wir hatten schon im letzten Paragraphen mit Operatoren zu tun, die wir (im Einklang mit dem dort, vor Satz 11., Gesagten) so definieren:

Definition 6. Ein Operator R ist eine in einer Teilmenge von \mathfrak{R} definierte Funktion mit Werten aus \mathfrak{R} , d. h. eine Zuordnung, welche gewissen Elementen f von \mathfrak{R} gewisse Elemente Rf von \mathfrak{R} zuordnet.

(Wir haben hier außer \mathfrak{R}_∞ auch die \mathfrak{R}_n zugelassen. Man beachte: wenn \mathfrak{R}_∞ ein F_Ω ist, so ist der Operator R für die Elemente von F_Ω , d. h. gewöhnliche Zustandsraumfunktionen, definiert, und ebensolche sind seine Werte. Die Operatoren sind also dann sog. „Funktionsfunktionen“ oder „Funktionale“. Vgl. die Beispiele von I. 2., 4.) Die Klasse der f , für die Rf Sinn hat, der Definitionsbereich von R , braucht nicht ganz \mathfrak{R} zu umfassen, tut er es, so heißt R überall sinnvoll. Außerdem braucht die Klasse der Rf , der Wertevorrat von R (das durch R vermittelte Bild seines Definitionsbereiches) keineswegs im Definitionsbereich enthalten zu sein, d. h. wenn Rf Sinn hat, so braucht darum $R(Rf) = R^2 f$ nicht Sinn zu haben⁵⁸.

Was unter $R \pm S$, aR , RS , R^m (R , S Operatoren, a eine komplexe Zahl, $m = 0, 1, 2, \dots$) zu verstehen ist, haben wir schon im letzten Paragraphen gesagt:

$$(R \pm S)f = Rf \pm Sf, (aR)f = a \cdot Rf, (RS)f = R(Sf), \\ R^0 = 1, R^1 = R, R^2 = RR, R^3 = RRR, \dots$$

Bei der Umgrenzung der Definitionsbereiche ist freilich darauf zu achten, daß die linken Seiten (d. h. die Operatoren $R \pm S$, aR , RS) nur dann Sinn haben, wenn die rechten Seiten Sinn haben. Also z. B. $R \pm S$ nur im gemeinsamen Teile der Definitionsbereiche von R und S , usw. Wenn Rf jeden Wert, den es überhaupt annimmt, nur einmal annimmt, so hat es eine Inverse R^{-1} : $R^{-1}f$ hat Sinn, wenn $Rg = f$ eine Lösung g besitzt, und zwar ist es dann dieses g . Über die bei $R \pm S$, aR , RS gültigen Rechengesetze war schon im letzten Paragraphen die Rede, hier sei nur noch folgendes über die Definitionsbereiche erwähnt: Die dort als gleich bezeichneten Operatoren haben auch identische Definitionsbereiche, während Operatorengleichungen wie $0 \cdot R = 0$ nicht für die Definitionsbereiche gelten: $0f$ hat stets Sinn, $(0 \cdot R)f$ dagegen nach Definition nur, wenn Rf Sinn hat (aber wenn beide Sinn haben, sind beide $= 0$). Dagegen gilt $1 \cdot R = R \cdot 1 = R$, und auch $R^m \cdot R^l = R^{m+l}$, auch bezüglich der Definitionsbereiche.

Wenn R , S Inverse besitzen, so besitzt auch RS eine, und zwar ist, wie man leicht erkennt, $(RS)^{-1} = S^{-1}R^{-1}$. Ferner ist für $a \neq 0$ $(aR)^{-1} = \frac{1}{a}R^{-1}$. Wenn R^{-1} existiert, können wir auch die übrigen negativen Potenzen von R bilden:

$$R^{-2} = R^{-1}R^{-1}, R^{-3} = R^{-1}R^{-1}R^{-1}, \dots$$

Nach diesen allgemeinen Ausführungen gehen wir dazu über, diejenigen speziellen Operatorenklassen, die für uns von besonderer Wichtigkeit sein werden, näher zu untersuchen.

Definition 7. Ein Operator A heißt linear, wenn sein Definitionsbereich eine Linearmannigfaltigkeit ist, d. h. mit f_1, \dots, f_k auch $a_1f_1 + \dots + a_kf_k$ enthält, und dabei

$$A(a_1f_1 + \dots + a_kf_k) = a_1Af_1 + \dots + a_kAf_k$$

ist. Wir werden im folgenden nur noch lineare Operatoren betrachten, und zwar solche, deren Definitionsbereich überall dicht ist.

Die letztere Bemerkung schafft uns einen für manche Zwecke hinreichenden Ersatz für die Überall-Sinnvollheit der Operatoren, auf die wir in der Quantenmechanik verzichten müssen. Dieser Umstand ist wichtig genug, daß wir ihn etwas genauer ins Auge fassen. Betrachten wir z. B. in SCHRÖDINGERS Wellenmechanik den Zustandsraum, der der Einfachheit halber eindimensional sein soll: $-\infty < q < +\infty$. Die

Wellenfunktionen sind die $\varphi(q)$ mit endlichem $\int_{-\infty}^{+\infty} |\varphi(q)|^2 dq$, diese bilden einen Hilbertschen Raum (vgl. II. 3.). Wir betrachten ferner die Operatoren $q \cdots$ und $\frac{h}{2\pi i} \frac{d}{dq} \cdots$. Es sind offenbar lineare Operatoren, aber ihr Definitionsbereich ist keineswegs der ganze Hilbertsche Raum. Bei $q \cdots$ darum nicht, weil $\int_{-\infty}^{+\infty} |q \varphi(q)|^2 dq = \int_{-\infty}^{+\infty} q^2 |\varphi(q)|^2 dq$ sehr wohl unendlich werden kann, auch wenn $\int_{-\infty}^{+\infty} |\varphi(q)|^2 dq$ endlich ist, so daß $q\varphi(q)$ nicht mehr im Hilbertschen Raume liegt; bei $\frac{h}{2\pi i} \frac{d}{dq}$ darum nicht, weil es undifferentiierbare Funktionen gibt, sowie solche, für die wohl $\int_{-\infty}^{+\infty} |\varphi(q)|^2 dq$, nicht aber

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \left| \frac{h}{2\pi i} \frac{d}{dq} \varphi(q) \right|^2 dq = \frac{h^2}{4\pi^2} \int_{-\infty}^{+\infty} \left| \frac{d}{dq} \varphi(q) \right|^2 dq$$

endlich ist (z. B. $|q|^{\frac{1}{2}} e^{-q^2}$, oder $e^{-q^2} \sin(e^{q^2})$). Aber die Definitionsbereiche sind überall dicht: Denn beide Operatoren sind sicher auf jedes $\varphi(q)$ anwendbar, welches nur in einem endlichen Intervalle $-C \leq q \leq C \neq 0$ und überall stetig differentiierbar ist; und diese Funktionenmenge ist überall dicht⁵⁹.

Wir definieren weiter:

Definition 8. Zwei Operatoren A, A^* heißen adjungiert, wenn sie denselben Definitionsbereich haben, und in diesem stets

$$(A f, g) = (f, A^* g), \quad (A^* f, g) = (f, A g)$$

gilt.

(Durch Vertauschen von f, g und Nehmen der komplex-konjugierten beider Seiten folgt jede dieser zwei Relationen aus der anderen. Ferner ist es klar, daß das Verhältnis A, A^* ein symmetrisches ist, d. h. daß auch A^*, A adjungiert sind. Es ist also $A^{**} = A$.)

Wir bemerken noch: zu A kann es nur ein adjungiertes A^* geben, d. h. wenn A zu A_1^* und zu A_2^* adjungiert ist, so muß $A_1^* = A_2^*$ sein. In der Tat ist für alle g mit sinnvollem $A g$

$$(A_1^* f, g) = (f, A g) = (A_2^* f, g),$$

und da diese g überall dicht liegen, $A_1^* f = A_2^* f$ — da dies allgemein gilt, $A_1^* = A_2^*$. Somit bestimmt A, A^* eindeutig, ebenso A^*, A .

Man erkennt mühelos: $0, 1$, und überhaupt alle Projektionsoperatoren E sind zu sich selbst adjungiert (vgl. Satz 12.), d. h. $0^* = 0, 1^* = 1, E^* = E$ existieren, und sind bzw. $= 0, 1, E$. Ferner ist $(aA)^* = \bar{a}A^*$, und, soweit $A \pm B$ überhaupt gebildet werden können (d. h. ihr Definitionsbereich überall dicht ist), $(A \pm B)^* = A^* \pm B^*$. Mit leicht ermittelbaren Einschränkungen bezüglich der Definitionsbereiche gilt schließlich

$(AB)^* = B^*A^*$ (es ist nämlich $(ABf, g) = (Bf, A^*g) = (f, B^*A^*g)$),
sowie $(A^{-1})^* = A^{*-1}$ (es ist

$$(A^{-1}f, g) = (A^{-1}f, A^*A^{*-1}g) = (AA^{-1}f, A^{*-1}g) = (f, A^{*-1}g).$$

Insbesondere ist im Falle der Schrödingerschen Wellenmechanik (den wir vorher betrachteten, wo aber jetzt ein k -dimensionaler Zustandsraum vorausgesetzt werde), wo der Hilbertsche Raum aus den $\varphi(q_1, \dots, q_k)$ mit endlichem $\int_{-\infty}^{\infty} \dots \int_{-\infty}^{\infty} |\varphi(q_1 \dots q_k)|^2 dq_1 \dots dq_k$ besteht, für die Operatoren $q_i \dots$ und $\frac{h}{2\pi i} \frac{\partial}{\partial q_i} \dots$

$$(q_i)^* = q_i, \quad \left(\frac{h}{2\pi i} \frac{\partial}{\partial q_i}\right)^* = \frac{h}{2\pi i} \frac{\partial}{\partial q_i}.$$

Das erstere ist wegen

$$\begin{aligned} & \int_{-\infty}^{\infty} \dots \int_{-\infty}^{\infty} q_i \cdot \varphi(q_1 \dots q_k) \cdot \overline{\psi(q_1 \dots q_k)} \cdot dq_1 \dots dq_k \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} \dots \int_{-\infty}^{\infty} \varphi(q_1 \dots q_k) \cdot \overline{q_i \cdot \psi(q_1 \dots q_k)} \cdot dq_1 \dots dq_k \end{aligned}$$

klar, das letztere besagt

$$\begin{aligned} & \int_{-\infty}^{\infty} \dots \int_{-\infty}^{\infty} \frac{h}{2\pi i} \frac{\partial}{\partial q_i} \varphi(q_1 \dots q_k) \cdot \overline{\psi(q_1 \dots q_k)} \cdot dq_1 \dots dq_k \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} \dots \int_{-\infty}^{\infty} \varphi(q_1 \dots q_k) \cdot \overline{\frac{h}{2\pi i} \frac{\partial}{\partial q_i} \psi(q_1 \dots q_k)} \cdot dq_1 \dots dq_k, \end{aligned}$$

d. h.

$$\begin{aligned} & \int_{-\infty}^{\infty} \dots \int_{-\infty}^{\infty} \left\{ \frac{\partial}{\partial q_i} \varphi(q_1 \dots q_k) \cdot \overline{\psi(q_1 \dots q_k)} + \varphi(q_1 \dots q_k) \cdot \frac{\partial}{\partial q_i} \overline{\psi(q_1 \dots q_k)} \right\} \\ & \times dq_1 \dots dq_k = 0, \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} & \limes_{A \rightarrow +\infty, B \rightarrow +\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \dots \int_{-\infty}^{\infty} [\varphi(q_1 \dots q_k) \overline{\psi(q_1 \dots q_k)}]_{q_i = -B}^{q_i = +A} \\ & \times dq_1 \dots dq_{i-1} dq_{i+1} \dots dq_k = 0. \end{aligned}$$

Der Limes muß existieren, weil die Konvergenz aller Integrale

$$\int_{-\infty}^{\infty} \dots \int_{-\infty}^{\infty} dq_1 \dots dq_k$$

feststeht (da $\varphi, \psi, \frac{\partial}{\partial x_i} \varphi, \frac{\partial}{\partial x_i} \psi$ zum Hilbertschen Raume gehören), nur auf sein Verschwinden kommt es an. Wäre er $\neq 0$, so wäre (der sicher vorhandene) Limes

$$\int_{-\infty}^{\infty} \dots \int_{-\infty}^{\infty} \varphi(q_1 \dots q_k) \overline{\psi(q_1 \dots q_k)} dq_1 \dots dq_{i-1} dq_{i+1} \dots dq_k$$

für $q_l \rightarrow +\infty$ oder für $q_l \rightarrow -\infty \neq 0$, was mit der absoluten Konvergenz des Integrals

$$\int_{-\infty}^{\infty} \cdots \int_{-\infty}^{\infty} \varphi(q_1 \cdots q_k) \overline{\varphi(q_1 \cdots q_k)} dq_1 \cdots dq_{l-1} dq_l dq_{l+1} \cdots dq_k$$

(φ, ψ gehören zum Hilbertschen Raume!) unvereinbar ist.

Wenn A der Integraloperator

$$A \varphi(q_1 \cdots q_k) = \int_{-\infty}^{\infty} \cdots \int_{-\infty}^{\infty} K(q_1 \cdots q_k; q'_1 \cdots q'_k) \varphi(q'_1 \cdots q'_k) dq'_1 \cdots dq'_k$$

ist, so überlegt man sich mühelos: auch A^* ist Integraloperator, nur ist sein Integrialkern nicht $K(q_1 \cdots q_k; q'_1 \cdots q'_k)$, sondern

$$\overline{K(q'_1 \cdots q'_k, q_1 \cdots q_k)}.$$

Betrachten wir nun die Verhältnisse der Matrizenlehre, wo der Hilbertsche Raum aus allen Folgen x_1, x_2, \dots mit endlichem $\sum_1^{\infty} |x_n|^2$ besteht. Ein linearer Operator A führt $\{x_1, x_2, \dots\}$ in $\{y_1, y_2, \dots\}$ über:

$$A\{x_1, x_2, \dots\} = \{y_1, y_2, \dots\},$$

wobei wegen der Linearität von A die y_1, y_2, \dots linear von den x_1, x_2, \dots abhängen müssen:

$$y_\mu = \sum_1^{\infty} a_{\mu\nu} x_\nu \quad 60.$$

Daher ist A durch Angabe der Matrix $a_{\mu\nu}$ charakterisiert. Man sieht sofort, daß zu A^* die Matrix $\overline{a_{\nu\mu}}$ (die komplex-konjugiert-transponierte Matrix!) gehört ⁶⁰.

Die soeben auseinandergesetzte Analogie mit den Verhältnissen der Matrizenlehre legt es nahe, den Begriff des Hermiteschen Operators so zu definieren, wie wir es jetzt tun werden. Wir führen gleichzeitig noch zwei andere, für unsere späteren Zwecke wichtige, Begriffsbildungen ein:

Definition 9. Der Operator A heißt Hermitesch, wenn $A^* = A$ ist. Er heißt auch definit, wenn hierbei stets $(Af, f) \geq 0$ ist ⁶¹. Der Operator U heißt unitär, wenn $UU^* = U^*U = 1$ ist ⁶².

Für unitäre Operatoren haben wir also $U^* = U^{-1}$. Nach Definition ist

$$(Uf, Ug) = (U^*Uf, g) = (f, g),$$

also insbesondere (für $f = g$) $\|Uf\| = \|f\|$. Aus der letzteren Eigenschaft folgt umgekehrt die Unitarität, falls U überall sinnvoll ist und jeden Wert annimmt (vgl. Anm. ⁶²). Dies beweist man so: Zunächst gilt

$$\|Uf\| = \|f\|, \quad \text{d. h.} \quad (Uf, Uf) = (f, f), \quad (U^*Uf, f) = (f, f).$$

Ersetzen wir f durch $\frac{f+g}{2}$ bzw. $\frac{f-g}{2}$ und subtrahieren, so entsteht,

wie man leicht ausrechnet, $\operatorname{Re}(Uf, Ug) = \operatorname{Re}(f, g)$. Ersetzen wir hierin f durch if , so erhalten wir Im an Stelle von Re . Somit gilt allgemein

$$(Uf, Ug) = (f, g), \quad \text{d. h.} \quad (U^*Uf, g) = (f, g).$$

Bei festem f gilt dies für alle g , also ist $U^*Uf = f$, da dies für alle f gilt, ist $U^*U = 1$. Es bleibt noch übrig, $UU^* = 1$ zu zeigen. Für jedes f gibt es ein g mit $Ug = f$, dann ist

$$UU^*f = UU^* \cdot Ug = U \cdot U^*Ug = Ug = f, \quad \text{also} \quad UU^* = 1.$$

Da wegen der Linearität

$$\|Uf - Ug\| = \|U(f - g)\| = \|f - g\|$$

ist, ist jedes unitäre U stetig, was bei Hermiteschen Operatoren keineswegs der Fall sein muß, so sind z. B. gerade die für die Quantenmechanik wichtigen Operatoren $q \cdots$ und $\frac{h}{2\pi i} \frac{d}{dq} \cdots$ unstetig⁶³.

Aus unseren formalen Rechenregeln für A^* folgt sofort: Wenn U, V unitär sind, so sind es auch U^{-1}, UV — also auch alle Potenzen von U ; wenn A, B Hermitesch sind, so sind es auch $A \pm B$, dagegen aA nur für reelles a (ausgenommen $A = 0$), und AB nur, wenn A, B vertauschbar sind, d. h. wenn $AB = BA$ gilt. Wir wissen ferner, daß alle Projektionsoperatoren (insbesondere $0, 1$) Hermitesch sind, ferner die Operatoren $q_i \cdots, \frac{h}{2\pi i} \frac{\partial}{\partial q_i} \cdots$ der Schrödingerschen Theorie. Mit A sind also auch alle Potenzen Hermitesch (auch A^{-1} , falls es existiert), und alle Polynome mit reellen Koeffizienten. Bemerkenswert ist noch, daß bei Hermiteschem A und beliebigem X auch $XA X^*$ Hermitesch ist:

$$(XA X^*)^* = X^{**} A^* X^* = XA X^*,$$

also z. B. alle XX^* ($A = 1$) und X^*X (X^* statt X). Für unitäre U ist UAU^{-1} Hermitesch (wegen $U^{-1} = U^*$).

Die Stetigkeit ist bei den Operatoren, ebenso wie bei den aus der Analysis bekannten Zahlenfunktionen, eine Eigenschaft von grundlegender Wichtigkeit. Wir wollen darum für lineare Operatoren einige charakteristische Bedingungen für ihr Vorliegen angeben.

Satz 18. Ein linearer Operator R ist überall stetig, wenn er es im Punkte $f = 0$ ist. Hierfür ist wiederum die Existenz einer Konstanten C notwendig und hinreichend, für die allgemein $\|Rf\| \leq C \cdot \|f\|$ gilt. Diese Bedingung ist ihrerseits mit der Allgemeingültigkeit von

$$|(Rf, g)| \leq C \cdot \|f\| \cdot \|g\|$$

gleichbedeutend. Bei Hermiteschem R braucht dies nur für $f = g$ gefordert zu werden: $|(Rf, f)| \leq C \cdot \|f\|^2$, oder, da (Rf, f) reell ist (Anm. ⁶¹):

$$-C \cdot \|f\|^2 \leq (Rf, f) \leq C \cdot \|f\|^2.$$

Bemerkung. Die Begriffsbildung der Stetigkeit bei Operatoren stammt von HILBERT⁶⁴, er bezeichnete sie als „Beschränktheit“ und definierte sie durch unser vorletztes Kriterium. Gilt von den beiden \leq des letzten Kriteriums nur eines allgemein, so heißt R halbbeschränkt: nach unten bzw. nach oben. So ist z. B. jedes definite R nach unten halbbeschränkt (mit $C = 0$).

Beweis: Stetigkeit für $f = 0$ besagt: zu jedem $\varepsilon > 0$ existiert ein $\delta > 0$, so daß aus $\|f\| < \delta$ $\|Rf\| < \varepsilon$ folgt. Dann folgt aus

$$\|f - f_0\| < \delta \quad \|R(f - f_0)\| = \|Rf - Rf_0\| < \varepsilon,$$

d. h. R ist auch für $f = f_0$ stetig, d. h. überall.

Gilt $\|Rf\| \leq C \cdot \|f\|$ (natürlich $C > 0$), so haben wir Stetigkeit; wir können $\delta = \frac{\varepsilon}{C}$ setzen. Umgekehrt können wir, falls Stetigkeit vorliegt, das δ zu $\varepsilon = 1$ bestimmen, und $C = \frac{2}{\delta}$ setzen. Denn

$$\|Rf\| \leq C \cdot \|f\|$$

gilt für $f = 0$ ohnehin; für $f \neq 0$, also $\|f\| > 0$, aber sei $g = \frac{\frac{1}{2}\delta}{\|f\|} \cdot f$, dann ist: $\|g\| = \frac{1}{2}\delta$, also

$$\|Rg\| = \frac{\frac{1}{2}\delta}{\|f\|} \cdot \|Rf\| < 1 \quad \|Rf\| < \frac{\|f\|}{\frac{1}{2}\delta} = C \cdot \|f\|.$$

Aus $\|Rf\| \leq C \cdot \|f\|$ folgt $|(Rf, g)| \leq \|Rf\| \cdot \|g\| \leq C \cdot \|f\| \cdot \|g\|$. Umgekehrt folgt aus $|(Rf, g)| \leq C \cdot \|f\| \cdot \|g\|$, wenn wir $g = Rf$ setzen, $\|Rf\|^2 \leq C \cdot \|f\| \cdot \|Rf\|$, also $\|Rf\| \leq C \cdot \|f\|$. Es bleibt noch für Hermitesche R zu zeigen, daß

$$|(Rf, f)| \leq C \cdot \|f\|^2 \quad |(Rf, g)| \leq C \cdot \|f\| \cdot \|g\|$$

zur Folge hat. Einsetzen von $\frac{f+g}{2}$ und $\frac{f-g}{2}$ für f ergibt:

$$\begin{aligned} |\operatorname{Re}(Rf, g)| &= \left| \left(R \frac{f+g}{2}, \frac{f+g}{2} \right) - \left(R \frac{f-g}{2}, \frac{f-g}{2} \right) \right| \\ &\leq C \left(\left\| \frac{f+g}{2} \right\|^2 + \left\| \frac{f-g}{2} \right\|^2 \right) = C \frac{\|f\|^2 + \|g\|^2}{2} \quad 65. \end{aligned}$$

Nun ersetzen wir, wie beim Beweise von Satz 1, f, g durch $af, \frac{1}{a}g$ ($a > 0$), Minimieren der rechten Seite ergibt: $|\operatorname{Re}(Rf, g)| \leq C \cdot \|f\| \cdot \|g\|$; so dann f durch $e^{i\alpha}f$ (α reell), fürs Maximum der linken Seite entsteht

$$|(Rf, g)| \leq C \cdot \|f\| \cdot \|g\|.$$

Allerdings gilt dies nur, wenn Rg sinnvoll ist, aber da diese g überall dicht liegen, und Rg im Schlußresultat gar nicht mehr vorkommt, gilt es aus Stetigkeitsgründen allgemein.

Wir beweisen noch einen Satz über definite Operatoren:

Satz 19. Ist R Hermitesch und definit, so ist stets

$$|(Rf, g)| \leq \sqrt{(Rf, f) \cdot (Rg, g)}.$$

Aus $(Rf, f) = 0$ folgt dann $Rf = 0$.

Beweis: Die obige Ungleichheit folgt genau so aus der Allgemeingültigkeit von $(Rf, f) \geq 0$ (Definitivität!), wie die Schwarzsche Ungleichheit $|(f, g)| \leq \sqrt{(f, f) \cdot (g, g)}$ (d. h. $\leq \|f\| \cdot \|g\|$) in **Satz 1.** aus $(f, f) \geq 0$ bewiesen wurde. Ist nun $(Rf, f) = 0$, so folgt aus dieser Ungleichheit auch $(Rf, g) = 0$, falls Rg sinnvoll ist. Somit gilt es für eine überall dichte g -Menge, also aus Stetigkeitsgründen für alle g . Daher ist $Rf = 0$.

Zum Schluß wollen wir noch auf den wichtigen Begriff der Vertauschbarkeit zweier Operatoren R, S , d. i. die Beziehung $RS = SR$, hinweisen.

Aus $RS = SR$ folgt

$$S \cdots SSR = S \cdots SRS = S \cdots RSS = \cdots = RS \cdots SS,$$

d. h. R, S^n sind vertauschbar ($n = 1, 2, \dots$). Da $R1 = 1R = R$ ist, und $S^0 = 1$ gilt, gilt dies auch noch für $n = 0$. Falls S^{-1} existiert, so ist $S^{-1} \cdot SR \cdot S^{-1} = S^{-1} \cdot RS \cdot S^{-1}$, also wegen

$$S^{-1} \cdot SR \cdot S^{-1} = S^{-1} S \cdot RS^{-1} = RS^{-1}, \quad S^{-1} \cdot RS \cdot S^{-1} = S^{-1} R \cdot SS^{-1} = S^{-1} R$$

auch $RS^{-1} = S^{-1}R$. Somit ist auch $n = -1$, und damit alle $n = -2, -3, \dots$ zulässig. D. h.: R ist mit allen Potenzen von S vertauschbar. Nochmalige Anwendung zeigt: jede Potenz von R ist mit jeder von S vertauschbar. — Wenn R mit S, T vertauschbar ist, so ist es offenbar auch mit allen aS , ferner mit $S \pm T$, ST vertauschbar. Zusammen mit dem obigen Resultat folgt daraus: sind R, S vertauschbar, so sind es auch alle Polynome von R mit allen Polynomen von S . Insbesondere ergibt $R = S$: alle Polynome von R sind untereinander vertauschbar.

6. Das Eigenwertproblem.

Wir sind nun so weit, daß wir uns im abstrakten Hilbertschen Raume demjenigen Problem zuwenden können, das in seinen speziellen Realisationen F_Z und F_Ω die Hauptfrage der Quantenmechanik war: die Auflösung der Gleichungen E_1 bzw. E_2 in I. 3. Man nennt dies das Eigenwertproblem, wir müssen es neu und einheitlich formulieren.

In I. 3. verlangten E_1, E_2 gleichlautend das Auffinden aller Lösungen $\varphi \neq 0$ von

$$E \cdot \varphi = \lambda \varphi,$$

wo H der der Hamiltonschen Funktion (vgl. dort) entsprechende Hermitesche Operator ist, φ ein Element des Hilbertschen Raumes, λ eine reelle Zahl (H gegeben, φ, λ gesucht). Dabei wurden aber gewisse

Anforderungen an die Anzahl der zu findenden Lösungen gestellt: es wurde verlangt, so viele zu finden, daß

1. in der Matrizentheorie aus diesen Lösungen

$$\varphi_1 = \{s_{11}, s_{12}, \dots\}, \varphi_2 = \{s_{21}, s_{22}, \dots\}, \dots$$

(wir sind in $F_{\mathbb{Z}}$!) eine Matrix $S = \{s_{\mu\nu}\}$ zusammengesetzt werden könne, die eine Reziproke S^{-1} besitzt (vgl. I. 3.);

2. in der Wellentheorie eine jede Wellenfunktion $\varphi(q_1 \cdots q_f)$ (die keine Lösung zu sein braucht) in eine nach den Lösungen

$$\varphi_1 = \varphi_1(q_1 \cdots q_f), \varphi_2 = \varphi_2(q_1 \cdots q_f), \dots$$

fortschreitende Reihe entwickelt werden kann ($\varphi_1, \varphi_2, \dots$ dürfen zu verschiedenen λ gehören):

$$\varphi(q_1 \cdots q_f) = \sum_1^{\infty} c_n \varphi_n(q_1 \cdots q_f).$$

(Vom letzteren Umstand war zwar in I. 3. keine Rede, diese Forderung ist aber für den weiteren Ausbau der Wellentheorie, insbesondere für SCHRÖDINGERS „Störungstheorie“⁶⁶, unerlässlich.)

Nun kommt 1. aufs selbe heraus, wie 2.: denn die Matrix S führt $\{1, 0, 0, \dots\}, \{0, 1, 0, \dots\}, \dots$ bzw. in

$$\{s_{11}, s_{12}, s_{13}, \dots\}, \{s_{21}, s_{22}, s_{23}, \dots\}, \dots$$

über, also den ganzen Hilbertschen Raum \mathfrak{H}_{∞} in die von $\varphi_1, \varphi_2, \dots$ aufgespannte abgeschlossene Linearmanigfaltigkeit — damit S^{-1} existiert, muß also die letztere auch gleich \mathfrak{H}_{∞} sein. Gerade dasselbe besagt aber 2.: es fordert ja ebenfalls, daß jedes φ durch Linearaggregate der $\varphi_1, \varphi_2, \dots$ beliebig gut approximiert werden könne⁶⁷. Präzisieren wir die Tragweite dieser Bedingung, und prüfen wir die Eigenschaften der Gleichung **E.** mit dem jetzt zur Verfügung stehenden formalen Apparat nochmal!

Erstens genügt es, da $\varphi \neq 0$ verlangt wird, und mit φ auch $a\varphi$ Lösung ist, Lösungen mit $\|\varphi\| = 1$ zu betrachten. Zweitens brauchen wir die Realität von λ nicht zu fordern, sie folgt aus $H\varphi = \lambda\varphi$:

$$(H\varphi, \varphi) = (\lambda\varphi, \varphi) = \lambda(\varphi, \varphi) = \lambda$$

(vgl. II. 5., Anm. ⁶¹). Drittens sind Lösungen φ_1, φ_2 , die zu verschiedenen λ_1, λ_2 gehören, zueinander orthogonal:

$$(H\varphi_1, \varphi_2) = \lambda_1(\varphi_1, \varphi_2), (H\varphi_1, \varphi_2) = (\varphi_1, H\varphi_2) = \lambda_2(\varphi_1, \varphi_2);$$

also wegen $\lambda_1(\varphi_1, \varphi_2) = \lambda_2(\varphi_1, \varphi_2)$ und $\lambda_1 \neq \lambda_2$ $(\varphi_1, \varphi_2) = 0$.

Seien nun $\lambda_1, \lambda_2, \dots$ alle voneinander verschiedenen λ , für die **E.** lösbar ist. (Wählen wir zu jedem λ mit lösbarem $H\varphi = \lambda\varphi$ eine Lösung φ_{λ} vom Betrage 1, so bilden die φ_{λ} nach dem vorhin Gesagten ein normiertes Orthogonalsystem. Nach II. 2., Satz 3^(\infty), ist ihr System

also endlich oder eine unendliche Folge; daher können wir auch die λ als, eventuell abbrechende, Folge schreiben.) Für jedes $\lambda = \lambda_\rho$ bilden alle Lösungen von $H\varphi = \lambda\varphi$ eine lineare Mannigfaltigkeit, und zwar eine abgeschlossene⁶⁸. Nach Satz 9. existiert also ein normiertes Orthogonalsystem $\varphi_{\rho,1}, \dots, \varphi_{\rho,\nu_\rho}$ solcher Lösungen, das gerade diese abgeschlossene Linearmannigfaltigkeit aufspannt. Die Zahl ν_ρ ist offenbar die Höchstzahl von linear unabhängigen Lösungen für $\lambda = \lambda_\rho$, man nennt sie darum auch die Vielfachheit des Eigenwertes λ_ρ . ($\nu = 1, 2, \dots, \infty$; $\nu = \infty$ kann vorkommen, z. B. für $H = 1$, $\lambda = 1$.) Nach dem vorher Gesagten sind die $\varphi_{\rho,1}, \dots, \varphi_{\rho,\nu_\rho}$ verschiedener ρ auch zueinander orthogonal, also bilden sämtliche

$$\varphi_{\rho,\nu} \quad (\rho = 1, 2, \dots, \nu = 1', \dots, \nu_\rho')$$

auch ein normiertes Orthogonalsystem: Auf Grund seiner Entstehung erkennen wir, daß es dieselbe abgeschlossene Linearmannigfaltigkeit aufspannt wie alle Lösungen φ von E .

Wir numerieren die $\varphi_{\rho,\nu}$ irgendwie durch: ψ_1, ψ_2, \dots , die entsprechenden λ_ρ seien $\lambda^{(1)}, \lambda^{(2)}, \dots$. Die vorher formulierte Bedingung, daß alle Lösungen von E . als abgeschlossene Linearmannigfaltigkeit \mathfrak{R}_∞ aufspannen sollen, besagt also, daß bereits ψ_1, ψ_2, \dots (ein Teilsystem von Lösungen!) dies tun müssen — also nach Satz 7. α), daß dieses normierte Orthogonalsystem vollständig ist.

Die Lösung des Eigenwertproblems im Sinne der Quantenmechanik würde also verlangen, so viele Lösungen

$$\varphi = \psi_1, \psi_2, \dots \text{ und } \lambda = \lambda_1, \lambda_2, \dots$$

von E . aufzufinden, daß aus ihnen ein vollständiges normiertes Orthogonalsystem gebildet werden kann. Dies ist aber im allgemeinen keineswegs möglich. So sieht man z. B. in der Wellentheorie, daß ein Teil der Lösungen von E . (d. h. E_2 . in I. 3.) — die man alle braucht, um jede Wellenfunktion nach Lösungen entwickeln zu können (vgl. oben) — kein endliches Absolutwertquadrat-Integral hat⁶⁹, also nicht zum Hilbertschen Raume gehört. In diesem (und nur ihn berücksichtigen wir ja bei E !) findet sich daher kein vollständiges normiertes Orthogonalsystem von Lösungen.

Andererseits zeigt die Hilbertsche Theorie des Eigenwertproblems, daß diese Erscheinung keineswegs eine Ausnahme im Verhalten von Operatoren darstellt (auch bei den stetigen nicht)⁷⁰. Wir müssen uns also mit den Verhältnissen, die bestehen, wenn sie eintritt, auseinandersetzen. (Was sie physikalisch bedeutet, werden wir noch sehen, vgl. III. 3.) Wenn sie eintritt, d. h. wenn das aus den Lösungen von E . herausgehobene normierte Orthogonalsystem nicht vollständig ist, so sagt man, daß ein „Streckenspektrum von H “ existiert. ($\lambda_1, \lambda_2, \dots$ bilden das „Punktspektrum von H “.)

Unsere nächste Aufgabe ist also, da \mathcal{E} versagt hat, eine Formulierung für das Eigenwertproblem der Hermiteschen Operatoren zu finden, und dieselbe dann auf die Quantenmechanik anzuwenden. Zunächst soll diese Formulierung des Eigenwertproblems, im Anschluß an HILBERT (vgl. a. a. O. Anm. 70), angegeben und erläutert werden.

7. Fortsetzung.

Die Gleichung

$$H\varphi = \lambda\varphi$$

sowie der Anspruch, daß aus ihren Lösungen ein vollständiges normiertes Orthogonalsystem gebildet werden könne, ist aus dem Endlichdimensionalen, den \mathfrak{R}_n , her analogisiert.

Im \mathfrak{R}_n ist ja H eine Matrix $\{h_{\mu\nu}\}$, $\mu, \nu = 1, \dots, n$, $h_{\mu\nu} = \overline{h_{\nu\mu}}$, und daß die Lösungen $\varphi = \{x_1, \dots, x_n\}$ von $H\varphi = \lambda\varphi$, d. h.

$$\sum_{\nu=1}^n h_{\mu\nu} x_\nu = \lambda x_\mu \quad (\mu = 1, \dots, n)$$

ein vollständiges normiertes Orthogonalsystem enthalten, ist eine bekannte algebraische Tatsache⁷¹.

Diese Eigenschaft des \mathfrak{R}_n läßt sich nun, wie wir sahen, nicht durch $n \rightarrow \infty$ auf \mathfrak{R}_∞ übertragen, also muß das Eigenwertproblem in \mathfrak{R}_∞ anders formuliert werden. Wir werden nun sehen, daß das Eigenwertproblem in \mathfrak{R}_n derart umformuliert werden kann, daß diese neue (in \mathfrak{R}_n der alten gleichwertige) Formulierung eine Übertragung auf \mathfrak{R}_∞ zuläßt. D. h.: beide drücken in jedem \mathfrak{R}_n ($n = 1, 2, \dots$) dasselbe aus (nämlich die Möglichkeit der Hauptachsentransformation Hermitescher Matrizen), aber die eine kann auch auf \mathfrak{R}_∞ übertragen werden, die andere dagegen nicht.

Sei $\{x_{11}, \dots, x_{1n}\}, \dots, \{x_{n1}, \dots, x_{nn}\}$ das vollständige normierte Orthogonalsystem aus Lösungen der Eigenwertgleichung, und $\lambda_1, \dots, \lambda_n$ die zugehörigen λ . Die Vektoren $\{x_{11}, \dots, x_{1n}\}, \dots, \{x_{n1}, \dots, x_{nn}\}$ bilden also ein cartesisches Koordinatensystem in \mathfrak{R}_n . Die Transformationsformeln von den Koordinaten ξ_1, \dots, ξ_n in diesem Koordinatensystem auf solche ξ_1, \dots, ξ_n lauten dann:

$$\{\xi_1, \dots, \xi_n\} = \xi_1 \{x_{11}, \dots, x_{1n}\} + \dots + \xi_n \{x_{n1}, \dots, x_{nn}\},$$

d. h.

$$\xi_1 = \sum_{\mu=1}^n x_{\mu 1} \xi_\mu, \dots, \xi_n = \sum_{\mu=1}^n x_{\mu n} \xi_\mu,$$

und invers

$$\xi_1 = \sum_{\mu=1}^n \bar{x}_{1\mu} \xi_\mu, \dots, \xi_n = \sum_{\mu=1}^n \bar{x}_{n\mu} \xi_\mu.$$

Die Bedingungen $\sum_{\nu=1}^n h_{\mu\nu} x_{\nu\rho} = \lambda_\rho x_{\rho\mu}$ können wir mit Hilfe der Variablen

ξ_1, \dots, ξ_n und einer neuen Variablenreihe η_1, \dots, η_n (nebst den auf Grund der obigen Formel dazugehörigen η_1, \dots, η_n) so schreiben:

$$\sum_{\rho, \mu=1}^n \left(\sum_{\nu=1}^n h_{\mu\nu} x_{\rho\nu} \right) \xi_{\rho} \bar{\eta}_{\mu} = \sum_{\rho, \mu=1}^n \lambda_{\rho} x_{\rho\mu} \xi_{\rho} \bar{\eta}_{\mu},$$

d. h.

$$(D.) \quad \sum_{\mu, \nu=1}^n h_{\mu\nu} \xi_{\mu} \bar{\eta}_{\nu} = \sum_{\rho=1}^n \lambda_{\rho} \left(\sum_{\mu=1}^n \bar{x}_{\rho\mu} \xi_{\mu} \right) \left(\sum_{\mu=1}^n \bar{x}_{\rho\mu} \eta_{\mu} \right).$$

Der cartesische Charakter unseres Koordinatensystems aber findet in

$$(O.) \quad \sum_{\mu=1}^n \xi_{\mu} \bar{\eta}_{\mu} = \sum_{\rho=1}^n \left(\sum_{\mu=1}^n \bar{x}_{\rho\mu} \xi_{\mu} \right) \left(\sum_{\mu=1}^n \bar{x}_{\rho\mu} \eta_{\mu} \right)$$

seinen Ausdruck.

Die Auffindung einer Matrix $\{x_{\mu\nu}\}$ mit den Eigenschaften **D.**, **O.** ist es also, die im \mathfrak{R}_n der Auflösung des Eigenwertproblems gleichkommt; und in dieser Form mißlang uns die Übertragung auf \mathfrak{R}_{∞} . Dieses Mißlingen ist aber aus folgendem Grunde nicht überraschend. Die Bedingungen **D.**, **O.** bestimmen nämlich die Unbekannten λ_{ρ} , $x_{\mu\nu}$ nicht vollkommen. Zwar sind, wie die Theorie dieser „Hauptachsentransformationen“ zeigt (vgl. a. a. O. Anm. ⁷¹), die λ_{ρ} bis auf die Reihenfolge eindeutig bestimmt, viel schlimmer steht es aber mit den $x_{\mu\nu}$. Offenbar kann jede Zeile $x_{\rho 1}, \dots, x_{\rho n}$ mit einem Faktor θ_{ρ} vom Absolutwerte 1 multipliziert werden — und wenn einige λ_{ρ} zusammenfallen, so ist sogar eine willkürliche unitäre Transformation der zugehörigen Zeilen $x_{\rho 1}, \dots, x_{\rho n}$ untereinander zulässig! Mit solchen, nicht eindeutig festgelegten Größen den schwierigen Grenzübergang $n \rightarrow \infty$ zu versuchen, ist aber aussichtslos: denn wie soll der Prozeß konvergieren, wenn die λ_{ρ} , $x_{\mu\nu}$ unterwegs große Schwankungen nach Belieben ausführen können, die durch ihre mangelhafte Bestimmtheit möglich werden!

Dies gibt uns aber den Fingerzeig, wie die Sache richtig anzufassen ist: wir müssen zunächst suchen, die Bedingungen **D.**, **O.** und die Unbekannten λ_{ρ} , $x_{\mu\nu}$ durch solche zu ersetzen, die die vermißte Eindeutigkeitseigenschaft besitzen — es wird sich zeigen, daß dann der Grenzübergang weniger Schwierigkeiten macht.

Wenn l irgendein Wert ist, den ein oder mehrere λ_{ρ} annehmen, so ist

$$\sum_{\rho=l}^n \left(\sum_{\mu=1}^n \bar{x}_{\rho\mu} \xi_{\mu} \right) \left(\sum_{\mu=1}^n \bar{x}_{\rho\mu} \eta_{\mu} \right)$$

gegenüber den oben aufgezählten (mit **D.**, **O.** verträglichen) Abänderungen der λ_{ρ} , $x_{\mu\nu}$ invariant. Ist l von allen λ_{ρ} verschieden, so ist es $= 0$, also erst recht invariant. Somit ist auch die Hermitesche Form (ξ bzw. η steht für ξ_1, \dots, ξ_n bzw. η_1, \dots, η_n)

$$E(l; \xi, \eta) = \sum_{\lambda_{\rho} \leq l} \left(\sum_{\mu=1}^n \bar{x}_{\rho\mu} \xi_{\mu} \right) \left(\sum_{\mu=1}^n \bar{x}_{\rho\mu} \eta_{\mu} \right),$$

invariant (l beliebig!). Wenn wir die $E(l; \xi, \eta)$ (d. h. ihre Koeffizienten) kennen, so ist es ein leichtes, hieraus auf die $\lambda_\rho, x_{\mu\nu}$ zurück zu schließen — wenn wir also das Eigenwertproblem (d. h. \mathbf{D}, \mathbf{O}) so formulieren, daß darin statt der $\lambda_\rho, x_{\mu\nu}$ nur die $E(l; \xi, \eta)$ vorkommen, so haben wir die gewünschte eindeutige Formulierung erreicht.

Sei also $E(l)$ die Matrix der Hermiteschen Form $E(l; \xi, \eta)$ ⁷², was besagen \mathbf{D}, \mathbf{O} für die Matrixschar $E(l)$?

\mathbf{O} bedeutet: wenn l hinreichend groß ist (nämlich größer als alle λ_ρ), so ist $E(l) = \mathbf{1}$ (die Einheitsmatrix). Aus der Natur von $E(l)$ folgt: wenn l hinreichend klein ist (nämlich kleiner als alle λ_ρ), so ist $E(l) = \mathbf{0}$, und wenn l von $-\infty$ bis $+\infty$ wächst, so ist $E(l)$ immer konstant, endlich viele Stellen ausgenommen (die voneinander verschiedenen unter den $\lambda_1, \dots, \lambda_n$, sie mögen $l_1 < l_2 < \dots < l_m$ heißen, $m \leq n$), an denen es sich sprunghaft ändert. Und zwar liegt die Unstetigkeit jeweils links von der Sprungstelle (denn die $\sum_{\lambda_\rho \leq l}$ ist als l -Funktion nach rechts stetig, bei $\sum_{\lambda_\rho < l}$ wäre es umgekehrt). Schließlich gilt, wie wir zeigen wollen, für $l' \leq l''$

$$E(l') E(l'') = E(l'') E(l') = E(l'),$$

(Matrizenprodukt!).

Es ist bequemer, dies für $E(l'; \xi, \eta), E(l''; \xi, \eta)$ im Koordinatensystem der x_1, \dots, x_n und η_1, \dots, η_n zu beweisen. Nach Einführung dieser Variablen wird nämlich aus $E(l'; \xi, \eta)$ und $E(l''; \xi, \eta)$

$$\sum_{\lambda_\rho \leq l'} x_\rho \bar{\eta}_\rho \quad \text{bzw.} \quad \sum_{\lambda_\rho \leq l''} x_\rho \bar{\eta}_\rho.$$

Die Matrizen sehen also so aus: außerhalb der Diagonale lauter 0-en, auf der Diagonale im ρ -ten Felde 1, wenn $\lambda_\rho \leq l'$ bzw. $\leq l''$ ist, sonst auch dort 0. Für diese Matrizen ist aber die obige Behauptung klar.

Nun formulieren wir noch \mathbf{D} um. Es besagt offenbar:

$$\sum_{\mu, \nu=1}^n h_{\mu\nu} \xi_\mu \bar{\eta}_\nu = \sum_{\tau=1}^m l_\tau \{E(l_\tau; \xi, \eta) - E(l_{\tau-1}; \xi, \eta)\},$$

(l_0 ist irgendeine Zahl $< l_1$). Da aber $E(l; \xi, \eta)$ auf einer jeden der Strecken

$$-\infty < l < l_1; l_1 \leq l < l_2; \dots; l_{m-1} \leq l < l_m; l_m \leq l < +\infty$$

konstant ist, gilt für jedes Zahlensystem

$$A_0 < A_1 < A_2 < \dots < A_k,$$

falls l_1, \dots, l_m unter den A_1, \dots, A_k vorkommen,

$$\sum_{\mu, \nu=1}^n h_{\mu\nu} \xi_\mu \bar{\eta}_\nu = \sum_{\tau=1}^k A_\tau \{E(A_\tau; \xi, \eta) - E(A_{\tau-1}; \xi, \eta)\}.$$

Unter Verwendung des Stieltjesschen Integralbegriffes⁷³ kann man dies auch so schreiben:

$$\sum_{\mu, \nu=1}^n h_{\mu\nu} \xi_{\mu} \bar{\eta}_{\nu} = \int_{-\infty}^{+\infty} \lambda dE(\lambda; \xi, \eta).$$

($\int_{-\infty}^{+\infty}$ kann offenbar durch jedes \int_a^b , $a < l_1$, $b > l_m$, ersetzt werden.)

Oder, indem wir die Koeffizienten betrachten, und die für alle Koeffizienten gültige Gleichung für die Matrizen selbst hinschreiben:

$$H = \int_{-\infty}^{+\infty} \lambda dE(\lambda),$$

wobei $H = \{h_{\mu\nu}\}$ ist.

Bisher ergab sich also die folgende Aufgabe: Gesucht wird zu einer gegebenen Hermiteschen Matrix $H = \{h_{\mu\nu}\}$ eine Schar Hermitescher Matrizen $E(\lambda)$ ($-\infty < \lambda < +\infty$), mit den folgenden Eigenschaften:

S₁. Für genügend $\left\{ \begin{array}{l} \text{kleine} \\ \text{große} \end{array} \right\} \lambda$ ist $E(\lambda) = \begin{Bmatrix} 0 \\ 1 \end{Bmatrix}$. $E(\lambda)$ ist (als Funktion von λ aufgefaßt) überall konstant, mit endlich vielen Ausnahmepunkten. In diesen ändert es sich sprunghaft, und zwar vollzieht sich der Sprung stets links von der genannten Stelle.

S₂. Es ist stets $E(\lambda') E(\lambda'') = E(\text{Min}(\lambda', \lambda''))$ ⁷⁴.

S₃. Es gilt (unter Verwendung des Stieltjesschen Integrals):

$$H = \int_{-\infty}^{+\infty} \lambda dE(\lambda).$$

Wir wollen uns jetzt nicht damit aufhalten, von **S₁**–**S₃** umgekehrt zu den Lösungen **D**., **O**. zurückzukehren (obwohl dies leicht wäre), denn es ist einzig diese Form des Eigenwertproblems, die wir in der Quantenmechanik brauchen werden. Vielmehr gehen wir sofort daran, **S₁**–**S₃** von endlich vielen auf unendlich viele Variable zu generalisieren, d. h. von \mathfrak{R}_n auf \mathfrak{R}_{∞} .

In \mathfrak{R}_{∞} werden wir unter H und den $E(\lambda)$ offenbar Hermitesche Operatoren zu verstehen haben — d. h. wir werden zu einem gegebenen H eine solche Schar $E(\lambda)$ zu bestimmen suchen, die zu ihm in einer gewissen, **S₁**–**S₃** nachgebildeten, Beziehung steht. Die \mathfrak{R}_{∞} -Analoge von **S₁**–**S₃** gilt es also zu finden!

S₂ übernehmen wir ungeändert, da hier die Dimensionszahl von \mathfrak{R}_n keine Rolle spielt. Wir wollen es aber, unter Benutzung unserer Resultate über Projektionsoperatoren (II. 4.) etwas umformulieren. Zunächst besagt es für $\lambda' = \lambda'' = \lambda$ $E(\lambda)^2 = E(\lambda)$, d. h. daß die $E(\lambda)$ Projektionsoperatoren sein müssen. Dann bedeutet aber **S₂** (wir können uns auf $\lambda' \leq \lambda''$ beschränken, für $\lambda' \geq \lambda''$ kommt Entsprechendes heraus): für $\lambda' \leq \lambda''$ ist $E(\lambda') \leq E(\lambda'')$ (vgl. Satz 14. und den darauf folgenden Text in II. 4.).

Bei S_3 ist einige Vorsicht am Platze, $A = \int_{-\infty}^{\infty} \lambda dE(\lambda)$ sinnlos, da das Stieltjessche Integral für Zahlen und nicht für Operatoren definiert ist. Es ist aber leicht, $H, E(\lambda)$ durch Zahlen zu ersetzen, die die erwünschte Operatorenbeziehung sinngemäß wiedergeben: wir verlangen

$$(Hf, g) = \int_{-\infty}^{+\infty} \lambda d(E(\lambda)f, g)$$

für alle f, g aus \mathfrak{R}_{∞} — soweit Hf Sinn hat; $H = \int_{-\infty}^{+\infty} \lambda dE(\lambda)$ ist nur symbolisch, als Abkürzung hierfür, zu verstehen.

S_1 . schließlich wird durch das Unendlichwerden der Dimensionszahl wesentlich beeinflusst. Die Stellen, von denen ab $E(\lambda)$ gleich 0 bzw. 1 wird, bzw. wo es seine un stetigen Sprünge ausführt, sind ja (in \mathfrak{R}_n) die Eigenwerte von H und die Konstanzintervalle die von diesen freien Strecken. Wenn nun $n \rightarrow \infty$, so kann allerlei passieren. Nämlich: der kleinste bzw. größte Eigenwert kann gegen $-\infty$ bzw. $+\infty$ streben, die übrigen aber können, da sie immer zahlreicher werden, immer dichter liegen, so daß die Konstanzintervalle eventuell auf Punkte zusammenschrumpfen. (Insbesondere ist das letztere dasjenige Symptom, das in der Hilbertschen Theorie u. U. das Auftreten des sog. Streckenspektrums ankündigt ⁷⁵.) Wir müssen daher S_1 beim Übergange von den \mathfrak{R}_n zu \mathfrak{R}_{∞} ganz wesentlich abändern: dem eventuellen Aufhören des diskreten, sprungartigen Charakters der Variabilität muß Rechnung getragen werden.

Es ist unter diesen Gesichtspunkten recht plausibel, von der Forderung des schließlichen Annehmens der Werte 0, 1 durch $E(\lambda)$ abzusehen, und dafür bloß Konvergenz gegen 0 bzw. 1 (bei $\lambda \rightarrow -\infty$ bzw. $\rightarrow +\infty$) zu verlangen; ebenso tritt an Stelle der streckenweisen Konstanz und punktweisen Sprünge die Zulässigkeit auch eines kontinuierlichen Anwachsens. Die weniger einschneidende Forderung dagegen, daß in evtl. Unstetigkeitsstellen Unstetigkeit bloß nach links vorliegen soll, können wir versuchsweise aufrechterhalten. Folglich formulieren wir S_1 , so: für $\lambda \rightarrow -\infty$ ist $E(\lambda) \rightarrow 0$, für $\lambda \rightarrow +\infty$ $E(\lambda) \rightarrow 1$, für $\lambda \rightarrow \lambda_0, \lambda \geq \lambda_0$ $E(\lambda) \rightarrow E(\lambda_0)$ ⁷⁶.

Zu S_3 ist noch etwas zu bemerken. Im endlich-vieldimensionalen \mathfrak{R}_n galt $A = \sum_{\tau=1}^m l_{\tau} F_{\tau}$, wenn wir unter F_{τ} die Matrix $E(l_{\tau}) - E(l_{\tau-1})$ verstehen. Wegen S_1 ist:

$$\begin{aligned} \text{für } \sigma \geq \tau \quad F_{\tau} E(l_{\sigma}) &= E(l_{\tau}) E(l_{\sigma}) - E(l_{\tau-1}) E(l_{\sigma}) \\ &= E(l_{\tau}) - E(l_{\tau-1}) = F_{\tau}, \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \text{für } \sigma \leq \tau - 1 \quad F_{\tau} E(l_{\sigma}) &= E(l_{\tau}) E(l_{\sigma}) - E(l_{\tau-1}) E(l_{\sigma}) \\ &= E(l_{\sigma}) - E(l_{\sigma}) = 0, \end{aligned}$$

also wegen $F_\sigma = E(l_\sigma) - E(l_{\sigma-1})$

$$F_\tau F_\sigma = \begin{cases} F_\tau & \text{für } \tau = \sigma, \\ 0 & \text{für } \tau \neq \sigma. \end{cases}$$

Daher gilt:

$$H^2 = \left(\sum_{\tau=1}^m l_\tau F_\tau \right)^2 = \sum_{\tau, \sigma=1}^m l_\tau l_\sigma F_\tau F_\sigma = \sum_{\tau=1}^m l_\tau^2 F_\tau.$$

(Ebenso ist $H^p = \sum_{\tau=1}^m l_\tau^p F_\tau$.) Infolgedessen ergibt dieselbe Umformung,

wie bei H selbst,

$$H^2 = \int_{-\infty}^{+\infty} \lambda^2 dE(\lambda).$$

In \mathfrak{R}_∞ werden wir daher die analog gebaute symbolische Gleichung vermuten, also numerisch

$$(H^2 f, g) = \int_{-\infty}^{+\infty} \lambda^2 d(E(\lambda) f, g).$$

(Dies wird sich im folgenden auch bestätigen.) Für $f = g$ folgt wegen

$$(H^2 f, f) = (Hf, Hf) = \|Hf\|^2, \quad (E(\lambda) f, f) = \|E(\lambda) f\|^2,$$

hieraus

$$\|Hf\|^2 = \int_{-\infty}^{+\infty} \lambda^2 d(\|E(\lambda) f\|^2).$$

Diese Formel läßt aber erwarten, daß die $E(\lambda)$ nicht nur festlegen, welchen Wert Hf hat, wenn es sinnvoll ist, sondern auch, wann es

sinnvoll ist. Denn das Integral $\int_{-\infty}^{+\infty} \lambda^2 d(\|E(\lambda) f\|^2)$ hat einen nie negativen

Integranden ($\lambda^2 \geq 0$) und einen nichtfallenden Ausdruck hinter dem d -Zeichen ($\|E(\lambda) f\|^2$, vgl. S_2 . und Satz 15. in II. 4.) — daher ist es seiner Natur nach konvergent, d. h. 0, oder positiv endlich, oder eigentlich divergent, d. h. $+\infty$ ⁷⁷. Und dies gilt unabhängig von der Beziehung zu H , d. h. ohne Rücksicht darauf, ob Hf Sinn hat oder nicht. Es ist darum zu erwarten, daß Hf dann und nur dann Sinn hat (d. h. in \mathfrak{R}_∞ existiert), wenn der präsumptive Wert von $\|Hf\|^2$, d. i. der für

alle f sinnvolle Ausdruck $\int_{-\infty}^{+\infty} \lambda^2 d\|E(\lambda) f\|^2$, endlich ist.

Daher lautet unsere Neuformulierung von S_1 .— S_3 . so:

Wir suchen zum gegebenen Hermiteschen Operator H eine Schar $E(\lambda)$ von Projektionsoperatoren ($-\infty < \lambda < +\infty$) mit den folgenden Eigenschaften:

S_1 . Für $\lambda \rightarrow -\infty$ bzw. $\rightarrow +\infty$ gilt, $E(\lambda) f \rightarrow 0$ bzw. $\rightarrow f$, für $\lambda \rightarrow \lambda_0$, $\lambda \geq \lambda_0$, $E(\lambda) f \rightarrow E(\lambda_0) f$ (für jedes f !).

S_2 . Aus $\lambda' \leq \lambda''$ folgt $E(\lambda') \leq E(\lambda'')$.

\overline{S}_3 . Das Integral

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \lambda^2 d(\|E(\lambda)f\|^2),$$

welches seiner Natur nach konvergent (0 oder positiv endlich) oder eigentlich divergent ist, bestimmt den Definitionsbereich von H : Hf hat dann und nur dann Sinn, wenn das erstere der Fall ist. Und zwar gilt dann für alle g

$$(Hf, g) = \int_{-\infty}^{+\infty} \lambda d(E(\lambda)f, g).$$

(Das letztere Integral ist absolut konvergent, wenn das erstere endlich ist ⁷⁸.) —

In die Eigenschaften $\overline{S}_1, \overline{S}_2$ geht H selbst gar nicht ein. Eine Projektionsoperatorenchar $E(\lambda)$ mit diesen zwei Eigenschaften nennen wir eine Zerlegung der Einheit. Eine Zerlegung der Einheit, die zu H in der Beziehung \overline{S}_3 steht, nennen wir zu H gehörig.

Das Eigenwertproblem des \mathfrak{R}_∞ lautet also so: existieren zu einem gegebenen Hermiteschen Operator H immer dazugehörige Zerlegungen der Einheit, und wie viele? (Erwünscht wäre die Antwort: es existiert immer genau eine.) Ferner müssen wir prüfen, wie sich unsere Definition des Eigenwertproblems zu den allgemein in der Quantenmechanik (besonders in der Wellentheorie) üblichen Methoden zur Bestimmung der Eigenwerte von Hermiteschen Operatoren verhält.

8. Orientierende Betrachtungen über das Eigenwertproblem.

Die erste Frage, die sich bei unserer Definition des Eigenwertproblems aufdrängt, ist diese: $\overline{S}_1, \overline{S}_3$ sind von dem Problem, von dem wir zu Beginn des letzten Paragraphen ausgingen, völlig verschieden lautend, es ist gar nicht mehr zu erkennen, was sie noch miteinander zu tun haben. Im \mathfrak{R}_n hatten wir zwar eine Herleitung der $\overline{S}_1, \overline{S}_3$ aus jenen Bedingungen gegeben, aber in \mathfrak{R}_∞ liegen die Verhältnisse wesentlich anders: die beiden Formulierungen sind ja hier nicht mehr gleichwertig (sie waren es, wie erwähnt, in \mathfrak{R}_n). Daher ist die ganze Frage erneut aufgerollt, und es ist zu ermitteln, inwieweit die neue Formulierung die alte umfaßt, d. h. wann und wie unsere $E(\lambda)$ die $\lambda_1, \lambda_2, \dots$ und $\varphi_1, \varphi_2, \dots$ von damals bestimmen.

Gehöre zum Hermiteschen Operator A die Zerlegung der Einheit $E(\lambda)$, wann ist die Gleichung

$$A\varphi = \lambda_0\varphi$$

lösbar? $A\varphi = \lambda_0\varphi$ bedeutet dasselbe wie $(A\varphi, g) - \lambda_0(\varphi, g) = 0$ für alle g , d. h.

$$\begin{aligned}
 0 &= \int_{-\infty}^{\infty} \lambda d(E(\lambda)f, g) - \lambda_0(\varphi, g) = \int_{-\infty}^{\infty} \lambda d(E(\lambda)f, g) - \lambda_0 \int_{-\infty}^{\infty} d(E(\lambda)f, g) \\
 &= \int_{-\infty}^{\infty} (\lambda - \lambda_0) d(E(\lambda)f, g).
 \end{aligned}$$

Wir setzen erstens $g = E(\lambda_0)f$, dann wird

$$\begin{aligned}
 0 &= \int_{-\infty}^{\infty} (\lambda - \lambda_0) d(E(\lambda)f, E(\lambda_0)f) = \int_{-\infty}^{\infty} (\lambda - \lambda_0) d(E(\lambda_0)E(\lambda)f, f) \\
 &= \int_{-\infty}^{\infty} (\lambda - \lambda_0) d(E(\text{Min}(\lambda, \lambda_0))f, f) = \int_{-\infty}^{\infty} (\lambda - \lambda_0) d(\|E(\text{Min}(\lambda, \lambda_0))f\|^2).
 \end{aligned}$$

Wir können nun $\int_{-\infty}^{\infty}$ in $\int_{-\infty}^{\lambda_0} + \int_{\lambda_0}^{\infty}$ zerlegen. Im $\int_{-\infty}^{\lambda_0}$ können wir $\text{Min}(\lambda, \lambda_0)$ durch λ ersetzen, im $\int_{\lambda_0}^{\infty}$ durch λ_0 . Im letzteren Integral steht also hinter dem d -Zeichen eine Konstante, daher verschwindet es.

Fürs erste bleibt dann übrig:

$$\int_{\lambda_0}^{\infty} (\lambda - \lambda_0) d(\|E(\lambda)f\|^2) = 0.$$

Zweitens setzen wir $g = f$, dann wird

$$0 = \int_{-\infty}^{\infty} (\lambda - \lambda_0) d(E(\lambda)f, f) = \int_{-\infty}^{\infty} (\lambda - \lambda_0) d(\|E(\lambda)f\|^2).$$

Durch Subtraktion der ersten Gleichung hiervon erhalten wir, wenn wir noch das Vorzeichen des Integranden umkehren,

$$\int_{-\infty}^{\lambda_0} (\lambda_0 - \lambda) d(\|E(\lambda)f\|^2) = 0.$$

Betrachten wir nun $\int_{-\infty}^{\lambda_0} (\lambda_0 - \lambda) d(\|E(\lambda)f\|^2)$, $\int_{\lambda_0}^{\infty} (\lambda - \lambda_0) d(\|E(\lambda)f\|^2)$ etwas näher. Der Integrand ist in beiden ≥ 0 , und hinter dem d -Zeichen steht eine monoton-nicht-fallende Funktion von λ . Daher haben wir für jedes $\varepsilon > 0$

$$\begin{aligned}
 \int_{-\infty}^{\lambda_0} (\lambda_0 - \lambda) d(\|E(\lambda)f\|^2) &\geq \int_{-\infty}^{\lambda_0 - \varepsilon} (\lambda_0 - \lambda) d(\|E(\lambda)f\|^2) \geq \int_{-\infty}^{\lambda_0 - \varepsilon} \varepsilon d(\|E(\lambda)f\|^2) \\
 &= \varepsilon \|E(\lambda_0 - \varepsilon)f\|^2,
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 \int_{\lambda_0}^{\infty} (\lambda - \lambda_0) d(\|E(\lambda)f\|^2) &\geq \int_{\lambda_0 + \varepsilon}^{\infty} (\lambda - \lambda_0) d(\|E(\lambda)f\|^2) \geq \int_{\lambda_0 + \varepsilon}^{\infty} \varepsilon d(\|E(\lambda)f\|^2) \\
 &= \varepsilon (\|f\|^2 - \|E(\lambda_0 + \varepsilon)f\|^2) = \varepsilon \|f - E(\lambda_0 + \varepsilon)f\|^2.
 \end{aligned}$$

Die rechten Seiten sind somit ≤ 0 , da sie aber identisch ≥ 0 sind, müssen sie verschwinden. Also:

$$E(\lambda_0 - \varepsilon)f = 0, \quad E(\lambda_0 + \varepsilon)f = f.$$

Wegen der Rechtsstetigkeit von $E(\lambda)$ dürfen wir in der zweiten Gleichung rechts $\varepsilon \rightarrow 0$ ausführen: $E(\lambda_0)f = f$. Für $\lambda \geq \lambda_0$ ist dann wegen der zweiten Gleichung ($\varepsilon = \lambda - \lambda_0 \geq 0$) $E(\lambda)f = f$, für $\lambda < \lambda_0$ wegen der ersten Gleichung ($\varepsilon = \lambda_0 - \lambda > 0$) $E(\lambda)f = 0$. Also:

$$E(\lambda)f = \begin{cases} f & \text{für } \lambda \geq \lambda_0, \\ 0 & \text{für } \lambda < \lambda_0. \end{cases}$$

Diese notwendige Bedingung ist aber auch hinreichend, denn aus ihr folgt:

$$(Af, g) = \int_{-\infty}^{\infty} \lambda d(E(\lambda)f, g) = \lambda_0(f, g)$$

(man vergegenwärtige sich die, in Anm. ⁷³ gegebene, Definition des Stieltjesschen Integrals), also $(Af - \lambda_0 f, g) = 0$ für alle g — d. h. $Af = \lambda_0 f$.

Wie ist nun diese Bedingung zu deuten? Zunächst involviert sie eine Unstetigkeit von $E(\lambda)$ an der Stelle $\lambda = \lambda_0$. Nach Satz 17. in II. 4. muß $E(\lambda)$ sowohl für $\lambda \rightarrow \lambda_0, \lambda < \lambda_0$ als auch für $\lambda \rightarrow \lambda_0, \lambda > \lambda_0$ gegen einen Projektionsoperator $E^{(1)}(\lambda_0)$ bzw. $E^{(2)}(\lambda_0)$ streben ⁷⁹. Nach S_1 . ist $E^{(2)}(\lambda_0) = E(\lambda_0)$, aber im Falle der Unstetigkeit $E^{(1)}(\lambda_0) \neq E(\lambda_0)$. Weiter ist wegen $E(\lambda) \leq E(\lambda_0)$ für $\lambda < \lambda_0$ (S_2 .) immer $E^{(1)}(\lambda_0) \leq E(\lambda_0)$. Also ist $E(\lambda_0) - E^{(1)}(\lambda_0)$ ein Projektionsoperator, und für die Unstetigkeit ist charakteristisch, daß er $\neq 0$ ist.

$E(\lambda)f = 0$ für alle $\lambda < \lambda_0$ hat $E^{(1)}(\lambda_0)f = 0$ zur Folge, ist aber (wegen $E(\lambda) \leq E^{(1)}(\lambda_0)$) auch Konsequenz hiervon. $E(\lambda)f = f$ für alle $\lambda \geq \lambda_0$ folgt aus $E(\lambda_0)f = f$: es ist $E(\lambda_0) \leq E(\lambda)$, $E(\lambda)E(\lambda_0) = E(\lambda_0)$, also $E(\lambda)f = E(\lambda)E(\lambda_0)f = E(\lambda_0)f = f$. Daher ist für $Af = \lambda_0 f$ $E^{(1)}(\lambda_0)f = 0, E(\lambda_0)f = f$ charakteristisch, oder (Satz 14. in II. 4.) $(E(\lambda_0) - E^{(1)}(\lambda_0))f = f$. D. h., wenn $E(\lambda_0) - E^{(1)}(\lambda_0) = P_{\mathfrak{M}_{\lambda_0}}$ gesetzt wird, so besagt das Obige; f gehört zu \mathfrak{M}_{λ_0} .

Damit ist gezeigt: $Af = \lambda f$ ist durch ein $f \neq 0$ überhaupt nur an Unstetigkeitsstellen von $E(\lambda)$ lösbar, und zwar bilden die Lösungen f die soeben definierte abgeschlossene Linearmannigfaltigkeit \mathfrak{M}_{λ_0} .

Das in II. 6. gesuchte vollständige normierte Orthogonalsystem aus Lösungen (evtl. verschiedener λ) existiert also dann und nur dann, wenn die \mathfrak{M}_{λ_0} ($-\infty < \lambda_0 < \infty$) zusammen die abgeschlossene Linearmannigfaltigkeit \mathfrak{R}_{∞} aufspannen. [Wie die Konstruktion dieses Systems dann zu erfolgen hat, haben wir in II. 6. diskutiert. Die Orthogonalität der \mathfrak{M}_{λ_0} zueinander können wir erneut einsehen: aus $\lambda_0 < \mu_0$ folgt,

$$P_{\mathfrak{M}_{\lambda_0}} P_{\mathfrak{M}_{\mu_0}} = (E(\lambda_0) - E^{(1)}(\lambda_0))(E(\mu_0) - E^{(1)}(\mu_0)) = 0$$

wegen

$$E(\lambda_0) - E^{(1)}(\lambda_0) \leq E(\lambda_0) \leq E^{(1)}(\mu_0), \quad E(\mu_0) - E^{(1)}(\mu_0) \leq 1 - E^{(1)}(\mu_0).]$$

Ohne die genauen Bedingungen dieses Verhaltens zu ermitteln, stellen wir allenfalls folgendes fest: wenn ein Intervall μ_1, μ_2 existiert, in dem $E(\lambda)$ stetig zunimmt [d. h. $\mu_1 < \mu_2$, $E(\lambda)$ stetig in $\mu_1 \leq \lambda \leq \mu_2$, $E(\mu_1) \neq E(\mu_2)$], so ist es gewiß nicht der Fall. Denn für $\lambda \leq \mu_1$ ist $E(\lambda) - E^{(1)}(\lambda) \leq E(\lambda) \leq E(\mu_1)$, für $\mu_1 < \lambda \leq \mu_2$ wegen der Stetigkeit $E(\lambda) - E^{(1)}(\lambda) = 0$, für $\mu_2 < \lambda$ $E(\lambda) - E^{(1)}(\lambda) \leq 1 - E^{(1)}(\lambda) \leq 1 - E(\mu_2)$ — also $E(\lambda) - E^{(1)}(\lambda)$ immer orthogonal zu $E(\mu_2) - E(\mu_1)$. Sei $E(\mu_2) - E(\mu_1) = P_{\mathfrak{R}}$, dann sind alle \mathfrak{M}_λ zu \mathfrak{R} orthogonal. Ließe sich aus ihnen ein vollständiges normiertes Orthogonalsystem auswählen, so enthielte \mathfrak{R} nur die 0, d. h. es wäre $E(\mu_2) - E(\mu_1) = 0$, entgegen der Annahme.

Die Unstetigkeitsstellen von $E(\lambda)$ nennen wir das Punktspektrum von A — es sind diejenigen λ , für die $Af = \lambda f$, $f \neq 0$, lösbar ist. Wählen wir aus jedem $\mathfrak{M}_\lambda \neq 0$ ein f mit $\|f\| = 1$ aus, so entsteht wegen der Orthogonalität der \mathfrak{M}_λ ein normiertes Orthogonalsystem. Nach Satz 3. in II. 2. dieses endlich oder eine Folge, also bilden die λ des Punktspektrums auch höchstens eine Folge.

Alle Stellen, in deren Umgebung $E(\lambda)$ nicht konstant ist, bilden das Spektrum von A . Wir sahen: falls es Intervalle gibt, in die das Spektrum, aber nicht das Punktspektrum von A eindringt — d. h. Stetigkeitsintervalle von $E(\lambda)$, in denen es nicht konstant ist — so ist das Eigenwertproblem gewiß nicht in demjenigen Sinne lösbar, in dem es am Anfang von II. 6. formuliert wurde. Die genauen Bedingungen dieser Unlösbarkeit untersuchen wir nicht weiter: sie kommt nämlich u. U. auch dann vor, wenn das Punktspektrum in alle Intervalle eindringt, in denen Punkte des Spektrums liegen; das Abtrennen des Punktspektrums vom Rest ist dann bedeutend mühsamer, und gehört nicht mehr eng genug zu unserem Gegenstande. (Der Leser findet diese Untersuchungen in HILBERTS angeführten Abhandlungen.)

Dagegen wollen wir zeigen, wie im Falle der Existenz eines vollständigen normierten Orthogonalsystems $\varphi_1, \varphi_2, \dots$ von Lösungen von $A\varphi = \lambda\varphi$ (mit $\lambda = \lambda_1, \lambda_2, \dots$ für bzw. $\varphi = \varphi_1, \varphi_2, \dots$) — im Falle des reinen Punktspektrums, wie wir sagen wollen — die $E(\lambda)$ zu konstruieren sind. Es ist

$$E(\lambda) = \sum_{\lambda_e \leq \lambda} P_{[\varphi_e]} \quad 80.$$

(Die Summe \sum kann 0 Addenden haben, dann ist $E(\lambda) = 0$; oder eine positivendliche Anzahl, dann ist ihre Bedeutung klar; oder unendlich viele, dann konvergiert sie nach den Schlußausführungen von II. 4.)

In der Tat: \overline{S}_2 ist evident, denn für $\lambda' \leq \lambda''$ ist

$$E(\lambda'') - E(\lambda') = \sum_{\lambda' < \lambda_e \leq \lambda''} P_{[\varphi_e]}$$

Projektionsoperator, also $E(\lambda') \leq E(\lambda'')$ (Satz 14.). \bar{S}_1 . beweist man so:
Es ist für jedes f

$$\sum_e \|P_{[\varphi_e]} f\|^2 = \sum_e |(f_1 \varphi_e)|^2 = \text{Anm. }^{81} = \|f\|^2$$

(Satz 7.), d. h. $\sum_e \|P_{[\varphi_e]} f\|^2$ konvergent. Daher können wir für jedes $\varepsilon > 0$ eine endliche Anzahl von $p \cdot s$ angeben, so daß die über diese allein erstreckte \sum_e schon $> \|f\|^2 - \varepsilon$ ist, und daher jede \sum'_e , aus der sie fehlen, $< \varepsilon$. Dann ist auch

$$\| \sum'_p P_{[\varphi_e]} f \|^2 = \sum'_p \|P_{[\varphi_e]} f\|^2 < \varepsilon.$$

Hieraus folgt insbesondere

$$\| \sum_{\lambda_e \leq \lambda} P_{[\varphi_e]} f \|^2 < \varepsilon, \quad \| \sum_{\lambda_e > \lambda} P_{[\varphi_e]} f \|^2 < \varepsilon, \quad \| \sum_{\lambda_0 < \lambda_e \leq \lambda} P_{[\varphi_e]} f \|^2 < \varepsilon,$$

wenn λ klein genug, bzw. groß genug, bzw. nahe genug bei λ_0 (und $\geq \lambda$) gewählt wird. Also ist in der Tat

$$E(\lambda) f = \sum_{\lambda_e \leq \lambda} P_{[\varphi_e]} f \rightarrow 0 \quad \text{für } \lambda \rightarrow -\infty,$$

$$f - E(\lambda) f = \sum_{\lambda_e > \lambda} P_{[\varphi_e]} f \rightarrow 0 \quad \text{für } \lambda \rightarrow +\infty,$$

$$E(\lambda) f - E(\lambda_0) f = \sum_{\lambda_0 < \lambda_e \leq \lambda} P_{[\varphi_e]} f \rightarrow 0 \quad \text{für } \lambda \rightarrow \lambda_0, \lambda \geq \lambda_0.$$

d. h. \bar{S}_1 . ist erfüllt.

Um uns von der Gültigkeit von \bar{S}_3 . zu überzeugen, setzen wir $f = x_1 \varphi_1 + x_2 \varphi_2 + \dots$, also $Af = \lambda_1 x_1 \varphi_1 + \lambda_2 x_2 \varphi_2 + \dots$. Damit Af sinnvoll sei, muß also $\sum_{e=1}^{\infty} \lambda_e^2 |x_e|^2$ endlich sein. Es ist aber

$$\int_{-\infty}^{\infty} \lambda^2 d \|E(\lambda) f\|^2 = \int_{-\infty}^{\infty} \lambda^2 d \left(\sum_{\lambda_e \leq \lambda} |x_e|^2 \right) = \text{Anm. }^{83} = \sum_{e=1}^{\infty} \lambda_e^2 |x_e|^2,$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} \lambda^2 d (E(\lambda) f, g) = \int_{-\infty}^{\infty} \lambda^2 d \left(\sum_{\lambda_e \leq \lambda} x_e \bar{y}_e \right) = \text{Anm. }^{83} = \sum_{e=1}^{\infty} \lambda_e x_e \bar{y}_e = (Af, g).$$

Somit ist auch \bar{S}_3 . befriedigt.

Betrachten wir noch zwei Fälle eines reinen Streckenspektrums, d. h. solche, wo gar kein Punktspektrum existiert. Sei \mathfrak{R}_{∞} der Raum aller Funktionen $f(q_1 \dots q_l)$ mit endlichem

$$\int_{-\infty}^{\infty} \dots \int_{-\infty}^{\infty} |f(q_1 \dots q_l)|^2 dq_1 \dots dq_l,$$

und A der Operator $q_j \dots$, der Hermitesche Charakter ist evident.

Man sieht: $Af = \lambda f$ bedeutet $(q_j - \lambda) f(q_1, \dots, q_l) = 0$, d. h. $f(q_1 \dots q_l) = 0$ überall, mit eventueller Ausnahme der $l-1$ -dimensionalen Ebene $q_j = \lambda$. Jedoch ist diese Ebene (nach dem in II. 3. zur Bedin-

gung **B.** Gesagten) unwesentlich, weil ihr Lebesguesches Maß (d. h. Volumen) gleich 0 ist: es ist also $f \equiv 0$ ⁸⁴. Somit existiert nie eine Lösung von $Af = \lambda f$, die $\neq 0$ ist. Man sieht aber auch (unexakt!), wo die Lösung zu vermuten ist. $(q_j - \lambda) f(q_1, \dots, q_l) = 0$ besagt, daß nur für $q_j = \lambda$ $f \neq 0$ werden darf. Ein Linearaggregat der Lösungen für mehrere λ , etwa $\lambda = \lambda', \lambda'', \dots, \lambda^{(s)}$ wäre somit ein f , welches nur für

$$q_j = \lambda', \lambda'', \dots, \lambda^{(s)} \neq 0$$

wird. Als Linearaggregat aller Lösungen mit $\lambda \leq \lambda_0$ können wir daher ein f ansehen, das nur für $\lambda \leq \lambda_0 \neq 0$ wird. Aber im Falle des reinen Punktspektrums hatten wir

$$E(\lambda_0) = \sum_{\lambda_e \leq \lambda_0} P_{[\varphi_e]} = P_{\mathfrak{N}_{\lambda_0}}, \quad \mathfrak{N}_{\lambda_0} = [\varphi_e (\lambda_e \leq \lambda_0)],$$

d. h. \mathfrak{N}_{λ} bestand aus den Linearaggregaten aller φ_e mit $\lambda_e \leq \lambda_0$, d. h. aller Lösungen von $Af = \lambda f$ mit $\lambda \leq \lambda_0$. Somit ist — natürlich unexakt und heuristisch! — zu erwarten, daß jetzt $E(\lambda_0) = P_{\mathfrak{N}_{\lambda_0}}$ sein wird, wo \mathfrak{N}_{λ_0} aus denjenigen f besteht, die nur für $q_j \leq \lambda_0 \neq 0$ werden. $\mathfrak{N}_{\infty} - \mathfrak{N}_{\lambda_0}$ besteht dann offenbar aus denjenigen f , die für $q_j \leq \lambda_0$ stets = 0 sind — folglich ist

$$E(\lambda_0) f(q_1 \dots q_l) = \begin{cases} f(q_1 \dots q_l), & \text{für } q_j \leq \lambda_0 \\ 0 & \text{für } q_j > \lambda_0 \end{cases}$$

Wir haben so, auf völlig unexaktem Wege, eine Schar von Projektionsoperatoren $E(\lambda)$ gefunden, von denen zu vermuten ist, daß sie $\overline{S_1} - \overline{S_3}$ für unser A erfüllen. In der Tat sind $\overline{S_1}$, $\overline{S_2}$ trivialerweise erfüllt, und zwar in $\overline{S_1}$ der $\lambda \rightarrow \lambda_0$ -Fall auch ohne den Zusatz $\lambda \geq \lambda_0$ — d. h. $E(\lambda)$ ist in λ überall stetig. Um zu sehen, daß auch $\overline{S_3}$ erfüllt ist, genügt es, das Bestehen der Gleichungen

$$\begin{aligned} & \int_{-\infty}^{\infty} \lambda^2 d \|E(\lambda) f\|^2 = \int_{-\infty}^{\infty} \lambda^2 d \left(\int_{-\infty}^{\lambda} \dots \int_{-\infty}^{\lambda} |f(q_1 \dots q_j \dots q_l)|^2 dq_1 \dots dq_j \dots dq_l \right) \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} \lambda^2 \left(\int_{-\infty}^{\lambda} \dots \int_{-\infty}^{\lambda} |f(q_1 \dots q_{j-1} \lambda q_{j+1} \dots q_l)|^2 dq_1 \dots dq_{j-1} dq_{j+1} \dots dq_l \right) d\lambda \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} \dots \int_{-\infty}^{\infty} q_j^2 |f(q_1 \dots q_{j-1} q_j q_{j+1} \dots q_l)|^2 dq_1 \dots dq_{j-1} dq_j dq_{j+1} \dots dq_l = \|Af\|^2, \\ & \int_{-\infty}^{\infty} \lambda d(E(\lambda) f, g) \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} \lambda d \left(\int_{-\infty}^{\lambda} \dots \int_{-\infty}^{\lambda} f(q_1 \dots q_j \dots q_l) \overline{g(q_1 \dots q_j \dots q_l)} dq_1 \dots dq_j \dots dq_l \right) \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} \lambda \left(\int_{-\infty}^{\lambda} \dots \int_{-\infty}^{\lambda} f(q_1 \dots q_{j-1} \lambda q_{j+1} \dots q_l) \overline{g(q_1 \dots q_{j-1} \lambda q_{j+1} \dots q_l)} dq_1 \dots dq_{j-1} dq_{j+1} \dots dq_l \right) d\lambda \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} \dots \int_{-\infty}^{\infty} q_j f(q_1 \dots q_{j-1} q_j q_{j+1} \dots q_l) \overline{g(q_1 \dots q_{j-1} q_j q_{j+1} \dots q_l)} \\ & \quad \times dq_1 \dots dq_{j-1} dq_j dq_{j+1} \dots dq_l = (Af, g) \end{aligned}$$

festzustellen. Man erkennt erneut, daß das Punktspektrum, bzw. die alte Definition des Eigenwertproblems versagen muß, da $E(\lambda)$ überall stetig anwächst.

Dieses Beispiel weist auch im allgemeinen Falle den Weg, wie die $E(\lambda)$ im Streckenspektrum zu finden sind: man bestimme (unkorrekt!) die Lösungen von $Af = \lambda f$ (da λ im Streckenspektrum liegt, gehören diese f gar nicht zum \mathfrak{R}_∞ !), und bilde ihre Linearaggregate für alle $\lambda \leq \lambda_0$. Diese gehören teilweise wieder zu \mathfrak{R}_∞ , und bilden eventuell eine abgeschlossene Linearmannigfaltigkeit \mathfrak{R}_{λ_0} . Dann setze man $E(\lambda_0) = P_{\mathfrak{R}_{\lambda_0}}$ — wenn man es richtig angefaßt hat, so gelingt es nachher $\overline{S_1} - \overline{S_3}$ zu verifizieren [für A und diese $E(\lambda)$], und so die heuristische Schlußweise *nachträglich* zu einer exakten zu machen⁸⁵.

Das zweite Beispiel, das wir betrachten wollen, ist der andere wichtige Operator der Wellenmechanik, $\frac{h}{2\pi i} \frac{\partial}{\partial q}$. Um unwesentliche Komplikationen zu vermeiden, sei $l = j = 1$ (sonst geht es ebenso). Wir haben also den Operator

$$A'f(q) = \frac{h}{2\pi i} \frac{\partial}{\partial q} f(q)$$

zu untersuchen. Wenn der Variabilitätsbereich von q $-\infty < q < +\infty$ ist, so ist dies ein Hermitescher Operator, wie wir in II. 5. sahen. Für einen endlichen Variabilitätsbereich $a \leq q \leq b$ ist dies dagegen nicht der Fall:

$$\begin{aligned} (A'f, g) - (f, A'g) &= \int_a^b \frac{h}{2\pi i} f'(q) \overline{g(q)} dq - \int_a^b f(q) \overline{\frac{h}{2\pi i} g'(q)} dq \\ &= \frac{h}{2\pi i} \int_a^b \{f'(q) \overline{g(q)} + f(q) \overline{g'(q)}\} dq = \frac{h}{2\pi i} [f(q) \overline{g(q)}]_a^b \\ &= \frac{h}{2\pi i} [f(b) \overline{g(b)} - f(a) \overline{g(a)}]. \end{aligned}$$

Damit dies verschwinde, muß der Definitionsbereich von $\frac{h}{2\pi i} \frac{\partial}{\partial q}$ derart eingengt werden, daß für zwei willkürlich aus ihm herausgegriffene f, g $f(a) \overline{g(a)} = f(b) \overline{g(b)}$ sei. D. h. $f(a) : f(b) = \overline{g(b)} : \overline{g(a)}$. Variieren wir f bei festem g , so sehen wir: $f(a) : f(b)$ muß im ganzen Definitionsbereich dieselbe Zahl θ sein (θ ist eventuell auch 0 oder ∞); und Einsetzen für f, g ergibt dann $\theta = \frac{1}{\theta}$, d. h. $|\theta| = 1$. D. h. wir müssen, damit $\frac{h}{2\pi i} \frac{\partial}{\partial q}$ Hermitesch sei, noch eine „Randbedingung“ von der Form

$$f(a) : f(b) = \theta$$

(θ irgendeine feste Zahl vom Absolutwert 1) postulieren.

Zuerst nehmen wir das Intervall $-\infty < q < +\infty$. Die Lösungen

von $A\varphi = \lambda\varphi$, d. h. $\frac{h}{2\pi i} \varphi'(q) = \lambda\varphi(q)$, sind die Funktionen

$$\varphi(q) = c e^{\frac{2\pi i}{h} \lambda q},$$

jedoch sind diese für unseren Zweck nicht ohne weiteres zu verwenden, da $\int_{-\infty}^{\infty} |\varphi(q)|^2 dq = \int_{-\infty}^{\infty} |c|^2 dq = +\infty$ ist (wenn nicht $c = 0$, $\varphi \equiv 0$ gilt). Man beachte: beim ersten Beispiel fanden wir die Lösung $\delta(q - \lambda)$, d. h. eine fiktive — nicht existierende Funktion (vgl. Anm. ⁸⁴); jetzt finden wir $e^{\frac{2\pi i}{h} \lambda q}$, also eine ganz ordentliche Funktion, die aber wegen der Unendlichkeit ihres Absolutwertquadrat-Integrals nicht zu \mathfrak{R}_{∞} gehört. Auf unserem Standpunkte besagt beides dasselbe: denn was nicht zu \mathfrak{R}_{∞} gehört, ist für uns nicht vorhanden ⁸⁶.

Wie im ersten Falle wollen wir nun die Linearaggregate der zu den $\lambda \leq \lambda_0$ gehörigen Lösungen bilden, d. h. die Funktionen

$$f(q) = \int_{-\infty}^{\lambda_0} c(\lambda) e^{\frac{2\pi i}{h} \lambda q} d\lambda$$

— es ist zu hoffen, daß unter diesen Funktionen aus \mathfrak{R}_{∞} vorkommen werden, ferner daß diese eine abgeschlossene Linearmannigfaltigkeit $\mathfrak{R}'_{\lambda_0}$ bilden, und schließlich, daß die Projektionsoperatoren $E(\lambda_0) = P_{\mathfrak{R}'_{\lambda_0}}$ die zu A' gehörige Zerlegung der Einheit bilden. Ein Beispiel für die erste Vermutung erhält man z. B., indem man

$$c(\lambda) = \begin{cases} 1, & \text{für } \lambda \geq \lambda_1 \\ 0, & \text{für } \lambda < \lambda_1 \end{cases} \Big| \lambda_1 < \lambda_0$$

setzt:

$$f(q) = \int_{\lambda_1}^{\lambda_0} e^{\frac{2\pi i}{h} \lambda q} d\lambda = \frac{e^{\frac{2\pi i}{h} \lambda_0 q} - e^{\frac{2\pi i}{h} \lambda_1 q}}{\frac{2\pi i}{h} q},$$

denn dieses $f(q)$ ist überall im Endlichen regulär und nimmt für $q \rightarrow \pm\infty$ wie $\frac{1}{q}$ ab, so daß $\int_{-\infty}^{\infty} |f(q)|^2 dq$ endlich ist. Aber auch die übrigen Vermutungen treffen zu, und zwar folgt dies aus der Theorie der Fourier-Integrale. Diese sagt nämlich folgendes aus ⁸⁷:

Sei $f(x)$ irgendeine Funktion mit endlichem $\int_{-\infty}^{\infty} |f(x)|^2 dx$, dann kann eine Funktion

$$L f(x) = F(y) \equiv \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{ixy} f(x) dx$$

gebildet werden, und für diese ist $\int_{-\infty}^{\infty} |F(y)|^2 dy$ wieder endlich, und zwar $= \int_{-\infty}^{\infty} |f(x)|^2 dx$. Außerdem ist $LL f(x) = f(-x)$. (Dies ist die

sog. Laplacesche Transformation, die in der Theorie der Differentialgleichungen auch sonst eine große Rolle spielt.)

Ersetzen wir x, y durch $\sqrt{\frac{2\pi}{h}}q, \sqrt{\frac{2\pi}{h}}p$, so erhalten wir die Transformation

$$Mf(q) = F(p) \equiv \frac{1}{\sqrt{h}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{\frac{2\pi i}{h}pq} f(q) dq,$$

die dieselben Eigenschaften hat. Somit bildet sie \mathfrak{R}_{∞} auf sich selbst ab [$Mf(q) = g(p)$ ist für jedes $g(p)$ aus \mathfrak{R}_{∞} lösbar: $f(q) = Mg(-p)$], läßt $\|f\|$ invariant, und ist linear: nach II. 5. ist dieses M unitär. Dabei ist $M^2 f(q) = f(-q)$, also $M^{-1}f(q) = M^* f(q) = Mf(-q)$, und M mit M^2 , d. h. $f(q) \rightarrow f(-q)$, vertauschbar.

Das, was wir für $\mathfrak{R}'_{\lambda_0}$ in Aussicht nahmen, war also: $f(q)$ gehört zu $\mathfrak{R}'_{\lambda_0}$, wenn $F(p) = M^{-1}f(q)$ für alle $p > \lambda_0$ gleich 0 ist. (Es ist

$$F(p) = \sqrt{h} c(p),$$

mit dem $c(\lambda)$ von vorhin.) Diese $F(p)$ bilden aber, wie wir wissen, die abgeschlossene Linearmannigfaltigkeit \mathfrak{R}_{λ_0} , also ist auch deren durch M vermitteltes Bild, $\mathfrak{R}'_{\lambda_0}$, eine solche. $E'(\lambda_0)$ entsteht aus $E(\lambda_0)$ ebenso wie $\mathfrak{R}'_{\lambda_0}$ aus \mathfrak{R}_{λ_0} : durch Transformation von ganz \mathfrak{R}_{∞} mit M — daher ist $E'(\lambda_0) = ME(\lambda_0)M^{-1}$. Daher hat $E'(\lambda)$, ebenso wie $E(\lambda)$, die Eigenschaften $\overline{S_1}, \overline{S_2},$ es gilt noch $\overline{S_3}$. zu beweisen — d. h. daß die Zerlegung der Einheit $E(\lambda)$ zu A' gehört.

Wir beschränken uns darauf zu zeigen: wenn $f(q)$ ohne besondere Konvergenzschwierigkeiten differenzierbar und $\int_{-\infty}^{\infty} \left| \frac{h}{2\pi i} f'(q) \right|^2 dq$ endlich ist, so ist $\int_{-\infty}^{\infty} \lambda^2 d\|E'(\lambda) f\|^2$ endlich, und $(A'f, g) = \int_{-\infty}^{\infty} \lambda d(E'(\lambda) f, g)^{88}$. In der Tat ist $(M^{-1}f(q) = F(p))$

$$\begin{aligned} A'f(q) &= \frac{h}{2\pi i} f'(q) = \frac{h}{2\pi i} \frac{\partial}{\partial q} (MF(p)) = \frac{h}{2\pi i} \frac{\partial}{\partial q} \left(\frac{1}{\sqrt{h}} \int F(p) e^{\frac{2\pi i}{h}pq} dp \right) \\ &= \frac{\sqrt{h}}{2\pi i} \int F(p) \frac{\partial}{\partial q} \left(e^{\frac{2\pi i}{h}pq} \right) dp = \frac{1}{\sqrt{h}} \int F(p) \cdot p \cdot e^{\frac{2\pi i}{h}pq} dp \\ &= M(pF(p)), \end{aligned}$$

also für die genannten f $A' = MAM^{-1}$ (A ist der Operator $q \dots$, bzw., da wir hier die Variable p verwenden, $p \dots$). Da die obigen Behauptungen für $A, E(\lambda)$ gelten, bleiben sie auch nach der Transformation von \mathfrak{R}_{∞} mit M gültig: sie bestehen also auch für $A' = MAM^{-1}$ und die $E'(\lambda) = ME(\lambda)M^{-1}$.

Wesentlich anders liegen die Verhältnisse bei $\frac{h}{2\pi i} \frac{\partial}{\partial q}$ im Intervalle $a \leq q \leq b$ ($a < b$, a, b endlich) — wobei, wie wir wissen, zur Wahrung des Hermiteschen Charakters auch eine „Randbedingung“

$$f(a) : f(b) = \theta \quad (|\theta| = 1)$$

notwendig ist. Wieder wird $\frac{h}{2\pi i} \frac{\partial}{\partial q} f(q) = \lambda f(q)$ durch

$$f(q) = c e^{\frac{2\pi i}{h} \lambda q}$$

gelöst, aber jetzt ist

$$\int_a^b |f(q)|^2 dq = \int_a^b |c|^2 dq = (b-a) |c|^2$$

endlich, so daß $f(q)$ stets zu \mathfrak{R}_∞ gehört. Dagegen ist noch die Randbedingung zu erfüllen:

$$f(a) : f(b) = e^{\frac{2\pi i}{h} \lambda (a-b)} = \theta,$$

oder, wenn wir $\theta = e^{-i\alpha}$ setzen ($0 \leq \alpha < 2\pi$),

$$\frac{2\pi i}{h} \lambda (a-b) = -i\alpha - 2k\pi i \quad k (= 0, \pm 1, \pm 2, \dots)$$

$$\lambda = \frac{h}{b-a} \left(\frac{\alpha}{2\pi} + k \right).$$

Es liegt also ein Punktspektrum vor, die normierten Lösungen sind durch $(b-a) |c|^2 = 1$, also z. B. $c = \frac{1}{\sqrt{b-a}}$ charakterisiert:

$$\varphi_k(q) = \frac{1}{\sqrt{b-a}} e^{\frac{2\pi i}{h} \lambda q} = \frac{1}{\sqrt{b-a}} e^{\frac{2\pi i}{b-a} \left(\frac{\alpha}{2\pi} + k \right) q}, \quad k = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$$

Dies ist also ein normiertes Orthogonalsystem, aber es ist auch voll-

ständig. Denn falls $f(q)$ zu allen $\varphi_k(q)$ orthogonal ist, so ist $e^{\frac{\alpha i}{b-a} q} f(q)$

zu allen $e^{\frac{2\pi i}{b-a} k q}$ orthogonal, also $e^{\frac{\alpha i}{2\pi} x} f\left(\frac{b-a}{2\pi} x\right)$ zu allen e^{ikx} , d. h. zu

1, $\cos x$, $\sin x$, $\cos 2x$, $\sin 2x$, ... Dabei ist es im Intervalle

$$a \leq \frac{b-a}{2\pi} x \leq b$$

definiert, dessen Länge 2π ist, so daß es nach bekannten Sätzen verschwinden muß⁸⁹. Also ist auch $f(q) \equiv 0$.

Somit liegt ein reines Punktspektrum vor, ein Fall, den wir am Anfang dieses Paragraphen allgemein erledigten. Man beachte, wie die „Randbedingung“ — d. h. θ bzw. α — die Eigenwerte und Eigenfunktionen beeinflusst.

Zum Schluß können wir auch noch den Fall betrachten, wo ein halibunendliches Intervall, etwa $0 \leq q < +\infty$, vorliegt. Wieder ist

in erster Linie der Hermitesche Charakter zu prüfen. Es ist

$$(A'f, g) - (f, A'g) = \frac{h}{2\pi i} \int_0^{+\infty} (f'(q) \overline{g(q)} + f(q) \overline{g'(q)}) dq = \frac{h}{2\pi i} [f(q) \overline{g(q)}]_0^{+\infty}.$$

Daß für $q \rightarrow +\infty$ $f(q) \overline{g(q)}$ gegen 0 strebt, zeigt man so, wie es in II. 5. im Falle des Intervalles $-\infty, +\infty$ gezeigt wurde. Also muß $f(0) \overline{g(0)} = 0$ sein. Indem man $f = g$ setzt, erkennt man, daß die „Randbedingung“ $f(0) = 0$ zu lauten hat.

In diesem Falle entstehen ernsthafte Schwierigkeiten. Die Lösungen von $A'\varphi = \lambda\varphi$ sind dieselben wie beim Intervall $-\infty < q < +\infty$, nämlich die $c e^{\frac{2\pi i}{h} \lambda q}$ — sie gehören nicht zu \mathfrak{R}_∞ und verletzen die Randbedingung. Letzteres ist verdächtig. Noch sonderbarer ist aber, daß wir nach dem früher skizzierten Verfahren zu demselben $E(\lambda)$ gelangen müßten wie beim Intervalle $-\infty < q < +\infty$, da die (uneigentlichen, d. h. nicht zu \mathfrak{R}_∞ gehörigen) Lösungen dieselben sind: Wie ist dies damit zu vereinen, daß der Operator ein anderer ist? Auch sind sie nicht das, was wir brauchen: denn wenn wir im Hilbertschen Raume der $F_\Omega, f(q)$ ($0 \leq q < +\infty$, $\int_0^{+\infty} |f(q)|^2 dq$ endlich) wieder M, M^{-1} definieren:

$$Mf(q) = F(\phi) = \frac{1}{\sqrt{h}} \int_0^{+\infty} e^{\frac{2\pi i}{h} \phi q} f(q) dq,$$

$$M^{-1}F(\phi) = f(q) = \frac{1}{\sqrt{h}} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\frac{2\pi i}{h} \phi q} F(\phi) d\phi \quad (= MF(-\phi)),$$

so bildet M den Hilbertschen Raum F_Ω , aller $f(q)$,

$$0 \leq q < \infty, \int_0^{+\infty} |f(q)|^2 dq,$$

auf einen anderen Hilbertschen Raum ab: denjenigen $F_{\Omega'}$, aller $F(\phi)$,

$$-\infty < \phi < \infty, \int_{-\infty}^{+\infty} |F(\phi)|^2 d\phi.$$

Während naturgemäß immer noch $\|Mf(q)\| = \|f(q)\|$ gilt (dies folgt aus den früher erwähnten Sätzen, wenn wir $f(q)$ für $-\infty < q < 0$ gleich 0 setzen), ist $\|M^{-1}F(\phi)\| = \|F(\phi)\|$ keineswegs allgemein der Fall — denn auf Grund der früher erwähnten Sätze ist, wenn wir $f(q)$

auch für $q < 0$ durch $f(q) = \frac{1}{\sqrt{h}} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\frac{2\pi i}{h} \phi q} F(\phi) d\phi$ definieren,

$$\|F\|^2 = \int_{-\infty}^{+\infty} |F(\phi)|^2 d\phi = \int_{-\infty}^{+\infty} |f(q)|^2 dq,$$

$$\|M^{-1}F\|^2 = \|f\|^2 = \int_0^{+\infty} |f(q)|^2 dq$$

— also $\|M^{-1}F\| < \|F\|$, es sei denn, daß zufällig für alle $q < 0$ $f(q)$ (so wie es soeben definiert werden mußte) verschwindet. Daher ist $E'(\lambda) = ME(\lambda)M^{-1}$ gar keine Zerlegung der Einheit⁹⁰ — die Methode hat versagt.

Wir werden bald (in Anm. ¹⁰⁵) sehen, daß dies im Wesen der Sache liegt, weil zu diesem Operator überhaupt keine Zerlegung der Einheit gehört.

Ehe wir diese orientierenden Ausführungen abschließen, wollen wir noch einige formale Rechenregeln für Operatoren angeben, die vermittle ihrer Zerlegung der Einheit auf die symbolische Form

$$A = \int_{-\infty}^{\infty} \lambda dE(\lambda)$$

gebracht sind.

Zunächst sei F ein mit allen $E(\lambda)$ vertauschbarer Projektionsoperator. Dann ist für alle $\lambda' < \lambda''$

$$\begin{aligned} \|E(\lambda'')Ff - E(\lambda')Ff\|^2 &= \|(E(\lambda'') - E(\lambda'))Ff\|^2 \\ &= \|F(E(\lambda'') - E(\lambda'))f\|^2 \leq \| (E(\lambda'') - E(\lambda'))f \|^2, \end{aligned}$$

also, da $E(\lambda'')$, $E(\lambda')$, $E(\lambda'') - E(\lambda')$, sowie

$$E(\lambda'')F, E(\lambda')F, E(\lambda'')F - E(\lambda')F = (E(\lambda'') - E(\lambda'))F$$

Projektionsoperatoren sind,

$$\|E(\lambda'')Ff\|^2 - \|E(\lambda')Ff\|^2 \leq \|E(\lambda'')f\|^2 - \|E(\lambda')f\|^2.$$

Daher ist $\int_{-\infty}^{\infty} \lambda^2 d\|E(\lambda)f\|^2 \geq \int_{-\infty}^{\infty} \lambda^2 d\|E(\lambda)Ff\|^2$, also nach $\overline{S_3}$ AFf sinnvoll, falls Af es ist. Ferner ist dann

$$AF = \int_{-\infty}^{\infty} \lambda d(E(\lambda)F) = \int_{-\infty}^{\infty} \lambda d(FE(\lambda)) = FA \quad 91,$$

d. h. A, F sind auch vertauschbar. Für F können wir insbesondere jedes $E(\lambda)$ nehmen (wegen $\overline{S_2}$), dann ist:

$$\begin{aligned} AE(\lambda) &= \int_{-\infty}^{\infty} \lambda' d(E(\lambda')E(\lambda)) = \int_{-\infty}^{\infty} \lambda' d(E(\text{Min}(\lambda, \lambda'))) \\ &= \int_{-\infty}^{\lambda} \lambda' dE(\lambda) + \int_{\lambda}^{\infty} \lambda' dE(\lambda), \end{aligned}$$

und da $\int_{\lambda}^{\infty} = 0$ ist, weil hinter dem d etwas Konstantes steht,

$$AE(\lambda) = E(\lambda)A = \int_{-\infty}^{\lambda} \lambda' dE(\lambda).$$

Hieraus folgt weiter

$$A^2 = \int_{-\infty}^{\infty} \lambda d(E(\lambda)A) = \int_{-\infty}^{\infty} \lambda d\left(\int_{-\infty}^{\lambda} \lambda' dE(\lambda')\right) = \text{Anm. } 92 = \int_{-\infty}^{\infty} \lambda^2 dE(\lambda).$$

Allgemein gilt

$$A^n = \int_{-\infty}^{\infty} \lambda^n dE(\lambda),$$

denn man schließt induktiv von $n-1$ auf n :

$$\begin{aligned} A^n &= A^{n-1}A = \int_{-\infty}^{\infty} \lambda^{n-1} d(E(\lambda)A) = \int_{-\infty}^{\infty} \lambda^{n-1} d\left(\int_{-\infty}^{\lambda} \lambda' dE(\lambda')\right) = \text{Anm. } 92 \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} \lambda^{n-1} \cdot \lambda dE(\lambda) = \int_{-\infty}^{\infty} \lambda^n dE(\lambda). \end{aligned}$$

Wenn also $p(x) = a_0 + a_1 x + \dots + a_n x^n$ irgendein Polynom ist, so gilt (unter $p(A)$ verstehen wir naturgemäß

$$\begin{aligned} p(A) &= a_0 \mathbf{1} + a_1 A + \dots + a_n A^n, \\ \int_{-\infty}^{\infty} dE(\lambda) &= \mathbf{1} \text{ folgt aus } \overline{\mathbf{S}_1}. \\ p(A) &= \int_{-\infty}^{\infty} p(\lambda) dE(\lambda). \end{aligned}$$

Weiter stellen wir fest; wenn $r(\lambda), s(\lambda)$ irgendwelche Funktionen sind, und wir zwei Operatoren B, C symbolisch durch

$$B = \int_{-\infty}^{\infty} r(\lambda) dE(\lambda), \quad C = \int_{-\infty}^{\infty} s(\lambda) dE(\lambda)$$

definieren⁹³, so gilt

$$BC = \int_{-\infty}^{\infty} r(\lambda) s(\lambda) dE(\lambda).$$

Den Beweis führt man genau so wie im Spezialfalle $B = C = A$:

$$\begin{aligned} BE(\lambda) &= \int_{-\infty}^{\infty} r(\lambda') d(E(\lambda')E(\lambda)) = \int_{-\infty}^{\infty} r(\lambda') d(E(\text{Min}(\lambda, \lambda'))) \\ &= \int_{-\infty}^{\lambda} + \int_{\lambda}^{\infty} = \int_{-\infty}^{\lambda} r(\lambda') dE(\lambda') + \int_{\lambda}^{\infty} r(\lambda') dE(\lambda) = \int_{-\infty}^{\lambda} r(\lambda') dE(\lambda'), \\ CB &= \int_{-\infty}^{\infty} s(\lambda) d(BE(\lambda)) = \int_{-\infty}^{\infty} s(\lambda) d\left(\int_{-\infty}^{\lambda} r(\lambda') dE(\lambda')\right) \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} s(\lambda) \cdot r(\lambda) dE(\lambda) = \int_{-\infty}^{\infty} s(\lambda) r(\lambda) dE(\lambda). \end{aligned}$$

Trivial sind die folgenden Relationen zu verifizieren:

$$\begin{aligned} B^* &= \int_{-\infty}^{\infty} \overline{r(\lambda)} dE(\lambda), \quad aB = \int_{-\infty}^{\infty} ar(\lambda) dE(\lambda), \\ B \pm C &= \int_{-\infty}^{\infty} (r(\lambda) \pm s(\lambda)) dE(\lambda). \end{aligned}$$

Es besteht also kein formales Hindernis, nicht auch für solche Funktionen $r(\lambda) \Big| B = r(A)$ zu schreiben⁹⁴. Besonders bemerkenswert

sind die (unstetigen!) Funktionen $e_\lambda(\lambda') = \begin{cases} 1, & \text{für } \lambda' \leq \lambda \\ 0, & \text{für } \lambda' > \lambda \end{cases}$. Für diese gilt nämlich (nach $\overline{S_1}$.)

$$e_\lambda(A) = \int_{-\infty}^{\infty} e_\lambda(\lambda') dE(\lambda) = \int_{-\infty}^{\lambda} dE(\lambda') = E(\lambda).$$

(Am Anfang dieses Paragraphen diskutierten wir den Operator $A = q_j \dots$, sein $E(\lambda)$ war das Multiplizieren mit 1 bzw. 0 für $q_j \leq \lambda$ bzw. $> \lambda$, d. h. das Multiplizieren mit $e_\lambda(q)$. Somit ist $e_\lambda(q_j \dots) = e_\lambda(q_j) \dots$, man kann sich diese Begriffsbildungen hieran veranschaulichen.)

9. Exkurs über die Eindeutigkeit und Lösbarkeit des Eigenwertproblems.

Der letzte Paragraph hat nur eine qualitative und an speziellen Beispielen orientierte Übersicht über die Frage gegeben, welche Zerlegungen der Einheit $E(\lambda)$ zu einem gegebenen Hermiteschen Operator A gehören — eine systematische Untersuchung der Frage fehlt uns noch. Eine solche in mathematischer Vollständigkeit zu geben, geht über den Rahmen dieses Buches hinaus. Wir müssen uns darauf beschränken, nur einiges zu beweisen, das Übrige zu referieren — um so mehr als für das Verständnis der Quantenmechanik die genaue Kenntnis dieser Verhältnisse nicht unbedingt notwendig ist⁹⁵.

In Satz 18. wurde gezeigt, daß die Stetigkeit bei linearen Operationen durch

$$(St.) \quad \|Af\| \leq C \cdot \|f\|$$

(C beliebig, aber fest) ausgedrückt wird.

Für die Bedingung **St.** gibt es nach Satz 18. noch einige äquivalente Formen, und zwar:

$$(St_1.) \quad |(Af, g)| \leq C \cdot \|f\| \|g\|,$$

$$(St_2.) \quad |(Af, f)| \leq C \cdot \|f\|^2.$$

(Letzteres nur für Hermitesche A .)

Die der Stetigkeit gleichwertige Bedingung **St₁** ist der Hilbertsche Begriff der Beschränktheit, für beschränkte (d. h. stetige) Hermitesche Operatoren hat HILBERT das Eigenwertproblem formuliert und gelöst (vgl. Anm. 70). Ehe wir aber hierauf eingehen, müssen wir noch einen weiteren Begriff einführen.

Ein Hermitescher Operator A heißt abgeschlossen, wenn er die folgende Eigenschaft hat: Wenn f_1, f_2, \dots eine Punktfolge ist, alle Af_n Sinn haben, und $f_n \rightarrow f$, $Af_n \rightarrow f^*$ gilt, so hat Af Sinn, und es ist $= f^*$. Man beachte, daß die Stetigkeit auf eine Weise definiert werden könnte, die hiermit eng verwandt ist, nämlich so: wenn alle Af_n , Af Sinn haben, und $f_n \rightarrow f$, so gilt auch $Af_n \rightarrow Af$. Der Unterschied beider Definitionen ist der, daß bei der Abgeschlossenheit die Existenz eines Limes der

$A f_n, f^*$, gefordert wird, und nur unter dieser Annahme seine Gleichheit mit $A f$ behauptet — bei der Stetigkeit dagegen ist auch die Existenz von f^* Behauptung.

Einige Beispiele: Sei wieder \mathfrak{R}_∞ der Raum aller $f(q)$ mit endlichem $\int_{-\infty}^{\infty} |f(q)|^2 dq$ ($-\infty < q < \infty$); A der Operator $q \cdots$, definiert für alle $f(q)$ mit endlichem $\int_{-\infty}^{\infty} |f(q)|^2 dq$ und $\int_{-\infty}^{\infty} q^2 |f(q)|^2 dq$; A' der Operator $\frac{h}{2\pi i} \frac{\partial}{\partial q}$, definiert für alle überall differentiierten Funktionen mit endlichem $\int_{-\infty}^{\infty} |f(q)|^2 dq$ und $\int_{-\infty}^{\infty} \left| \frac{h}{2\pi i} f'(q) \right|^2 dq$; beide sind, wie wir wissen, Hermitesch. A ist abgeschlossen: denn sei $f_n \rightarrow f, A f_n \rightarrow f^*$, d. h. $\int_{-\infty}^{\infty} |f_n(q) - f(q)|^2 dq \rightarrow 0, \int_{-\infty}^{\infty} |q f_n(q) - f^*(q)|^2 dq \rightarrow 0$. Auf Grund des in II. 3. beim Beweise von **D**. Gesagten existiert eine Teilfolge f_{n_1}, f_{n_2}, \dots der f_1, f_2, \dots , die überall, mit Ausnahme einer q -Menge vom Maße 0 gegen einen Limes konvergiert: $f_{n_\nu}(q) \rightarrow g(q)$. Daher ist $\int_{-\infty}^{\infty} |g(q) - f(q)|^2 dq = 0, \int_{-\infty}^{\infty} |q g(q) - f^*(q)|^2 dq = 0$, d. h. bis auf eine Menge vom Maße 0 $g(q) = f(q)$ und ebenso $q g(q) = f^*(q)$, also auch $q f(q) = f^*(q)$ — d. h. $f^*(q)$ und $q f(q)$ sind nicht wesentlich verschieden. Da aber $f^*(q)$ nach Annahme zu \mathfrak{R}_∞ gehört, tut es auch $q f(q)$, somit ist $A f(q)$ sinnvoll und es ist $A f(q) = q f(q) = f^*(q)$. Dagegen ist A' nicht abgeschlossen:

man setze nämlich $f_n(q) = e^{-\sqrt{q^2 + \frac{1}{n}}}$, $f(q) = e^{-|q|}$. Offenbar sind alle $A f_n$ sinnvoll, nicht aber $A f$ (f ist für $q = 0$ undifferentiierbar). Trotzdem ist, wie man leicht nachrechnet, $f_n \rightarrow f, A f_n \rightarrow f^*$, falls man $f^*(q) = -\text{sgn}(q) e^{-|q|}$ setzt ($\text{sgn}(q) = -1, 0, +1$ für $q <, =, > 0$).

Wir zeigen nun: im Gegensatz zur Stetigkeit ist die Abgeschlossenheit eine Eigenschaft, die bei Hermiteschen Operatoren immer mit wenig Mühe erreicht werden kann, und zwar durch den Prozeß der Fortsetzung — d. h. dadurch, daß man den Operator an allen Stellen des \mathfrak{R}_∞ , wo er definiert ist, unverändert läßt, aber an einigen, wo er es noch nicht war, neu definiert.

Sei nämlich A ein beliebiger Hermitescher Operator. Wir definieren einen Operator \tilde{A} wie folgt: $\tilde{A} f$ hat Sinn, wenn eine Folge f_1, f_2, \dots mit lauter sinnvollen $A f_n$ existiert, derart, daß f der Limes der f_n ist, und auch die $A f_n$ einen Limes f^* besitzen, und zwar ist dann $\tilde{A} f = f^*$. Diese Definition ist aber nur dann zulässig, wenn sie eindeutig ist, d. h. wenn aus $f_n \rightarrow f, g_n \rightarrow f, A f_n \rightarrow f^*, A g_n \rightarrow g^*$ folgt $f^* = g^*$. In der Tat ist, wenn $A g$ Sinn hat,

$$(f^*, g) = \text{limes}(A f_n, g) = \text{limes}(f_n, A g) = (f, A g),$$

$$(g^*, g) = \text{limes}(A g_n, g) = \text{limes}(g_n, A g) = (f, A g),$$

also $(f^*, g) = (g^*, g)$. Diese g liegen aber überall dicht, somit ist $f^* = g^*$ — also haben wir \tilde{A} korrekt definiert. Dieses \tilde{A} ist eine Fortsetzung von A , d. h. wenn Af Sinn hat, so hat auch $\tilde{A}f$ Sinn, und es ist $\tilde{A}f = Af$: es genügt, alle $f_n = f$ und $f^* = Af$ zu setzen. Daraus, daß A linear und Hermitesch ist, folgt dasselbe für \tilde{A} (durch Grenzübergang). Schließlich ist \tilde{A} abgeschlossen: denn seien alle $\tilde{A}f_n$ sinnvoll, $f_n \rightarrow f$, $\tilde{A}f_n \rightarrow f^*$. Dann gibt es Folgen $f_{n,1}, f_{n,2}, \dots$ mit sinnvollen $Af_{n,m}, f_{n,m} \rightarrow f_n, Af_{n,m} \rightarrow f_n^*$ und es ist $\tilde{A}f_n = f_n^*$. Für jedes n gibt es ein N_n , so daß für $m \geq N_n$ $\|f_{n,m} - f_n\| \leq \frac{1}{n}$, $\|Af_{n,m} - f_n^*\| \leq \frac{1}{n}$ ist. Daher ist $f_{n,N_n} - f_n \rightarrow 0$, $Af_{n,N_n} - \tilde{A}f_n \rightarrow 0$, also $f_{n,N_n} - f \rightarrow 0$, $Af_{n,N_n} - f^* \rightarrow 0$. Hieraus folgt nach Definition $\tilde{A}f = f^*$.

(Man beachte: ein unstetiger Operator kann durch Fortsetzen niemals stetig gemacht werden.)

Wenn ein Operator B einen Operator A fortsetzt, d. h. wenn so oft Af Sinn hat, auch Bf Sinn hat und $Bf = Af$ ist, so schreiben wir $B \succ A$ oder $A \prec B$. Wir haben soeben $A \prec \tilde{A}$, \tilde{A} Hermitesch und abgeschlossen, bewiesen. Es ist ohne weiteres klar, daß für jedes abgeschlossene B mit $A \prec B$ auch $\tilde{A} \prec B$ gelten muß. Somit ist \tilde{A} die kleinste abgeschlossene Fortsetzung von A . (Also ist $\tilde{\tilde{A}} = \tilde{A}$.)

Die enge Beziehung zwischen A und \tilde{A} legt es nahe, A in allen Betrachtungen durch \tilde{A} zu ersetzen, da \tilde{A} erst den Definitionsbereich von A auf seinen vernünftigen Umfang erweitert, bzw. da der Definitionsbereich von A , gegenüber demjenigen von \tilde{A} , überflüssigerweise eingengt ist. Dies geschehe: dann dürfen wir fürs Folgende alle Hermiteschen Operatoren als abgeschlossen voraussetzen.

Betrachten wir noch einen stetigen Hermiteschen Operator A . Bei diesem ist die Abgeschlossenheit mit der Abgeschlossenheit seines Definitionsbereiches gleichwertig. Nun gilt die, für die Stetigkeit charakteristische, Bedingung $\|Af\| \leq C \cdot \|f\|$ offenbar auch für \tilde{A} , also ist auch \tilde{A} stetig — und da der Definitionsbereich von \tilde{A} dann abgeschlossen ist, andererseits aber überall dicht sein muß, ist er gleich \mathfrak{R}_∞ . D. h.: \tilde{A} ist überall sinnvoll, und somit jeder abgeschlossene und stetige Operator. Es gilt auch die Umkehrung: wenn ein abgeschlossener Operator überall sinnvoll ist, so ist er stetig (dies ist der Satz von TOEPLITZ⁹⁶, auf dessen Beweis wir hier nicht eingehen können).

HILBERTS Resultat lautet so: zu jedem stetigen Hermiteschen Operator gehört eine und nur eine Zerlegung der Einheit (vgl. a. a. O. Anm. 70). Da ein stetiger Operator stets Sinn hat, muß $\int \lambda^2 d\|E(\lambda)f\|^2$ stets endlich sein; da es überdies $= \|Af\|^2$, und somit nach **St.** $\leq C^2 \cdot \|f\|^2$ ist, haben wir:

$$\begin{aligned} 0 &\geq \|Af\|^2 - C^2 \cdot \|f\|^2 = \int_{-\infty}^{\infty} \lambda^2 d \|E(\lambda)f\|^2 - C^2 \int_{-\infty}^{\infty} d \|E(\lambda)f\|^2 \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} (\lambda^2 - C^2) d \|E(\lambda)f\|^2. \end{aligned}$$

Sei nun $f = E(-C - \varepsilon)g$, dann ist $E(\lambda)f = E(\text{Min}(\lambda, -C - \varepsilon))g$, also für $\lambda \geq -C - \varepsilon$ konstant, so daß wir nur $\int_{-\infty}^{-C - \varepsilon}$ zu betrachten brauchen. Dort ist $E(\lambda)f = E(\lambda)g$ und $\lambda^2 - C^2 \geq (C + \varepsilon)^2 - C^2 > 2C\varepsilon$, also

$$\begin{aligned} 0 &\geq 2C\varepsilon \int_{-\infty}^{-C - \varepsilon} d \|E(\lambda)g\|^2 = 2C\varepsilon \|E(-C - \varepsilon)g\|^2, \\ \|E(-C - \varepsilon)g\|^2 &\leq 0, \quad E(-C - \varepsilon)g = 0. \end{aligned}$$

Ebenso beweist man für $f = g - E(C + \varepsilon)g$

$$g - E(C + \varepsilon)g = 0.$$

Somit ist für alle $\varepsilon > 0$ $E(-C - \varepsilon) = 0$, $E(C + \varepsilon) = 1$, d. h. $E(\lambda) = 0$ für $\lambda < -C$ und $= 1$ für $\lambda > C$. (Wegen \mathfrak{S}_2 gilt das letztere auch noch für $\lambda = C$.) D. h.: $E(\lambda)$ ist nur in $-C \leq \lambda \leq C$ veränderlich.

Umgekehrt hat dies die Stetigkeit von A zur Folge:

$$\begin{aligned} \|Af\|^2 &= \int_{-\infty}^{\infty} \lambda^2 d \|E(\lambda)f\|^2 = \int_{-C}^C \lambda^2 d \|E(\lambda)f\|^2 \leq C^2 \cdot \int_{-C}^C d \|E(\lambda)f\|^2 \\ &= C^2 \int_{-\infty}^{\infty} d \|E(\lambda)f\|^2 = C^2 \cdot \|f\|^2, \quad \|Af\| \leq C \cdot \|f\|. \end{aligned}$$

Wir sehen also: durch die nur in endlichen λ -Intervallen variablen Zerlegungen der Einheit werden die stetigen A gerade erschöpft. Aber wie steht es mit den übrigen, unstetigen Hermiteschen Operatoren? Es sind ja noch alle Zerlegungen der Einheit verfügbar, die bei beliebig großem λ variabel sind, erschöpfen nun diese die genannten Hermiteschen Operatoren?

Der Umstand, daß diese Operatoren nicht überall sinnvoll sein können, muß zunächst richtig eingeschätzt werden.

Es ist an und für sich denkbar, daß ein Hermitescher Operator an Stellen des Hilbertschen Raumes nicht definiert ist, an denen dies vernünftigerweise möglich wäre: so war z. B. unser Operator $A' = \frac{h}{2\pi i} \frac{\partial}{\partial q}$

für $f(q) = e^{-|q|}$ undefiniert, und wir hätten $\frac{h}{2\pi i} \frac{\partial}{\partial q}$ auch auf die analytischen Funktionen (in $-\infty < q < +\infty$, q reell) einschränken können⁹⁷, usw. Der Definitionsbereich war zwar dadurch vor allzu willkürlichen Einengungen geschützt, daß wir die Überalldichtigkeit für ihn verlangen, ferner können wir uns auf abgeschlossene Operatoren beschränken. Jedoch ist auch dies nicht wirksam genug. Denn nehmen

wir z. B. den Operator $A' = \frac{h}{2\pi i} \frac{d}{dq}$ im Intervall $0 \leq q \leq 1$. $f(q)$ sei also überall differentiierbar vorausgesetzt, $\int_0^1 |f(q)|^2 dq$, $\int_0^1 |f'(q)|^2 dq$ endlich. Damit A' Hermitesch sei, muß noch eine Randbedingung $f(0):f(1) = e^{-i\alpha}$ ($0 \leq \alpha < 2\pi$) auferlegt werden; der Bereich dieser $f(q)$ heie \mathfrak{A}_α , A' selbst dann A'_α . Ferner betrachten wir noch die Randbedingung $f(1) = f(0) = 0$, dann heie der $f(q)$ -Bereich \mathfrak{A}^0 , A' selbst A'^0 . Alle A'_α sind Fortsetzungen von A'^0 (das also Hermitesch ist, sein Definitionsbereich ist überall dicht⁹⁸), und daher auch die abgeschlossenen \tilde{A}'_α solche von \tilde{A}'^0 . Alle \tilde{A}'_α sind voneinander und von \tilde{A}'^0 verschieden. Denn die offenbar unitäre Operation $f(q) \rightarrow e^{i\beta q} f(q)$ führt A'_α in $A' + \frac{h\beta}{2\pi} 1$ über, und \mathfrak{A}_α in $\mathfrak{A}_{\alpha+\beta}$, \mathfrak{A}^0 in \mathfrak{A}^0 , also A'_α in $A'_{\alpha-\beta} + \frac{h\beta}{2\pi} 1$, A'^0 in $A'^0 + \frac{h\beta}{2\pi} 1$, also \tilde{A}'_α in $\tilde{A}'_{\alpha-\beta} + \frac{h\beta}{2\pi} 1$, \tilde{A}'^0 in $\tilde{A}'^0 + \frac{h\beta}{2\pi} 1$ — daher folgte aus $\tilde{A}'_\alpha = \tilde{A}'^0$, $\tilde{A}'_{\alpha-\beta} = \tilde{A}'^0$, d. h. alle \tilde{A}'_γ einander gleich. Somit genügt es, $A'_\alpha \neq A'_\gamma$ für $\alpha \neq \gamma$ zu zeigen, und dies ist der Fall, wenn A'_α, A'_γ keine gemeinsame Hermitesche Fortsetzung besitzen, also wenn A' in der Vereinigung von $\mathfrak{A}_\alpha, \mathfrak{A}_\gamma$ nicht Hermitesch ist. Da $e^{i\alpha q}$ zu \mathfrak{A}_α , $e^{i\gamma q}$ zu \mathfrak{A}_γ gehört, und

$$\begin{aligned} (A' e^{i\alpha q}, e^{i\gamma q}) - (e^{i\alpha q}, A' e^{i\gamma q}) &= i\alpha \int_0^1 e^{i(\alpha-\gamma)q} dq - i\gamma \int_0^1 e^{i(\alpha-\gamma)q} dq \\ &= \int_0^1 e^{i(\alpha-\gamma)q} i(\alpha - \gamma) dq = e^{i(\alpha-\gamma)} - 1 \neq 0 \end{aligned}$$

ist, ist dies der Fall. Somit ist der abgeschlossene Hermitesche Operator \tilde{A}'^0 in einem zu engen Bereich definiert, denn es existieren echte (d. h. von ihm verschiedene) abgeschlossen-Hermitesche Fortsetzungen von ihm: die \tilde{A}'_α — und dabei ist der Fortsetzungsproze unendlichvieldeutig, da jedes \tilde{A}'_α verwendbar ist, und jedes eine andere Lösung des Eigenwertproblems erzeugt (stets reines Punktspektrum, aber dieses ist α -abhängig: die Menge $h\left(\frac{\alpha}{2\pi} + k\right)$, $k=0, \pm 1, \pm 2, \dots$). Beim Operator \tilde{A}'^0 selbst können wir dagegen überhaupt keine vernünftige Lösung des Eigenwertproblems erwarten. In der Tat werden wir im weiteren Verlaufe dieses Paragraphen noch zeigen, daß ein Hermitescher Operator, der zu einer Zerlegung der Einheit gehört (d. h. für den das Eigenwertproblem lösbar ist), keine echten Fortsetzungen besitzt. Einen Operator, der keine echten Fortsetzungen besitzt — der also an allen Stellen, wo er vernünftigerweise, d. h. ohne Durchbrechung des Hermiteschen Charakters, definiert werden könnte, auch schon definiert ist — nennen wir maximal. Wir haben also gesehen: nur zu maximalen Operatoren kann eine Zerlegung der Einheit gehören.

Andererseits gilt der Satz: jeder Hermitesche Operator kann zu einem maximalen Hermiteschen Operator fortgesetzt werden. (Und zwar ein nicht maximaler, aber abgeschlossener Operator stets auf unendlichviele verschiedene Weisen. D. h. die einzige eindeutige Etappe des Fortsetzungsprozesses ist das „Abschließen $A \rightarrow \tilde{A}$. Vgl. a. a. O. Anm. ⁹⁵.) Daher wäre die günstigste Lösung des Problems, die wir erhoffen dürfen, diese: zu jedem maximalen Hermiteschen Operator gehört eine und nur eine Zerlegung der Einheit. (Jeder abgeschlossene stetige Operator ist überall in \mathfrak{R}_∞ sinnvoll, also maximal.)

Es gilt also diese Fragen zu beantworten: gehört zu einem maximalen Hermiteschen Operator immer eine Zerlegung der Einheit?, und können u. U. auch mehrere zum selben Operator gehören?

Vor allem das Resultat: zu einem gegebenen maximalen Hermiteschen Operator gehört keine oder genau eine Zerlegung der Einheit, und das erstere kommt vor — d. h. das Eigenwertproblem ist gewiß eindeutig, aber u. U. unlösbar. Jedoch ist der letztere Fall in einem gewissen Sinne als Ausnahme anzusehen. Die Methode, die zu diesem Resultate führt, werde in großen Zügen skizziert.

Wenn wir eine rationale Funktion $f(\lambda)$ auf eine (endlichvioldimensionale, unitär auf die Diagonalform transformierbare) Matrix A anwenden, so bleiben die Eigenvektoren erhalten, und die Eigenwerte $\lambda_1, \dots, \lambda_n$ gehen in $f(\lambda_1), \dots, f(\lambda_n)$ über⁹⁹. Wenn nun $f(\lambda)$ die reelle Achse (in der komplexen Zahlenebene) auf den Umfang des Einheitskreises abbildet, so gehen die Matrizen mit lauter reellen Eigenwerten in diejenigen mit Eigenwerten vom Absolutwert 1 über — d. h. die Hermiteschen in die unitären¹⁰⁰. $f(\lambda) = \frac{\lambda + i}{\lambda - i}$ hat z. B. diese Eigenschaft, die entsprechende Transformation

$$U = \frac{A - i1}{A + i1}, \quad A = -i \frac{U + 1}{U - 1}$$

heißt die Cayleysche Transformation. Wir werden diese Transformation nun auch bei den Hermiteschen Operatoren des \mathfrak{R}_∞ versuchen, d. h. einen Operator U so definieren: Uf hat dann und nur dann Sinn, wenn $f = (A + i1)\varphi = A\varphi + i\varphi$ ist, und zwar ist dann $Uf = (A - i1)\varphi = A\varphi - i\varphi$. Wir hoffen, daß diese Definition für alle f ein eindeutiges Uf ergibt, und U unitär ist — der Beweis im \mathfrak{R}_n ist natürlich unmaßgebend, da er die Transformierbarkeit auf die Diagonalform voraussetzt, d. h. die Lösbarkeit des Eigenwertproblems, und zwar mit einem reinen Punktspektrum. Trifft es aber zu, so können wir das Eigenwertproblem von A folgendermaßen lösen:

Für U ist das Eigenwertproblem in der folgenden Form lösbar. Es gibt eine einzige Schar von Projektionsoperatoren $E(\sigma)$ ($0 \leq \sigma \leq 1$), die den folgenden Bedingungen genügt:

S₁. Es ist $E(0) = 0, E(1) = 1$, für $\sigma \rightarrow \sigma_0, \sigma \geq \sigma_0$ gilt $E(\sigma)f \rightarrow E(\sigma_0)f$.

S₂. Aus $\sigma' \leq \sigma''$ folgt $E(\sigma') \leq E(\sigma'')$.

S₃. Es gilt stets

$$(Uf, g) = \int_0^1 e^{2\pi i \cdot \sigma} d(E(\sigma)f, g).$$

(Uf hat ja stets Sinn, und das Integral rechts ist stets absolut konvergent^{101.})

Dies beweist man im Rahmen und mit den Mitteln der Hilbertschen Theorie, was dadurch ermöglicht wird, daß der unitäre Operator U stets stetig ist (vgl. a. d. a. O. Anm. ^{70, 101}). Die Analogie zur Formulierung S₁—S₃ für Hermitesche Operatoren springt in die Augen, die einzigen Unterschiede sind: statt des reellen Integranden $\lambda, > -\infty, < +\infty$, durchläuft hier der komplexe Integrand $e^{2\pi i \cdot \sigma}$ den Umfang des Einheitskreises (schon im \mathfrak{R}_n war das Verhältnis Hermitesch-unitär demjenigen reellen Achse-Einheitskreisumfang weitgehend analog, vgl. Anm. ¹⁰⁰), und die Beschreibung des Operatoren-Definitionsbereiches in S₃ ist hier überflüssig, weil unitäre Operatoren überall sinnvoll sind.

Wegen S₁ ist für $\sigma \rightarrow 0$ (da von selbst $\sigma \geq 0$ ist!) $E(\sigma)f \rightarrow E(0)f = 0$, während für $\sigma \rightarrow 1$ (da $\sigma \leq 1$ ist!) nicht $E(\sigma)f \rightarrow E(1)f = f$ sein muß. Ist dies tatsächlich nicht der Fall, so ist eben $E(\sigma)$ bei $\sigma = 1$ unstetig. Da aber ein Projektionsoperator E' existiert, so daß für $\sigma \rightarrow 1, \sigma < 1$ $E(\sigma)f \rightarrow E'f$ (vgl. Satz 17. in II. 4., sowie Anm. ⁷⁹), bedeutet das $E' \neq E(1) = 1$, d. h. daß $E'f = 0$ auch Lösungen $f \neq 0$ besitzt. Wegen $E(\sigma) \leq E'$ folgt aus $E'f = 0$ $E(\sigma)f = 0$ für alle $\sigma < 1$, und nach Definition ist es seinerseits eine Folge hiervon. Sind nun alle $E(\sigma)f = 0$ ($\sigma < 1$), so erkennt man, wie am Anfang von II. 8., $(Uf, g) = (f, g)$ für alle g , also $Uf = f$. Ist umgekehrt $Uf = f$, so ist

$$\int_0^1 e^{2\pi i \sigma} d(E(\sigma)f, f) = (Uf, f) = (f, f),$$

$$\Re \int_0^1 e^{2\pi i \sigma} d(E(\sigma)f, f) = (f, f) \int_0^1 (1 - \cos(2\pi\sigma)) d(E(\sigma)f, f) = 0,$$

$$\int_0^1 (1 - \cos(2\pi\sigma)) d(\|E(\sigma)f\|^2) = 0.$$

Hieraus folgert man, genau wie am Anfang von II. 8., $E(\sigma)f = 0$ für alle $\sigma < 1$ (und > 0 , aber für $\sigma = 0$ gilt dies ohnehin). Somit bedeutet die Unstetigkeit von $E(\sigma)$ bei $\sigma = 1$: $Uf = f$ ist mit $f \neq 0$ lösbar.

Bei unseren Cayleyschen Transformierten U ist nun $\varphi = Af + if$, $U\varphi = Af - if$; aus $U\varphi = \varphi$ folgt also $f = 0, \varphi = 0$. Hier muß also auch für $\sigma \rightarrow 1$ $E(\sigma)f \rightarrow f$ gelten. Infolgedessen können wir durch die

Abbildung

$$\lambda = -i \frac{e^{2\pi i \sigma} + 1}{e^{2\pi i \sigma} - 1} = -\operatorname{ctg} \pi \sigma, \quad \sigma = -\frac{1}{\pi} \operatorname{arc} \operatorname{ctg} \lambda$$

(welche die Intervalle $0 < \sigma < 1$ und $-\infty < \lambda < +\infty$ ein-eindeutig und monoton aufeinander abbildet) aus $E(\sigma)$ eine Zerlegung der Einheit $F(\lambda)$ im Sinne von $\overline{S_1}, \overline{S_2}$ erzeugen:

$$(C.) \quad F(\lambda) = E\left(-\frac{1}{\pi} \operatorname{arc} \operatorname{ctg} \lambda\right), \quad E = F(-\operatorname{ctg} \pi \sigma).$$

Wir wollen nun zeigen: $F(\lambda)$ erfüllt $\overline{S_3}$, dann und nur dann für A , wenn $E(\sigma)$ $\overline{S_3}$ für \mathcal{U} erfüllt. Damit ist die Eindeutigkeits- und Lösbarkeitsfrage beim Eigenwertproblem des (evtl. un stetigen!) Hermiteschen Operators A auf die entsprechende beim unitären Operator U zurückgeführt, für den sie aber, wie erwähnt, im günstigen Sinne erledigt ist.

Sei also A Hermitesch, U seine Cayleysche Transformierte. Wir diskutieren als Erstes den Fall, daß U unitär ist, also sein $E(\sigma)$ mit $\overline{S_1}, \overline{S_2}$ sowie $\overline{S_3}$ existiert. Wir bilden die $F(\lambda)$ nach $\overline{C.}, \overline{S_1}, \overline{S_2}$, sind dann erfüllt. Wenn A f Sinn hat, so ist $Af + if = \varphi$, $Af - if = U\varphi$, also $f = \frac{\varphi - U\varphi}{2i}$, $Af = \frac{\varphi + U\varphi}{2}$. Wir rechnen, teilweise symbolisch¹⁰²:

$$\begin{aligned} f &= \frac{1}{2i}(\varphi - U\varphi) = \frac{1}{2i}\left(\varphi - \int_0^1 e^{2\pi i \sigma} dE(\sigma)\varphi\right) = \int_0^1 \frac{1 - e^{2\pi i \sigma}}{2i} dE(\sigma)\varphi, \\ E(\sigma)f &= \int_0^1 \frac{1 - e^{2\pi i \sigma'}}{2i} d(E(\sigma)E(\sigma')\varphi) = \int_0^1 \frac{1 - e^{2\pi i \sigma'}}{2i} d(E(\operatorname{Min}(\sigma, \sigma'))\varphi) \\ &= \int_0^\sigma \frac{1 - e^{2\pi i \sigma'}}{2i} dE(\sigma')\varphi, \\ \|E(\sigma)f\|^2 &= (E(\sigma)f, f) = \int_0^\sigma \frac{1 - e^{2\pi i \sigma'}}{2i} d(E(\sigma')\varphi, f) \\ &= \int_0^\sigma \frac{1 - e^{2\pi i \sigma'}}{2i} d(\overline{E(\sigma')f}, \varphi) = \int_0^\sigma \frac{1 - e^{2\pi i \sigma'}}{2i} d\left(\int_0^{\sigma'} \frac{1 - e^{-2\pi i \sigma''}}{-2i} d(\overline{E(\sigma'')\varphi}, \varphi)\right) \\ &= \int_0^\sigma \frac{1 - e^{2\pi i \sigma'}}{2i} \cdot \frac{1 - e^{-2\pi i \sigma'}}{-2i} \cdot d(\overline{E(\sigma')\varphi}, \varphi) \\ &= \int_0^\sigma \frac{(1 - e^{2\pi i \sigma'})(1 - e^{-2\pi i \sigma'})}{4} d(\|E(\sigma')\varphi\|^2) = \int_0^\sigma \sin^2(\pi \sigma') d(\|E(\sigma')\varphi\|^2), \end{aligned}$$

also das Integral aus $\overline{S_3}$:

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{\infty} \lambda^2 d \|F(\lambda) f\|^2 &= \int_0^1 \operatorname{ctg}^2(\pi \sigma) d \|E(\sigma) f\|^2 \\ &= \int_0^1 \operatorname{ctg}^2(\pi \sigma) d \left(\int_0^{\sigma} \sin^2(\pi \sigma') d \|E(\sigma') \varphi\|^2 \right) \\ &= \int_0^1 \operatorname{ctg}^2(\pi \sigma) \cdot \sin^2(\pi \sigma) d \|E(\sigma) \varphi\|^2 \\ &= \int_0^1 \cos^2(\pi \sigma) d \|E(\sigma) \varphi\|^2. \end{aligned}$$

Dieses ist aber, da es durch $\int_0^1 d \|E(\sigma) \varphi\|^2 = \|\varphi\|^2$ absolut majorisiert wird, endlich. Ferner ist dann:

$$\begin{aligned} Af &= \frac{1}{2} (\varphi + U\varphi) = \frac{1}{2} \left(\varphi + \int_0^1 e^{2\pi i \sigma} d E(\sigma) \varphi \right) = \int_0^1 \frac{1 + e^{2\pi i \sigma}}{2} d E(\sigma) \varphi \\ &= \int_0^1 -i \frac{e^{2\pi i \sigma} + 1}{e^{2\pi i \sigma} - 1} \cdot \frac{1 - e^{2\pi i \sigma}}{2i} d E(\sigma) \varphi \\ &= \int_0^1 -\operatorname{ctg}(\pi \sigma) d \left(\int_0^{\sigma} \frac{1 - e^{2\pi i \sigma'}}{2i} d E(\sigma') \varphi \right) \\ &= \int_0^1 -\operatorname{ctg}(\pi \sigma) d E(\sigma) f = \int_{-\infty}^{\infty} \lambda d F(\lambda) f, \end{aligned}$$

d. h. die Schlußrelation von $\overline{S_3}$ gilt auch. Somit ist A jedenfalls Fortsetzung desjenigen Operators, der nach $\overline{S_3}$ zu $F(\lambda)$ gehört, da aber dieser (wie wir noch zeigen werden) maximal ist, muß A ihm gleich sein¹⁰³.

Nun diskutieren wir die Umkehrung: $F(\lambda)$ gehöre nach $\overline{S_1} - \overline{S_3}$ zu A , wie ist U ? Wir definieren jetzt $E(\sigma)$ durch (C.), es erfüllt also $\overline{S_1}$, $\overline{S_2}$. Sei φ beliebig, wir setzen (wieder symbolisch)

$$f = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{1}{\lambda + i} d F(\lambda) \varphi = \int_0^1 \frac{1}{-\operatorname{ctg}(\pi \sigma) + i} d E(\sigma) \varphi = \int_0^1 \frac{1 - e^{2\pi i \sigma}}{2i} d E(\sigma) \varphi.$$

(Da $\frac{1}{\lambda + i}$ bzw. $\frac{1 - e^{2\pi i \sigma}}{2i}$ beschränkt ist, konvergiert alles.) Dann ist:

$$\begin{aligned} F(\lambda) f &= E(\sigma) f = \int_0^1 \frac{1 - e^{2\pi i \sigma'}}{2i} d E(\sigma) E(\sigma') \varphi \\ &= \int_0^1 \frac{1 - e^{2\pi i \sigma'}}{2i} d E(\operatorname{Min}(\sigma, \sigma')) \varphi = \int_0^{\sigma} \frac{1 - e^{2\pi i \sigma'}}{2i} d E(\sigma') \varphi, \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 Af &= \int_{-\infty}^{\infty} \lambda dF(\lambda) f = \int_0^1 -\operatorname{ctg}(\pi\sigma) dE(\sigma) f \\
 &= \int_0^1 -i \frac{e^{2\pi i\sigma} + 1}{e^{2\pi i\sigma} - 1} d \left(\int_0^{\sigma} \frac{1 - e^{2\pi i\sigma'}}{2i} dE(\sigma') \varphi \right) \\
 &= \int_0^1 -i \frac{e^{2\pi i\sigma} + 1}{e^{2\pi i\sigma} - 1} \cdot \frac{1 - e^{2\pi i\sigma}}{2i} dE(\sigma) \varphi = \int_0^1 \frac{1 + e^{2\pi i\sigma}}{2} dE(\sigma) \varphi,
 \end{aligned}$$

also

$$Af + if = \int_0^1 dE(\sigma) \varphi = \varphi, \quad Af - if = \int_0^1 e^{2\pi i\sigma} dE(\sigma) \varphi.$$

Somit hat $U\varphi$ Sinn, und es ist gleich $\int_0^1 e^{2\pi i\sigma} dE(\sigma) \varphi$. φ war beliebig: also ist U überall sinnvoll. Indem man das innere Produkt nur irgendeinem ψ bildet, und die komplex Konjugierte nimmt, erkennt man noch, daß $U^*\psi$ gleich $\int_0^1 e^{-2\pi i\sigma} dE(\sigma) \psi$ ist. Die Schlußrechnung von II. 8. zeigt dann $UU^* = U^*U = 1$, d. h.: U ist unitär, und gehört zu $E(\sigma)$.

Die Lösbarkeit des Eigenwertproblems von A ist also mit der Unitarität seiner Cayleyschen Transformierten U gleichwertig, und seine Eindeutigkeit steht dann fest — es bleibt also nur noch zu entscheiden: können wir U immer bilden?, und wann ist es unitär? Um diese Frage zu entscheiden, gehen wir wieder von einem abgeschlossenen Hermiteischen Operator A aus.

U wurde so definiert: wenn $\varphi = Af + if$ ist, und nur dann, ist $U\varphi$ sinnvoll, und zwar gleich $Af - if$. Es muß aber zuerst gezeigt werden, daß diese Definition überhaupt zulässig ist, d. h. daß zu einem φ nicht mehrere f existieren können. D. h.: daß aus $Af + if = Ag + ig$ $f = g$ folgt, oder: (wegen der Linearität von A) aus $Af + if = 0$ $f = 0$.

Es ist

$$\begin{aligned}
 \|Af \pm if\|^2 &= (Af \pm if, Af \pm if) = (Af, Af) \pm (Af, if) \pm (if, Af) \\
 &\quad + (if, if) = \|Af\|^2 \mp i(Af, f) \pm i(Af, f) + \|f\|^2 = \|Af\|^2 + \|f\|^2.
 \end{aligned}$$

Somit hat $Af + if = 0$. $\|f\|^2 \leq \|Af + if\|^2 = 0$, $f = 0$ zur Folge, wodurch unsere Definitionsweise gerechtfertigt ist. Zweitens ist $\|Af + if\| = \|Af - if\|$, d. h. $\|U\varphi\| = \|\varphi\|$. Also ist U , soweit es definiert ist, stetig. Ferner sieht man: Sei \mathfrak{C} der Definitionsbereich von U (also die Menge aller $Af + if$), und \mathfrak{F} der Wertevorrat von U (die Menge aller $U\varphi$, also die Menge aller $Af - if$). Da A und U linear sind, sind \mathfrak{C} , \mathfrak{F} lineare Mannigfaltigkeiten, sie sind aber auch abgeschlossen. Sei nämlich φ ein Häufungspunkt von \mathfrak{C} bzw. \mathfrak{F} , dann gibt es eine Folge $\varphi_1, \varphi_2, \dots$ aus \mathfrak{C} bzw. \mathfrak{F} mit $\varphi_n \rightarrow \varphi$. Es ist also

$\varphi_n = Af_n \pm if_n$. Da die φ_n konvergieren, erfüllen sie die Cauchysche Konvergenzbedingung (vgl. **D.** in II. 1.), wegen

$$\|f_m - f_n\| \leq \|A(f_m - f_n) \pm i(f_m - f_n)\| = \|\varphi_m - \varphi_n\|$$

erfüllen dann die f_n diese Bedingung erst recht, und wegen $\|Af_m - Af_n\| = \|A(f_m - f_n)\| \leq \|A(f_m - f_n) \pm i(f_m - f_n)\| = \|\varphi_m - \varphi_n\|$ die Af_n auch. Also konvergieren die f_1, f_2, \dots und die Af_1, Af_2, \dots auch (nach **D.** in II. 1.): $f_n \rightarrow f$, $Af_n \rightarrow f^*$. Da A abgeschlossen ist, hat Af Sinn und es ist gleich f^* . Somit haben wir:

$$\varphi_n = Af_n \pm if_n \rightarrow f^* \pm if = Af \pm if, \varphi_n \rightarrow \varphi,$$

also $\varphi = Af \pm if$, d. h. auch φ gehört zu \mathfrak{E} , bzw. \mathfrak{F} .

Also ist U in der abgeschlossenen Linearmannigfaltigkeit \mathfrak{E} definiert, und bildet diese auf die abgeschlossene Linearmannigfaltigkeit \mathfrak{F} ab. U ist linear, wegen $\|Uf - Ug\| = \|U(f - g)\| = \|f - g\|$ läßt es alle Distanzen ungeändert, es ist, wie wir sagen wollen, längentreu. Somit folgt aus $f \neq g$ $Uf \neq Ug$, d. h. die Abbildung ist eineindeutig. Es gilt auch $(f, g) = (Uf, Ug)$, was man genau so beweist, wie in II. 5. bei den unitären Operatoren. Also läßt U auch alle inneren Produkte ungeändert. Unitär ist aber U offenbar dann und nur dann, wenn $\mathfrak{E} = \mathfrak{F} = \mathfrak{R}_\infty$ ist.

Wenn nun A, B zwei abgeschlossene Hermitesche Operatoren sind, U, V ihre Cayleyschen Transformierten, und die obigen Mengen $\mathfrak{E}, \mathfrak{F}$ bzw. $\mathfrak{G}, \mathfrak{H}$, so sieht man sofort: Wenn B echte Fortsetzung von A ist, so ist auch V echte Fortsetzung von U , also \mathfrak{E} echtes Teil von \mathfrak{G} , \mathfrak{F} echtes Teil von \mathfrak{H} . Somit ist $\mathfrak{E} \neq \mathfrak{R}_\infty$, $\mathfrak{F} \neq \mathfrak{R}_\infty$. Dann ist U nicht unitär; und das Eigenwertproblem von A unlösbar. Damit haben wir den mehrfach zitierten Satz bewiesen: Wenn das Eigenwertproblem von A lösbar ist, so gibt es keine echten Fortsetzungen von A , d. h. A ist maximal.

Kehren wir nun wieder zu dem einen abgeschlossenen Hermiteschen Operator A zurück, und zu seinen $\mathfrak{E}, \mathfrak{F}, U$. Wenn Af Sinn hat, so ist für $Af + if = \varphi$ $U\varphi$ sinnvoll, und zwar $Af - if = U\varphi$, also $f = \frac{1}{2i}(\varphi - U\varphi)$, $Af = \frac{1}{2}(\varphi + U\varphi)$, d. h. wenn wir $\psi = \frac{\varphi}{2i}$ setzen, $f = \psi - U\psi$, $Af = i(\psi + U\psi)$. Umgekehrt ist für $f = \psi - U\psi$ Af bestimmt sinnvoll: denn da $U\psi$ Sinn hat, ist $\psi = Af' + if'$ (Af' sinnvoll!), $U\psi = Af' - if'$, also $f = \psi - U\psi = 2if'$. Der Definitionsbereich von A ist also die Menge aller $\psi - U\psi$, und zwar ist für $f = \psi - U\psi$ $Af = i(\psi + U\psi)$. Somit ist auch A durch U (sowie $\mathfrak{E}, \mathfrak{F}$) eindeutig bestimmt. Gleichzeitig sehen wir, daß die $\psi - U\psi$ überall dicht liegen müssen (als Definitionsbereich von A).

Wir gehen nun umgekehrt von zwei abgeschlossenen Linearmannigfaltigkeiten $\mathfrak{E}, \mathfrak{F}$ aus, und einer linear-längentreuen Abbildung U von \mathfrak{E} auf \mathfrak{F} . Gibt es dann ein Hermitesches A , dessen Cayleysche Trans-

formierte dieses U ist? Allenfalls müssen dazu die $\varphi - U\varphi$ überall dicht liegen, dies werde also angenommen. Das fragliche A ist dann nach dem vorhin Gesagten eindeutig festgelegt, nur fragt sich noch, ob diese Definition möglich ist, ob dieses A wirklich Hermitesch ist, und ob wirklich U seine Cayleysche Transformierte ist. Das erste steht fest, wenn in $f = \varphi - U\varphi$ das φ (wenn dieses überhaupt existiert) eindeutig festlegt, d. h. wenn aus $\varphi - U\varphi = \psi - U\psi$ $\varphi = \psi$ folgt, oder: aus $\varphi - U\varphi = 0$ $\varphi = 0$. Sei in der Tat $\varphi - U\varphi = 0$, dann folgt aus $g = \psi - U\psi$,

$$(\varphi, g) = (\varphi, \psi) - (\varphi, U\psi) = (U\varphi, U\psi) - (\varphi, U\psi) = (U\varphi - \varphi, U\psi) = 0,$$

und da diese g überall dicht liegen, ist $\varphi = 0$.

Zum zweiten müssen wir $(Af, g) = (f, Ag)$ beweisen, d. h. daß (Af, g) beim Vertauschen von f, g in sein Komplexkonjugiertes übergeht. Sei $f = \varphi - U\varphi, g = \psi - U\psi$, also $Af = i(\varphi + U\varphi)$, und

$$\begin{aligned} (Af, g) &= (i(\varphi + U\varphi), \psi - U\psi) \\ &= i(\varphi, \psi) + i(U\varphi, \psi) - i(\varphi, U\psi) - i(U\varphi, U\psi) \\ &= i[(U\varphi, \psi) - \overline{(U\psi, \varphi)}] = i(U\varphi, \psi) + \overline{i(U\psi, \varphi)}, \end{aligned}$$

und dies tut offenbar beim Vertauschen von f, g , d. h. von φ, ψ , das Gewünschte. Das Dritte erkennen wir so: Die Cayleysche Transformierte von A heiße V , ihr Definitionsbereich ist die Menge aller

$$Af + if = i(\varphi + U\varphi) + i(\varphi - U\varphi) = 2i\varphi,$$

d. h. der Definitionsbereich von U , und dort gilt

$$V(2i\varphi) = V(Af + if) = Af - if = i(\varphi + U\varphi) - i(\varphi - U\varphi) = 2iU\varphi,$$

d. h. $V\varphi = U\varphi$. Also ist $V = U$.

Die (abgeschlossenen) Hermiteschen Operatoren A entsprechen also unseren linear-längentreuen U , mit überall dichten $\varphi - U\varphi$, ein-eindeutig — wenn wir jedem A seine Cayleysche Transformierte U zuordnen¹⁰⁴. Nun übersieht man leicht alle Hermiteschen Fortsetzungen B von A , da ja alle längentreuen Fortsetzungen V von U mühelos aufzufinden sind (die $\varphi - V\varphi$ liegen von selbst überall dicht, da es die $\varphi - U\varphi$ tun, die eine Teilmenge der ersteren sind). Damit A maximal sei, muß es U sein, und umgekehrt. Wenn U nicht maximal ist, so ist $\mathfrak{E} \neq \mathfrak{R}_\infty, \mathfrak{F} \neq \mathfrak{R}_\infty$, umgekehrt folgt hieraus, daß U nicht maximal ist: Denn dann ist $\mathfrak{R}_\infty - \mathfrak{E} \neq 0, \mathfrak{R}_\infty - \mathfrak{F} \neq 0$, wir können daher ein φ_0 aus $\mathfrak{R}_\infty - \mathfrak{E}$ und ein ψ_0 aus $\mathfrak{R}_\infty - \mathfrak{F}$ mit $\varphi_0 \neq 0, \psi_0 \neq 0$ auswählen, und daher (indem wir sie durch $\frac{\varphi_0}{\|\varphi_0\|}, \frac{\psi_0}{\|\psi_0\|}$ ersetzen) sogar mit $\|\varphi_0\| = \|\psi_0\| = 1$. Wir definieren nun einen Operator V in $[\mathfrak{E}, \varphi_0]$ so, daß für $f = \varphi + a\varphi_0$ (φ aus \mathfrak{E} , a eine Zahl) $Vf = U\varphi + a\psi_0$ ist — V ist offenbar linear; da φ zu φ_0 und $U\varphi$ zu ψ_0 orthogonal ist, ist

$\|f\|^2 = \|\varphi\|^2 + |a|^2$, $\|Vf\|^2 = \|U\varphi\|^2 + |a|^2$, also $\|Vf\| = \|f\|$, V längentreu; schließlich ist V echte Fortsetzung von U . Somit ist für die Maximalität von A kennzeichnend: $\mathfrak{E} = \mathfrak{R}_\infty$ oder $\mathfrak{F} = \mathfrak{R}_\infty$.

Ist dagegen A nicht maximal, so sind die abgeschlossenen Linear-mannigfaltigkeiten $\mathfrak{R}_\infty - \mathfrak{E}$, $\mathfrak{R}_\infty - \mathfrak{F}$ beide $\neq 0$, die sie aufspannenden normierten Orthogonalsysteme seien $\varphi_1, \dots, \varphi_p$ bzw. ψ_1, \dots, ψ_q (vgl. Satz 9. II. 2., es ist $p = 1, 2, \dots, \infty$, $q = 1, 2, \dots, \infty$, für p bzw. $q = \infty$ bricht die φ - bzw. die ψ -Reihe nicht ab). Sei $r = \text{Min}(p, q)$, dann definieren wir ein V in $[\mathfrak{E}, \varphi_1, \dots, \varphi_r]$ so: für $f = \varphi + \sum_1^r a_\nu \varphi_\nu$ (φ aus \mathfrak{E} , a_1, \dots, a_r Zahlen) ist $Vf = U\varphi + \sum_1^r a_\nu \psi_\nu$. Wieder erkennt man leicht, daß V linear und längentreu ist, sowie echte Fortsetzung von U . Sein Definitionsbereich ist $[\mathfrak{E}, \varphi_1, \dots, \varphi_r]$, also für $r = p$ gleich $[\mathfrak{E}, \mathfrak{R}_\infty - \mathfrak{E}] = \mathfrak{R}_\infty$; sein Wertevorrat ist $[\mathfrak{F}, \psi_1, \dots, \psi_r]$, also für $r = q$ gleich $[\mathfrak{F}, \mathfrak{R}_\infty - \mathfrak{F}] = \mathfrak{R}_\infty$ — eins von beiden ist also bestimmt gleich \mathfrak{R}_∞ . V sei die Cayleysche Transformierte des Hermiteschen Operators B , nach dem Gesagten ist B Fortsetzung von A und maximal. Man beachte: die φ und ψ sind auf unendlich viele Weisen wählbar (z. B. können wir ψ_1 durch jedes $\theta\psi_1$, $|\theta| = 1$, ersetzen), also auch V und B .

Damit haben wir das Eigenwertproblem zu Ende diskutiert, und zwar mit dem folgenden Resultat: Wenn es lösbar ist, so hat es nur eine Lösung, für nichtmaximale Operatoren ist es aber bestimmt unlösbar. Nichtmaximale Operatoren können immer auf unendlich viele verschiedene Weisen zu maximalen fortgesetzt werden (es handelt sich hier durchweg um abgeschlossenen Hermitesche). Die Maximalitätsbedingung ist aber nicht genau dieselbe wie die Lösbarkeitsbedingung des Eigenwertproblems: erstere lautet $\mathfrak{E} = \mathfrak{R}_\infty$ oder $\mathfrak{F} = \mathfrak{R}_\infty$, letztere $\mathfrak{E} = \mathfrak{R}_\infty$ und $\mathfrak{F} = \mathfrak{R}_\infty$.

Wir wollen diejenigen Operatoren, für die das erstere, aber nicht das letztere eintritt, d. h. diejenigen, für die das Eigenwertproblem unlösbar ist, und, da wegen der Maximalität keine echten Fortsetzungen existieren, dieser Zustand ein endgültiger ist, hier nicht näher untersuchen. Sie sind durch $\mathfrak{E} = \mathfrak{R}_\infty$, $\mathfrak{F} \neq \mathfrak{R}_\infty$ oder $\mathfrak{E} \neq \mathfrak{R}_\infty$, $\mathfrak{F} = \mathfrak{R}_\infty$ gekennzeichnet. Derartige Operatoren existieren in der Tat, und sie entstehen alle aus zwei einfachen Normalformen, so daß man sie, den maximalen Operatoren mit lösbarem Eigenwertproblem gegenübergestellt, als Ausnahmefälle ansehen kann. Näheres hierüber findet der Leser in der in Anm. ⁹⁵ genannten Abhandlung des Verfassers. Jedenfalls haben solche Operatoren vorläufig aus quantenmechanischen Betrachtungen auszuschneiden, denn die zu einem Hermiteschen Operator gehörige Zerlegung der Einheit spielt, wie wir im folgenden sehen werden, so wesentlich in alle quantenmechanischen Begriffsbildungen hinein,

daß wir auf ihre Existenz, d. h. auf die Lösbarkeit des Eigenwertproblems nicht verzichten können¹⁰⁵. Wir werden demgemäß in der Regel nur solche Hermitesche Operatoren zulassen, deren Eigenwertproblem lösbar ist, sie werden, da diese Eigenschaft eine Verschärfung der Maximalität ist, hypermaximal genannt¹⁰⁶: sie sind es, die den Zerlegungen der Einheit eineindeutig entsprechen.

Zum Schluß seien noch zwei Klassen von (abgeschlossenen) Hermiteschen Operatoren erwähnt, die bestimmt auch hypermaximal sind. Erstens die stetigen: denn diese sind überall sinnvoll, also maximal, und da ihr Eigenwertproblem nach HILBERT lösbar ist (vgl. a. a. O. Anm. ⁷⁰), sogar hypermaximal. Zweitens die in irgendeiner Realisation von \mathfrak{H}_∞ reellen Operatoren, falls sie maximal sind: denn der einzige Unterschied zwischen \mathfrak{E} , \mathfrak{F} bei ihrer Definition war das Vorzeichen von i , was, wenn alles andere reell ist, nichts ausmachen kann; daher folgt aus $\mathfrak{E} = \mathfrak{H}_\infty \supset \mathfrak{F} = \mathfrak{H}_\infty$ und umgekehrt, d. h. aus der Maximalität die Hypermaximalität. Ohne Voraussetzung der Maximalität können wir jedenfalls sagen, daß $\mathfrak{H}_\infty - \mathfrak{E}$ und $\mathfrak{H}_\infty - \mathfrak{F}$ gleichviel Dimensionen haben. Daher ist (in der w. o. bei der Untersuchung der Fortsetzbarkeitsverhältnisse verwendeten Terminologie) $p = q$, also $r = p = q$ und

$$[\mathfrak{E}, \varphi_1, \dots, \varphi_r] = [\mathfrak{E}, \mathfrak{H}_\infty - \mathfrak{E}] = \mathfrak{H}_\infty,$$

$$[\mathfrak{F}, \psi_1, \dots, \psi_r] = [\mathfrak{F}, \mathfrak{H}_\infty - \mathfrak{F}] = \mathfrak{H}_\infty,$$

d. h. die damals gewonnene Fortsetzung hypermaximal. Reelle Operatoren besitzen also jedenfalls hypermaximale Fortsetzungen. A. a. O. Anm. ⁹⁵ wird gezeigt, daß dasselbe für alle definiten Operatoren gilt.

10. Vertauschbare Operatoren.

Zwei Operatoren R, S sind auf Grund der in II. 4. gegebenen Definition vertauschbar, wenn $RS = SR$ gilt; und zwar müssen, wenn nicht beide überall sinnvoll sind, auch die Definitionsbereiche beider Seiten übereinstimmen. Wir beschränken uns zunächst auf Hermitesche Operatoren, und zwar, damit die Schwierigkeit mit den Definitionsbereichen nicht auftritt, auf überall sinnvolle — also auf stetige. Gleichzeitig mit R, S betrachten wir die zu ihnen gehörigen Zerlegungen der Einheit: $E(\lambda), F(\lambda)$.

Die Vertauschbarkeit von R, S bedeutet $(RSf, g) = (SRf, g)$ für alle f, g , d. h. $(Sf, Rg) = (Rf, Sg)$. Ferner folgt aus der Vertauschbarkeit von R, S auch diejenige von $R^n, S(n = 0, 1, 2, \dots)$, also auch für alle Polynome $p(x) = a_0 + a_1x + \dots + a_nx^n$ die von $p(R), S$.

Nun ist symbolisch

$$R = \int_{-c}^c \lambda dE(\lambda), \quad s(R) = \int_{-c}^c s(\lambda) dE(\lambda).$$

(C ist die in II. 9. für den stetigen Operator R , der dort A hieß, eingeführte Konstante; $s(x)$ irgendeine Funktion, vgl. II. 8., insbesondere Anm. ⁹⁴.) Für Polynome $s(x)$ gilt $(s(R)f, Sg) = (Sf, s(R)g)$, also

$$* \quad \int_{-C}^C s(\lambda) d(E(\lambda)f, Sg) = \int_{-C}^C s(\lambda) d(Sf, E(\lambda)g).$$

Da wir jede stetige Funktion $s(x)$ beliebig gut durch Polynome approximieren können (gleichmäßig in $-C \leq x \leq C$), gilt * auch noch für stetige $s(x)$. Sei nun $s(x) = \begin{cases} \lambda_0 - x, & \text{für } x \leq \lambda_0 \\ 0, & \text{für } x \geq \lambda_0 \end{cases}$, dann ergibt *:

$$\int_{-C}^{\lambda_0} (\lambda_0 - \lambda) d(E(\lambda)f, Sg) = \int_{-C}^{\lambda_0} (\lambda_0 - \lambda) d(Sf, E(\lambda)g).$$

Ersetzen wir hierin λ_0 durch $\lambda_0 + \varepsilon$ ($\varepsilon > 0$), so ergibt die Subtraktion und Division durch ε :

$$\begin{aligned} & \int_{-C}^{\lambda_0} d(E(\lambda)f, Sg) + \int_{\lambda_0}^{\lambda_0 + \varepsilon} \frac{\lambda - \lambda_0}{\varepsilon} d(E(\lambda)f, Sg) \\ &= \int_{-C}^{\lambda_0} d(Sf, E(\lambda)g) + \int_{\lambda_0}^{\lambda_0 + \varepsilon} \frac{\lambda - \lambda_0}{\varepsilon} d(Sf, E(\lambda)g), \end{aligned}$$

und $\varepsilon \rightarrow 0$ (man beachte $\overline{S_1}$!):

$$\begin{aligned} \int_{-C}^{\lambda_0} d(E(\lambda)f, Sg) &= \int_{-C}^{\lambda_0} d(Sf, E(\lambda)g), \\ (E(\lambda_0)f, Sg) &= (Sf, E(\lambda_0)g). \end{aligned}$$

Somit sind alle $E(\lambda_0)$, $-C \leq \lambda_0 \leq C$, mit S vertauschbar, die übrigen sind es aber erst recht, da für $\lambda_0 < -C$ bzw. $> C$ $E(\lambda_0) = 0$ bzw. 1 ist.

Also: wenn R mit S vertauschbar ist, so sind es auch alle $E(\lambda)$. Umgekehrt: sind alle $E(\lambda)$ mit S vertauschbar, so gilt * für jede Funktion $s(x)$, somit sind alle $s(R)$ mit S vertauschbar. Hieraus dürfen wir erstens folgern, daß R dann und nur dann mit S vertauschbar ist, wenn es alle $E(\lambda)$ sind; und zweitens, daß in diesem Falle auch alle Funktionen von R [die $s(R)$] mit S vertauschbar sind.

Nun ist aber ein $E(\lambda)$ mit S dann und nur dann vertauschbar, wenn dies für $E(\lambda)$ und alle $F(\mu)$ gilt (wir wenden unseren Satz auf $S, E(\lambda)$ — an Stelle von R, S — an). Also ist für die Vertauschbarkeit von R, S auch dies charakteristisch: alle $E(\lambda)$ sollen mit allen $F(\mu)$ vertauschbar sein. Ferner hat die Vertauschbarkeit von R, S nach obigem auch die von $r(R), S$ zur Folge, und dies [wenn wir R, S durch $S, r(R)$ ersetzen] auch diejenige von $r(R), s(S)$.

Sind die Hermiteschen Operatoren R, S nicht an die Bedingung der Stetigkeit gebunden, so ist die Situation verwickelter, da sich die Definitionsbereiche von RS und SR unübersichtlich gestalten können. So hat z. B. $R \cdot 0$ jedenfalls immer Sinn [es ist $0f = 0$, $R \cdot 0f = R(0f) = R0 \neq 0$], $0 \cdot R$ dagegen nur, wenn R Sinn hat (vgl. das in II. 5. hierzu Gesagte), also ist für nicht überall sinnvolles R infolge der Verschiedenheit der Definitionsbereiche $R \cdot 0 \neq 0 \cdot R$, d. h. genau genommen $R, 0$ unvertauschbar. Ein solcher Sachverhalt ist für unsere späteren Zwecke recht unangenehm: 0 sollte nicht nur mit den stetigen, sondern mit allen Hermiteschen Operatoren vertauschbar sein¹⁰⁷. Wir wollen darum für unstetige R, S die Vertauschbarkeit anders definieren; dabei beschränken wir uns auf die nach II. 9. ohnehin allein interessanten hypermaximalen R, S . Wir definieren: R, S sollen im neuen Sinne vertauschbar heißen, wenn es alle $E(\lambda)$ mit allen $F(\mu)$ (dies seien wieder ihre bzw. Zerlegungen der Einheit) im alten Sinne sind. Für stetige R, S ist die neue Festsetzung, wie wir wissen, mit der alten identisch, für unstetiges R oder S (oder beide) dagegen ist sie es u. U. nicht. Ein Beispiel für das letztere sind $R, 0$: im alten Sinne waren sie nicht vertauschbar, sie sind es aber im neuen, da für 0 jedes $F(\mu)$ gleich 0 oder 1 ist¹⁰⁸, also mit den $E(\lambda)$ vertauschbar.

Wir haben w. o. bewiesen: wenn R, S zwei vertauschbare (stetige) Hermitesche Operatoren sind, so ist jede Funktion $r(R)$ von R mit jeder Funktion $s(S)$ von S vertauschbar. Da die Prämisse für $R = S$ stets erfüllt ist, sind zwei Funktionen $r(R), s(R)$ desselben Operators stets vertauschbar [dies folgt auch aus der Multiplikationsformel am Ende von II. 8.: $r(R)s(R) = t(R)$ mit $r(x)s(x) \equiv t(x)$]. Wenn $r(x), s(x)$ reell sind, sind übrigens $r(R), s(R)$ Hermitesch [nach II. 8.: wenn $r(x)$ reell ist, ist $(r(R))^* = \bar{r}(R) = r(R)$].

Hiervon gilt nun auch die Umkehrung: Wenn A, B zwei vertauschbare Hermitesche Operatoren sind, so existiert ein Hermitescher Operator R , von dem beide Funktionen sind, d. h. $A = r(R), B = s(R)$. Es gilt sogar etwas mehr: wenn eine beliebige (endliche oder unendliche) Menge vertauschbarer Hermitescher Operatoren gegeben ist, A, B, C, \dots , so existiert ein Hermitescher Operator R , von dem alle A, B, C, \dots Funktionen sind. Wir können hier keinen Beweis dieses Satzes geben und können nur auf die Literatur des Gegenstandes verweisen¹⁰⁹. Für unsere Zwecke kommt dieser Satz nur für endlich viele A, B, C, \dots mit reinen Punktspektren in Frage. Im folgenden soll er für diesen Fall bewiesen werden, über den allgemeinen Fall können wir nur einige orientierende Bemerkungen geben.

Seien also A, B, C, \dots endlich viele Hermitesche Operatoren mit reinen Punktspektren. Wenn λ irgendeine Zahl ist, so heiße die durch alle Lösungen von $Af = \lambda f$ aufgespannte abgeschlossene Linearmannigfaltigkeit \mathfrak{L}_λ , ihr Projektionsoperator E_λ . λ ist dann und nur dann

Punkteigenwert von A , wenn Lösungen $f \neq 0$ existieren, also für $\mathfrak{L}_\lambda \neq (0)$, d. h. $E_\lambda \neq 0$. Entsprechend bilden wir zu B $\mathfrak{M}_\lambda, F_\lambda$, zu C $\mathfrak{N}_\lambda, G_\lambda, \dots$. Aus $Af = \lambda f$ folgt $ABf = BAf = B(\lambda f) = \lambda Bf$, d. h. mit f gehört auch Bf zu \mathfrak{M}_λ . Da $E_\lambda f$ stets zu \mathfrak{M}_λ gehört, tut es auch $BE_\lambda f$, somit ist $E_\lambda BE_\lambda f = BE_\lambda f$. Dies gilt identisch, also ist $E_\lambda BE_\lambda = BE_\lambda$; anwenden von $*$ ergibt daraus $E_\lambda BE_\lambda = E_\lambda B$, also ist $E_\lambda B = BE_\lambda$. Genau so, wie wir soeben aus der Vertauschbarkeit von A, B die von B, E_λ schlossen, folgt aus derjenigen von B, E_λ auch die von E_λ, F_μ . Da A, B unter den A, B, C, \dots in keiner Weise ausgezeichnet waren, können wir also sagen: alle $E_\lambda, F_\mu, G_\nu, \dots$ sind miteinander vertauschbar. Somit ist $K(\lambda\mu\nu\cdots) = E_\lambda F_\mu G_\nu \cdots$ auch ein Projektionsoperator, seine abgeschlossene Linearmannigfaltigkeit heie $\mathfrak{K}(\lambda\mu\nu\cdots)$. Nach Satz 14. (II. 4.) ist $\mathfrak{K}(\lambda\mu\nu\cdots)$ der Durchschnitt von $\mathfrak{L}_\lambda, \mathfrak{M}_\mu, \mathfrak{N}_\nu, \dots$ d. h. die Gesamtheit aller gemeinsamen Lsungen von

$$Af = \lambda f, Bf = \mu f, Cf = \nu f, \dots$$

Seien λ, μ, ν, \dots und $\lambda', \mu', \nu', \dots$ zwei verschiedene Zahlensysteme, d. h. $\lambda \neq \lambda'$, oder $\mu \neq \mu'$, oder $\nu \neq \nu', \dots$. Gehre f zu $\mathfrak{K}(\lambda\mu\nu\cdots)$, f' zu $\mathfrak{K}(\lambda'\mu'\nu'\cdots)$. f, f' sind orthogonal: fr $\lambda \neq \lambda'$ wegen $Af = \lambda f, A'f' = \lambda' f'$, fr $\mu \neq \mu'$ wegen $Bf = \mu f, B'f' = \mu' f', \dots$. Somit ist ganz $\mathfrak{K}(\lambda\mu\nu\cdots)$ zu ganz $\mathfrak{K}(\lambda'\mu'\nu'\cdots)$ orthogonal.

Da A ein reines Punktspektrum hat, spannen die \mathfrak{L}_λ ganz \mathfrak{R}_∞ auf (als abgeschlossene Linearmannigfaltigkeit). Ein $f \neq 0$ kann also nicht zu allen \mathfrak{L}_λ orthogonal sein, d. h. fr mindestens ein \mathfrak{L}_λ mu seine Projektion in $\mathfrak{L}_\lambda \neq 0$ sein, d. h. $E_\lambda f \neq 0$. Ebenso mu es ein μ mit $F_\mu f \neq 0$ geben, ferner ein ν mit $G_\nu f \neq 0, \dots$. Infolgedessen knnen wir zu jedem $f \neq 0$ ein λ mit $E_\lambda f \neq 0$ finden, sodann ein μ mit $F_\mu(E_\lambda f) \neq 0$, sodann ein ν mit $G_\nu(F_\mu E_\lambda f) \neq 0, \dots$. So ist schlielich $\cdots G_\nu F_\mu E_\lambda f \neq 0, E_\lambda F_\mu G_\nu \cdots f \neq 0, K(\lambda\mu\nu\cdots)f \neq 0$, d. h. f zu $\mathfrak{K}(\lambda\mu\nu\cdots)$ nicht orthogonal. Also: ein zu allen $\mathfrak{K}(\lambda\mu\nu\cdots)$ orthogonales f ist $= 0$. Somit spannen die $\mathfrak{K}(\lambda\mu\nu\cdots)$ zusammen als abgeschlossene Linearmannigfaltigkeit ganz \mathfrak{R}_∞ auf.

Sei nun $\varphi_{(\lambda\mu\nu\cdots)}^{(1)}, \varphi_{(\lambda\mu\nu\cdots)}^{(2)}, \dots$ ein normiertes Orthogonalsystem, das die abgeschlossene Linearmannigfaltigkeit $\mathfrak{K}(\lambda\mu\nu\cdots)$ aufspannt. [Diese Folge bricht ab oder nicht, je nachdem ob $\mathfrak{K}(\lambda\mu\nu\cdots)$ endlich oder unendlichvieldimensional ist; ist dagegen $\mathfrak{K}(\lambda\mu\nu\cdots) = 0$, so besteht sie aus 0 Gliedern.] Jedes $\varphi_{(\lambda\mu\nu\cdots)}^{(n)}$ gehrt zu einem $\mathfrak{K}(\lambda\mu\nu\cdots)$, ist also Eigenfunktion aller A, B, C, \dots . Zwei verschiedene $\varphi_{(\lambda\mu\nu\cdots)}^{(n)}$ sind zueinander immer orthogonal: wenn sie dasselbe λ, μ, ν, \dots -System haben, auf Grund ihrer Erzeugung; wenn sie verschiedene λ, μ, ν, \dots -Systeme haben, dann darum, weil sie zu verschiedenen $\mathfrak{K}(\lambda\mu\nu\cdots)$ gehren. Alle $\varphi_{(\lambda\mu\nu\cdots)}^{(n)}$ spannen dieselbe abgeschlossene Linearmannigfaltigkeit auf wie alle $\mathfrak{K}(\lambda\mu\nu\cdots)$: \mathfrak{R}_∞ . Somit bilden die $\varphi_{(\lambda\mu\nu\cdots)}^{(n)}$ ein vollstndiges normiertes Orthogonalsystem.

Wir haben also ein vollständiges normiertes Orthogonalsystem aus lauter gemeinsamen Eigenfunktionen von A, B, C, \dots hergestellt. Wir wollen es von nun an lieber ψ_1, ψ_2, \dots nennen, und die dazugehörigen Eigenwertgleichungen schreiben wir

$$A \psi_m = \lambda_m \psi_m, \quad B \psi_m = \mu_m \psi_m, \quad C \psi_m = \nu_m \psi_m, \dots$$

Wir nehmen nun irgendein System voneinander verschiedener Zahlen $\kappa_1, \kappa_2, \kappa_3, \dots$, und bilden einen Hermiteschen Operator R mit dem reinen Punktspektrum $\kappa_1, \kappa_2, \dots$ und den zugehörigen Eigenfunktionen ψ_1, ψ_2, \dots . D. h. es ist

$$R \left(\sum_1^{\infty} x_m \psi_m \right) = \sum_1^{\infty} x_m \kappa_m \psi_m. \quad 110$$

Nun sei $F(\kappa)$ eine in $-\infty < \kappa < +\infty$ definierte Funktion, für die $F(\kappa_m) = \lambda_m$ ($m = 1, 2, \dots$) gilt [an allen anderen Stellen κ mag $F(\kappa)$ beliebig sein]; ebenso $G(\kappa)$ eine Funktion mit $G(\kappa_m) = \mu_m$, $H(\kappa)$ eine mit $H(\kappa_m) = \nu_m, \dots$. Wir wollen zeigen, daß

$$A = F(R), \quad B = G(R), \quad C = H(R), \dots$$

ist.

Wir haben zu zeigen: wenn R ein reines Punktspektrum $\kappa_1, \kappa_2, \dots$ mit den Eigenfunktionen ψ_1, ψ_2, \dots hat, so hat $F(R)$ ein reines Punktspektrum $F(\kappa_1), F(\kappa_2), \dots$ mit denselben Eigenfunktionen ψ_1, ψ_2, \dots . Da aber diese ohnehin ein vollständiges normiertes Orthogonalsystem bilden, genügt es, $F(R) \psi_m = F(\kappa_m) \psi_m$ zu beweisen.

Sei nach II. 8. $E(\lambda) = \sum_{\kappa_m \leq \lambda} P_{[\psi_m]}$ die zu R gehörige Zerlegung der Einheit. Dann ist, wie wir wissen, symbolisch

$$R = \int \lambda dE(\lambda),$$

und nach Definition

$$F(R) = \int F(\lambda) dE(\lambda),$$

ferner $E(\lambda) \psi_m = \begin{cases} \psi_m, & \text{für } \kappa_m \leq \lambda \\ 0, & \text{für } \kappa_m > \lambda \end{cases}$. Hieraus folgt

$$(F(R) \psi_m, g) = \int F(\lambda) d(E(\lambda) \psi_m, g) = F(\kappa_m) \cdot (\psi_m, g)$$

für alle g , also wirklich $F(R) \psi_m = F(\kappa_m) \psi_m$.

Damit ist der Fall der reinen Punktspektren, wie angekündigt, erledigt. Im Falle der Streckenspektren müssen wir uns mit dem Hinweis von Anm. ¹⁰⁹ begnügen, es möge nur ein besonders charakteristischer Fall hervorgehoben werden.

Sei \mathfrak{R}_∞ der Raum aller $f(q_1 q_2)$ mit endlichem $\iint |f(q_1 q_2)|^2 dq_1 dq_2$, und zwar der q_1, q_2 -Variabilitätsbereich das Quadrat $0 \leq q_1, q_2 \leq 1$. Wir bilden die Operatoren $A = q_1 \dots$, $B = q_2 \dots$, sie sind Hermitesch, für diesen q_1, q_2 -Bereich auch stetig (bei $-\infty < q_1, q_2 < +\infty$ nicht!), ferner vertauschbar. Also müssen beide Funktionen eines R sein.

Dieses ist somit mit A, B vertauschbar, woraus, wie hier nicht näher ausgeführt werde, folgt, daß R die Form $s(q_1, q_2) \cdots [s(q_1, q_2)$ eine beschränkte Funktion] hat. Somit ist R^n ($n = 0, 1, 2, \dots$) gleich $(s(q_1, q_2))^n \cdots$, und $F(R)$ gleich $F(s(q_1, q_2)) \cdots$, falls $F(x)$ ein Polynom ist. Diese Formel läßt sich aber, worauf wir wiederum nicht näher eingehen können, auf alle $F(x)$ ausdehnen. $F(R) = A, G(R) = B$ hat also

$$F(s(q_1, q_2)) = q_1, \quad G(s(q_1, q_2)) = q_2$$

zur Folge¹¹¹. D. h. die zueinander reziproken Abbildungen $s(q_1, q_2) = x$ und $F(x) = q_1, G(x) = q_2$ müßten die Quadratfläche $0 \leq q_1, q_2 \leq 1$ auf die lineare Zahlenmenge der x eineindeutig abbilden — etwas, was der geometrischen Anschauung widerspricht.

Auf Grund unseres genannten Beweises wissen wir aber, daß dies dennoch möglich sein muß — und tatsächlich wird eine Abbildung von der gewünschten Art durch die sog. Peanosche Kurve vermittelt¹¹². Eine genauere Prüfung des in Anm. ¹⁰⁹ angeführten Beweises zeigt wirklich, daß derselbe im vorliegenden Falle auf die Peanosche Kurve, bzw. ihr verwandte Gebilde, führt.

11. Die Spur.

Einige wichtige Invarianten von Operatoren sollen hier definiert werden.

Bei einer Matrix $\{a_{\mu\nu}\}$ des \mathfrak{R}_n ist die Spur, $\sum_1^n a_{\mu\mu}$, eine solche. Sie ist unitär-invariant, d. h. sie ändert sich nicht, wenn man $\{a_{\mu\nu}\}$ in ein anderes (eartesisches) Koordinatensystem transformiert¹¹³. Ersetzen wir aber die Matrix $\{a_{\mu\nu}\}$ durch den entsprechenden Operator

$$A\{x_1, \dots, x_n\} = \{y_1, \dots, y_n\}, \quad y_\mu = \sum_1^n a_{\mu\nu} x_\nu,$$

so drücken sich die $a_{\mu\nu}$ mit Hilfe von A so aus: Die $\varphi_1 = \{1, 0, \dots, 0\}$, $\varphi_2 = \{0, 1, \dots, 0\}, \dots, \varphi_n = \{0, 0, \dots, 1\}$ bilden ein vollständiges und normiertes Orthogonalsystem, und es ist offenbar $a_{\mu\nu} = (A\varphi_\nu, \varphi_\mu)$ (vgl. II. 5., insbesondere Anm. ⁶⁰). Die Spur ist also $\sum_1^n (A\varphi_\mu, \varphi_\mu)$, und ihre Unitärinvarianz besagt, daß ihr Wert für jedes vollständige normierte Orthogonalsystem derselbe ist.

Diese Begriffsbildung können wir im \mathfrak{R}_∞ sofort analogisieren: sei A ein linearer Operator, wir nehmen irgendein vollständiges normiertes Orthogonalsystem $\varphi_1, \varphi_2, \dots$ für welches alle $A\varphi_\mu$ Sinn haben (dies ist gewiß erreichbar, wenn der Definitionsbereich von A überall dicht ist — es genügt eine in ihm dichte Folge f_1, f_2, \dots nach II. 2., Satz 8. zu orthogonalisieren), und setzen Spur $(A) = \sum_1^\infty (A\varphi_\mu, \varphi_\mu)$. Es ist zu zeigen, daß dies wirklich nur von A (und nicht von den φ_μ !) abhängt.

Zu diesem Zwecke führen wir zunächst zwei vollständige normierte Orthogonalsysteme $\varphi_1, \varphi_2, \dots$ und ψ_1, ψ_2, \dots ein, und setzen:

$$\text{Spur}(A; \varphi, \psi) = \sum_1^{\infty} \sum^{\mu, \nu} (A \varphi_{\mu}, \psi_{\nu}) (\psi_{\nu}, \varphi_{\mu}).$$

Aus II. 2., Satz 7. γ . folgt, daß dies gleich $\sum_1^{\infty} (A \varphi_{\mu}, \varphi_{\mu})$ ist, so daß es von den ψ_{ν} nur scheinbar abhängt. Ferner ist

$$\begin{aligned} \sum_1^{\infty} \sum^{\mu, \nu} (A \varphi_{\mu}, \psi_{\nu}) (\psi_{\nu}, \varphi_{\mu}) &= \sum_1^{\infty} \sum^{\mu, \nu} (\varphi_{\mu}, A^* \psi_{\nu}) (\psi_{\nu}, \varphi_{\mu}) \\ &= \overline{\sum_1^{\infty} \sum^{\mu, \nu} (A^* \psi_{\nu}, \varphi_{\mu}) (\varphi_{\mu}, \psi_{\nu})}, \end{aligned}$$

d. h. $\text{Spur}(A; \varphi, \psi) = \overline{\text{Spur}(A^*; \psi, \varphi)}$. Da die rechte Seite nach obigem nur scheinbar von den φ_{μ} abhängt, gilt dasselbe von der linken: ihre Abhängigkeit ist also sowohl von den φ_{μ} wie von den ψ_{ν} scheinbar, in Wahrheit also nur von A vorhanden. Wir dürfen somit $\text{Spur}(A; \varphi, \psi)$ mit $\text{Spur}(A)$ bezeichnen. Da es gleich $\sum_1^{\infty} (A \varphi_{\mu}, \varphi_{\mu})$ ist, ist der gewünschte Invarianzbeweis erbracht. Aus der letzten Gleichung aber folgt noch $\text{Spur}(A) = \overline{\text{Spur}(A^*)}$.

Die Relationen

$\text{Spur}(aA) = a \text{Spur}(A)$, $\text{Spur}(A \pm B) = \text{Spur}(A) \pm \text{Spur}(B)$
sind evident, ferner gilt (auch für unvertauschbare A, B)

$$\text{Spur}(AB) = \text{Spur}(BA).$$

Dies zeigt man so:

$$\begin{aligned} \text{Spur}(AB) &= \sum_1^{\infty} (AB \varphi_{\mu}, \varphi_{\mu}) = \sum_1^{\infty} (B \varphi_{\mu}, A^* \varphi_{\mu}) \\ &= \sum_1^{\infty} \sum^{\mu, \nu} (B \varphi_{\mu}, \psi_{\nu}) (\psi_{\nu}, A^* \varphi_{\mu}) = \sum_1^{\infty} \sum^{\mu, \nu} (B \varphi_{\mu}, \psi_{\nu}) (A \psi_{\nu}, \varphi_{\mu}), \end{aligned}$$

wobei $\varphi_1, \varphi_2, \dots$ und ψ_1, ψ_2, \dots zwei beliebige vollständige normierte Orthogonalsysteme sein können, und die Symmetrie dieses Ausdrucks in A, B (bei gleichzeitigem Vertauschen der φ, ψ) ist evident. Somit ist für Hermitesche Operatoren A, B

$$\begin{aligned} \text{Spur}(AB) &= \overline{\text{Spur}((AB)^*)} = \overline{\text{Spur}(B^*A^*)} \\ &= \overline{\text{Spur}(BA)} = \overline{\text{Spur}(AB)}, \end{aligned}$$

also $\text{Spur}(AB)$ reell [$\text{Spur}(A)$ ist es natürlich erst recht].

Wenn \mathfrak{M} eine abgeschlossene Linearmannigfaltigkeit ist, und E ihr Projektionsoperator, so bestimmt sich $\text{Spur}(E)$ so: Sei ψ_1, \dots, ψ_k ein normiertes Orthogonalsystem, das die abgeschlossene Linearmannigfaltigkeit \mathfrak{M} aufspannt, und χ_1, \dots, χ_l eines, das $\mathfrak{R}_{\infty} - \mathfrak{M}$ aufspannt (natürlich ist k oder l oder beide unendlich) — dann spannen

$\psi_1, \dots, \psi_k, \chi_1, \dots, \chi_l$ zusammen \mathfrak{R}_∞ auf, d. h. sie bilden ein vollständiges normiertes Orthogonalsystem (Satz 7. α . in II. 2.). Also ist

$$\begin{aligned} \text{Spur}(E) &= \sum_1^k (E \psi_\mu, \psi_\mu) + \sum_1^l (E \chi_\mu, \chi_\mu) = \sum_1^k (\psi_\mu, \psi_\mu) + \sum_1^l (0, \chi_\mu) \\ &= \sum_1^k 1 = k, \end{aligned}$$

d. h. $\text{Spur}(E)$ ist die Dimensionszahl von \mathfrak{R} .

Wenn A definit ist, so sind alle $(A \varphi_\mu, \varphi_\mu) \geq 0$, also $\text{Spur}(A) \geq 0$. Ist hierbei $\text{Spur}(A) = 0$, so müssen die $(A \varphi_\mu, \varphi_\mu)$ alle verschwinden, also ist $A \varphi_\mu = 0$ (Satz 19. in II. 5.). Falls $\|\varphi\| = 1$ ist, so können wir ein vollständiges normiertes Orthogonalsystem $\varphi_1, \varphi_2, \dots$ mit $\varphi_1 = \varphi$ finden (seien f_1, f_2, \dots überall dicht, wir „orthogonalisieren“ φ, f_1, f_2, \dots — vgl. den Beweis von Satz 7. in II. 2. — wodurch ein mit φ beginnendes vollständiges normiertes Orthogonalsystem entsteht), also ist $A \varphi = 0$. Ist nun f beliebig, so ist für $f = 0$ $A f = 0$ klar, für $f \neq 0$ folgt es aus dem Obigen mit $\varphi = \frac{1}{f} f$ — also ist $A = 0$. D. h.: wenn A definit und $\neq 0$ ist, so ist $\text{Spur}(A) > 0$.

Bei aller Kürze und Einfachheit unserer auf die Spur bezüglichen Betrachtungen sind dieselben mathematisch nicht einwandfrei. Wir haben nämlich Reihen $\sum_1^\infty (A \varphi_\mu, \psi_\nu) (\psi_\nu, \varphi_\mu)$ und $\sum_1^\infty (A \varphi_\mu, \varphi_\mu)$ ohne Rücksicht auf ihre Konvergenz betrachtet, ineinander umgeformt (umsummiert) — kurzum alles getan, was man korrekterweise nicht tun soll. Zwar kommen derartige Nachlässigkeiten in der theoretischen Physik auch sonst vor, und die vorliegende wird in unseren quantenmechanischen Anwendungen kein Unheil anrichten — es muß aber doch festgestellt werden, daß es sich um eine Nachlässigkeit handelt.

Um so wesentlicher ist es zu betonen, daß in den fundamentalen statistischen Aussagen der Quantenmechanik die Spur nur für Operatoren AB , A, B beide definit, verwendet wird — und daß dieser Begriff auch ganz exakt begründet werden kann. Im Rest dieses Paragraphen werden wir daher diejenigen Tatsachen über die Spur zusammenstellen, die in absoluter mathematischer Strenge beweisbar sind.

Wir betrachten zuerst die Spur von A^*A [A beliebig, A^*A ist nach II. 4. Hermitesch, und wegen $(A^*A f, f) = (A f, A f) \geq 0$ definit]. Es ist

$$\text{Spur}(A^*A) = \sum_1^\infty (A^*A \varphi_\mu, \varphi_\mu) = \sum_1^\infty (A \varphi_\mu, A \varphi_\mu) = \sum_1^\infty \|A \varphi_\mu\|^2.$$

Da diese Reihe lauter Glieder ≥ 0 hat, ist sie konvergent, oder gegen $+\infty$ divergent, also jedenfalls sinnvoll. Wir wollen nun unabhängig vom Bisherigen zeigen, daß ihre Summe von der Wahl der $\varphi_1, \varphi_2, \dots$ un-

abhängig ist. Dabei werden nur Reihen mit Gliedern ≥ 0 auftreten, also alles sinnvoll und jedes Umsummieren gestattet sein.

Seien $\varphi_1, \varphi_2, \dots$ und ψ_1, ψ_2, \dots zwei vollständige normierte Orthogonalsysteme, wir definieren:

$$\Sigma(A; \varphi_\mu, \psi_\nu) = \sum_1^{\infty} |\langle A \varphi_\mu, \psi_\nu \rangle|^2.$$

Nach Satz 7. γ . in II. 2. ist dies gleich $\sum_1^{\infty} \|A \varphi_\mu\|^2$, d. h. $\Sigma(A; \varphi_\mu, \psi_\nu)$ hängt nur scheinbar von den ψ_ν ab. Ferner ist (die $A \varphi_\mu$ und die $A^* \psi_\nu$ müssen sinnvoll sein)

$$\begin{aligned} \Sigma(A; \varphi_\mu, \psi_\nu) &= \sum_1^{\infty} |\langle A \varphi_\mu, \psi_\nu \rangle|^2 = \sum_1^{\infty} |\langle \varphi_\mu, A^* \psi_\nu \rangle|^2 \\ &= \sum_1^{\infty} |\langle A^* \psi_\nu, \varphi_\mu \rangle|^2 = \Sigma(A^*; \psi_\nu, \varphi_\mu). \end{aligned}$$

Also ist die Abhängigkeit von den φ_μ auch nur scheinbar, weil dies am rechten Ende der Formel der Fall ist. Somit hängt $\Sigma(A; \varphi_\mu, \psi_\nu)$ überhaupt nur von A ab, wir nennen es $\Sigma(A)$. Nach dem oben Bewiesenen ist

$$\Sigma(A) = \sum_1^{\infty} \|A \varphi_\mu\|^2 = \sum_1^{\infty} |\langle A \varphi_\mu, \psi_\nu \rangle|^2$$

und $\Sigma(A) = \Sigma(A^*)$. Damit ist Spur (A^*A) als $\Sigma(A)$ korrekt neudefiniert.

Wir beweisen noch unabhängig einige Eigenschaften von $\Sigma(A)$, die aus den schon hergeleiteten allgemeinen von Spur (A) ebenfalls folgen.

Aus der Definition folgt allgemein $\Sigma(A) \geq 0$, und für $\Sigma(A) = 0$ müssen alle $A \varphi_\mu = 0$ sein, woraus ebenso wie vorher $A = 0$ folgt. D. h.: für $A \neq 0$ ist $\Sigma(A) > 0$.

Es ist offenbar $\Sigma(aA) = |a|^2 \Sigma(A)$. Wenn $A^*B = 0$ ist, so gilt:

$$\begin{aligned} \|(A+B)\varphi_\mu\|^2 - \|A\varphi_\mu\|^2 - \|B\varphi_\mu\|^2 &= \langle A\varphi_\mu, B\varphi_\mu \rangle + \langle B\varphi_\mu, A\varphi_\mu \rangle \\ &= 2 \operatorname{Re} \langle A\varphi_\mu, B\varphi_\mu \rangle = 2 \operatorname{Re} \langle \varphi_\mu, A^*B\varphi_\mu \rangle = 0, \end{aligned}$$

also, nach Summation \sum_1^{∞} :

$$\Sigma(A+B) = \Sigma(A) + \Sigma(B).$$

Diese Relation ändert sich nicht, wenn wir A, B in ihr vertauschen — also gilt sie auch für $B^*A = 0$. Ferner können wir in ihr A, B durch A^*, B^* ersetzen: also ist $A^*B^* = 0$ oder $BA^* = 0$ gleichfalls hinreichend. Für Hermitesches A (oder B) können wir daher $AB = 0$ oder $BA = 0$ schreiben.

Wenn E der Projektionsoperator der abgeschlossenen Linear-mannigfaltigkeit \mathfrak{M} ist, so ist für die bei der Bestimmung von Spur (E)

betrachteten $\psi_1, \dots, \psi_k, \chi_1, \dots, \chi_l$:

$$\Sigma(E) = \sum_1^k \|E \psi_\mu\|^2 + \sum_1^l \|E \chi_\mu\|^2 = \sum_1^k \|\psi_\mu\|^2 + \sum_1^l \|0\|^2 = \sum_1^k 1 = k.$$

D. h. auch $\Sigma(E)$ ist die Dimensionszahl von \mathfrak{M} (wegen $E^*E = EE = E$ war dies auch nicht anders zu erwarten).

Für zwei definite (Hermitesche) Operatoren A, B ist nun Spur (AB) auf Σ zurückführbar. Es gibt nämlich zwei ebensolche Operatoren A', B' mit $A'^2 = A, B'^2 = B$ ¹⁴ — wir nennen sie \sqrt{A}, \sqrt{B} . Rein formal ist

$$\begin{aligned} \text{Spur}(AB) &= \text{Spur}(\sqrt{A} \sqrt{A} \sqrt{B} \cdot \sqrt{B}) = \text{Spur}(\sqrt{B} \cdot \sqrt{A} \sqrt{A} \sqrt{B}) \\ &= \text{Spur}((\sqrt{A} \sqrt{B})^* (\sqrt{A} \sqrt{B})) = \Sigma(\sqrt{A} \sqrt{B}). \end{aligned}$$

Und dieses $\Sigma(\sqrt{A} \sqrt{B})$ hat, auf Grund seiner eigenen Definition und ohne Berücksichtigung des Zusammenhanges mit der Spur, alle Eigenschaften, die man von Spur (AB) erwartet — nämlich:

$$\begin{aligned} \Sigma(\sqrt{A} \sqrt{B}) &= \Sigma(\sqrt{B} \sqrt{A}), \\ \Sigma(\sqrt{A} \sqrt{B+C}) &= \Sigma(\sqrt{A} \sqrt{B}) + \Sigma(\sqrt{A} \sqrt{C}), \\ \Sigma(\sqrt{A+B} \sqrt{C}) &= \Sigma(\sqrt{A} \sqrt{C}) + \Sigma(\sqrt{B} \sqrt{C}). \end{aligned}$$

Das erste folgt daraus, daß $\Sigma(XY)$ in X, Y symmetrisch ist:

$$\Sigma(XY) = \sum_1^{\infty} \mu, \nu |(XY \varphi_\mu, \psi_\nu)|^2 = \sum_1^{\infty} \mu, \nu |(Y \varphi_\mu, X \psi_\nu)|^2,$$

das zweite folgt auf Grund des ersten aus dem dritten, also ist nur dieses zu beweisen — d. h. daß $\Sigma(\sqrt{A} \sqrt{B})$ in A additiv ist. Dies erkennt man aber, wenn man $\Sigma(\sqrt{A} \sqrt{B})$ so schreibt:

$$\begin{aligned} \Sigma(\sqrt{A} \sqrt{B}) &= \sum_1^{\infty} \mu \|\sqrt{A} \sqrt{B} \varphi_\mu\|^2 = \sum_1^{\infty} \mu (\sqrt{A} \sqrt{B} \varphi_\mu, \sqrt{A} \sqrt{B} \varphi_\mu) \\ &= \sum_1^{\infty} \mu (\sqrt{A} \cdot \sqrt{A} \sqrt{B} \varphi_\mu, \sqrt{B} \varphi_\mu) = \sum_1^{\infty} \mu (A \sqrt{B} \varphi_\mu, \sqrt{B} \varphi_\mu). \end{aligned}$$

Damit ist die strenge Begründung des Begriffes der Spur im oben als erwünscht bezeichneten Umfange durchgeführt.

Die letztere Formel erlaubt übrigens auch zu schließen: wenn A, B definit sind, so ist $AB = 0$ Folge von Spur $(AB) = 0$. Denn letzteres besagt $\Sigma(\sqrt{A} \sqrt{B}) = 0$, also $\sqrt{A} \sqrt{B} = 0$ (vgl. das auf S. 96 Gesagte, oder auch die w. u. folgenden Betrachtungen über Σ), also $AB = \sqrt{A} \cdot \sqrt{A} \sqrt{B} \cdot \sqrt{B} = 0$.

Für einen definiten Hermiteschen Operator A ist das Rechnen mit der Spur sogar in der ursprünglichen Form korrekt. Sei nämlich $\varphi_1, \varphi_2, \dots$ ein vollständiges normiertes Orthogonalsystem, dann ist

$\sum_1^{\infty} (A \varphi_{\mu}, \varphi_{\mu})$ (die Summe, die die Spur definieren sollte!) eine Summe mit lauter Gliedern ≥ 0 , also konvergent oder eigentlich (gegen $+\infty$) divergent. Nun sind zwei Fälle möglich: entweder ist diese Summe bei jeder Wahl der $\varphi_1, \varphi_2, \dots$ unendlich, dann ist die Spur wirklich unabhängig von $\varphi_1, \varphi_2, \dots$ definiert, und zwar $+\infty$. Oder sie ist bei mindestens einer Wahl von $\varphi_1, \varphi_2, \dots$, etwa $\bar{\varphi}_1, \bar{\varphi}_2, \dots$ endlich. Dann ist wegen

$$\begin{aligned} \left(\sum_1^{\infty} (A \bar{\varphi}_{\mu}, \bar{\varphi}_{\mu})\right)^2 &= \sum_1^{\infty} (A \bar{\varphi}_{\mu}, \bar{\varphi}_{\mu}) (A \bar{\varphi}_{\nu}, \bar{\varphi}_{\nu}) \\ &\geq \sum_1^{\infty} |(A \bar{\varphi}_{\mu}, \bar{\varphi}_{\mu})|^2 = \sum(A) \end{aligned}$$

auch $\sum(A)$ endlich, etwa gleich C^2 . Ist ψ_1, ψ_2, \dots irgendein vollständiges normiertes Orthogonalsystem, so ist

$$\sum(A) = \sum_1^{\infty} \|A \psi_{\mu}\|^2 = C^2, \quad \|A \psi_1\|^2 \leq C^2, \quad \|A \psi_1\| \leq C.$$

Da jedes ψ mit $\|\psi\| = 1$ als ψ_1 eines solchen Systems wählbar ist, folgt aus $\|\psi\| = 1 \quad \|A \psi\| \leq C$. Somit ist allgemein $\|A f\| \leq C \cdot \|f\|$: für $f = 0$ ist dies evident, für $f \neq 0$ genügt es, $\psi = \frac{1}{\|f\|} \cdot f$ zu setzen. Somit erfüllt A die Bedingung **St.** aus II. 9., es ist ein stetiger Operator. Es gilt aber noch bedeutend mehr.

Wegen der Endlichkeit von $\sum(A)$ gehört nämlich A zur Klasse der sog. vollstetigen Operatoren, von denen HILBERT zeigte, daß ihr Eigenwertproblem in der ursprünglichen Form lösbar ist, d. h. daß ein vollständiges normiertes Orthogonalsystem ψ_1, ψ_2, \dots mit $A \psi_{\mu} = \lambda_{\mu} \psi_{\mu}$ existiert (und zwar ist für $\mu \rightarrow \infty$ $\lambda_{\mu} \rightarrow 0$)¹¹⁵. Wegen der Definität ist $\lambda_{\mu} = (A \psi_{\mu}, \psi_{\mu}) \geq 0$, ferner ist

$$\sum_1^{\infty} \lambda_{\mu}^2 = \sum_1^{\infty} \|A \psi_{\mu}\|^2 = \sum(A) = C^2.$$

Wenn $\varphi_1, \varphi_2, \dots$ irgendein vollständiges normiertes Orthogonalsystem ist, so ist

$$\begin{aligned} \sum_1^{\infty} (A \varphi_{\mu}, \varphi_{\mu}) &= \sum_1^{\infty} \left(\sum_1^{\infty} (A \varphi_{\mu}, \psi_{\nu}) (\psi_{\nu}, \varphi_{\mu}) \right) \\ &= \sum_1^{\infty} \left(\sum_1^{\infty} (\varphi_{\mu}, A \psi_{\nu}) (\psi_{\nu}, \varphi_{\mu}) \right) = \sum_1^{\infty} \left(\sum_1^{\infty} \lambda_{\nu} (\varphi_{\mu}, \psi_{\nu}) (\psi_{\nu}, \varphi_{\mu}) \right) \\ &= \sum_1^{\infty} \left(\sum_1^{\infty} \lambda_{\nu} |(\varphi_{\mu}, \psi_{\nu})|^2 \right). \end{aligned}$$

Da alles ≥ 0 ist, dürfen wir umsummieren:

$$\begin{aligned} \sum_1^{\infty} (A \varphi_{\mu}, \varphi_{\mu}) &= \sum_1^{\infty} \sum_{\nu} \lambda_{\nu} |(\varphi_{\mu}, \psi_{\nu})|^2 = \sum_{\nu} \lambda_{\nu} \left(\sum_1^{\infty} |(\varphi_{\mu}, \psi_{\nu})|^2 \right) \\ &= \sum_{\nu} \lambda_{\nu} \|\varphi_{\mu}\|^2 = \sum_1^{\infty} \lambda_{\nu}. \end{aligned}$$

In diesem Falle ist also $\sum_1^{\infty} (A\varphi_{\mu}, \varphi_{\mu})$ wieder von $\varphi_1, \varphi_2, \dots$ unabhängig, und zwar gleich der Summe der Eigenwerte. Da es für $\bar{\varphi}_1, \bar{\varphi}_2, \dots$ endlich ist, ist es also immer endlich. D. h.: Spur (A) ist wieder eindeutig, aber diesmal endlich.

Das Rechnen mit der Spur ist also in beiden Fällen gerechtfertigt.

Wir geben noch einige auf Spur (A) und $\Sigma(A)$ bezügliche Abschätzungen. Für alle A mit endlichem $\Sigma(A)$ galt $\|Af\| \leq \sqrt{\Sigma(A)} \cdot \|f\|$, für alle definiten (Hermiteischen) A mit endlicher Spur (A) $\|Af\| \leq \text{Spur}(A) \cdot \|f\|$. Sei nun weiter A definit, $\text{Spur}(A) = 1$, und für ein geeignetes φ mit $\|\varphi\| = 1$ $\|A\varphi\|^2 \geq 1 - \varepsilon$ oder $(A\varphi, \varphi) \geq 1 - \varepsilon$. Da wegen $(A\varphi, \varphi) \leq \|A\varphi\| \cdot \|\varphi\| = \|A\varphi\|$ aus dem zweiten das erste folgt [mit $(1 - \varepsilon)^2 \geq 1 - 2\varepsilon$ statt $1 - \varepsilon$, also 2ε statt ε], genügt es, dieses zu betrachten.

Sei ψ zu φ orthogonal, $\|\psi\| = 1$. Dann können wir ein vollständiges normiertes Orthogonalsystem χ_1, χ_2, \dots mit $\chi_1 = \varphi, \chi_2 = \psi$ finden, also:

$$\sum_1^{\infty} \|A\chi_{\mu}\|^2 \begin{cases} = \Sigma(A) \leq (\text{Spur}(A))^2 = 1, \\ \geq \|A\varphi\|^2 + \|A\psi\|^2 \geq 1 - 2\varepsilon + \|A\psi\|^2, \\ \|A\psi\|^2 \leq 2\varepsilon, \quad \|A\psi\| \leq \sqrt{2\varepsilon}. \end{cases}$$

Für ein beliebiges, zu φ orthogonales, f folgt hieraus $\|Af\| \leq \sqrt{2\varepsilon} \cdot \|f\|$ (für $f = 0$ klar, sonst $\psi = \frac{1}{\|f\|} \cdot f$). Wenn wir noch $(Af, g) = (f, Ag)$ beachten, so können wir sagen: es ist $|(Af, g)| \leq \sqrt{2\varepsilon} \cdot \|f\| \cdot \|g\|$, wenn f oder g orthogonal zu φ ist.

Seien nun f, g beliebig, dann ist

$$f = \alpha\varphi + f', \quad g = \beta\varphi + g',$$

wo f', g' zu φ orthogonal sind, und $\alpha = (f, \varphi), \beta = (g, \varphi)$. Somit ist

$$(Af, g) = \alpha\bar{\beta}(A\varphi, \varphi) + \alpha(A\varphi, g') + \bar{\beta}(Af', \varphi) + (Af', g'),$$

also, wenn wir $(A\varphi, \varphi) = c$ setzen,

$$|(Af, g) - c\alpha\bar{\beta}| \leq |\alpha| \cdot |(A\varphi, g')| + |\beta| \cdot |(Af', \varphi)| + |(Af', g')|,$$

und nach den obigen Abschätzungen:

$$\begin{aligned} |(Af, g) - c\alpha\bar{\beta}| &\leq \sqrt{2\varepsilon} \cdot (|\alpha| \cdot \|g'\| + |\beta| \cdot \|f'\| + \|f'\| \cdot \|g'\|) \\ &\leq \sqrt{2\varepsilon} \cdot (|\alpha| + \|f'\|) (\|\beta\| + \|g'\|) \leq 2\sqrt{2\varepsilon} \cdot \sqrt{|\alpha|^2 + \|f'\|^2} \sqrt{|\beta|^2 + \|g'\|^2} \\ &= 2\sqrt{2\varepsilon} \cdot \|f\| \cdot \|g\|. \end{aligned}$$

Andererseits ist

$$(Af, g) - c\alpha\bar{\beta} = (Af, g) - c(f, \varphi)(\varphi, g) = ((A - cP_{[\varphi]})f, g).$$

Somit gilt allgemein $|(A - cP_{[\varphi]})f, g| \leq 2\sqrt{2\varepsilon} \cdot \|f\| \cdot \|g\|$, also, wie

wir aus II. 9. wissen, auch

$$\|(A - c P_{[\varphi]})f\| \leq 2\sqrt{2\varepsilon} \cdot \|f\|.$$

Für $f = \varphi$ besagt dies ($c = (A\varphi, \varphi)$ ist reell und ≥ 0):

$$\|A\varphi - c\varphi\| \leq 2\sqrt{2\varepsilon},$$

$$c = \|c\varphi\| \begin{cases} \leq \|A\varphi - c\varphi\| + \|A\varphi\| \leq 2\sqrt{2\varepsilon} + 1, \\ \geq -\|A\varphi - c\varphi\| + \|A\varphi\| \geq -2\sqrt{2\varepsilon} + (1 - \varepsilon), \end{cases}$$

$$1 - (\varepsilon + 2\sqrt{2\varepsilon}) \leq c \leq 1 + 2\sqrt{2\varepsilon}.$$

Somit ist

$$\begin{aligned} \|(A - P_{[\varphi]})f\| &\leq \|(A - c P_{[\varphi]})f\| + \|(c - 1) P_{[\varphi]}f\| \\ &\leq 2\sqrt{2\varepsilon} \cdot \|f\| + (\varepsilon + 2\sqrt{2\varepsilon}) \|P_{[\varphi]}f\| \leq (\varepsilon + 4\sqrt{2\varepsilon}) \cdot \|f\|. \end{aligned}$$

Für $\varepsilon \rightarrow 0$ konvergiert also A gleichmäßig gegen $P_{[\varphi]}$.

Zum Schluß betrachten wir noch Spur (A) und $\Sigma(A)$ in den Realisationen F_Z und F_Ω von \mathfrak{R}_∞ (vgl. I. 4. und II. 3.), da die physikalischen Anwendungen in diesen erfolgen werden.

In F_Z (Menge aller $\{x_1, x_2, \dots\}$ mit endlichem $\sum_1^\infty |x_\mu|^2$) ist A durch eine Matrix $\{a_{\mu\nu}\}$ beschreibbar:

$$A\{x_1, x_2, \dots\} = \{y_1, y_2, \dots\}, \quad y_\mu = \sum_1^\infty a_{\mu\nu} x_\nu.$$

$\{1, 0, 0, \dots\}, \{0, 1, 0, \dots\}, \dots$ bilden ein vollständiges normiertes Orthogonalsystem $\varphi_1, \varphi_2, \dots$, und es ist $A\varphi_\mu = \{a_{1\mu}, a_{2\mu}, \dots\} = \sum_1^\infty a_{e\mu} \varphi_e$,

also $(A\varphi_\mu, \varphi_\mu) = a_{\mu\mu}$, $\|A\varphi_\mu\|^2 = \sum_1^\infty |a_{e\mu}|^2$. Hieraus folgt sofort:

$$\text{Spur } (A) = \sum_1^\infty a_{\mu\mu}, \quad \Sigma(A) = \sum_1^\infty |a_{\mu\nu}|^2.$$

In F_Ω (Menge aller in Ω definierten $f(P)$ mit endlichem $\int_\Omega |f(P)|^2 d\nu$) betrachten wir nur die Integraloperatoren

$$Af(P) = \int_\Omega a(P, P') f(P') d\nu'$$

($a(P, P')$ eine in Ω definierte Zweivariablen-Funktion, der „Integral-kern“ von A , vgl. I. 4.). Sei $\varphi_1(P), \varphi_2(P)$ irgendein vollständiges normiertes Orthogonalsystem, dann ist:

$$\text{Spur } (A) = \sum_1^\infty (A\varphi_\mu(P), \varphi_\mu(P)) = \sum_1^\infty \int_\Omega \left[\int_\Omega a(P, P') \varphi_\mu(P') d\nu' \right] \overline{\varphi_\mu(P)} d\nu,$$

und weil allgemein [Satz 7. β] in II. 2., angewendet auf $\overline{g(P)}$

$$\sum_1^{\infty} \mu \left(\int_{\Omega} \overline{g(P')} \overline{\varphi_{\mu}(P')} dv' \right) \varphi_{\mu}(P) = \overline{g(P)},$$

$$\sum_1^{\infty} \mu \left(\int_{\Omega} g(P') \varphi_{\mu}(P') dv' \right) \overline{\varphi_{\mu}(P)} = g(P)$$

gilt,

$$\text{Spur } (A) = \int_{\Omega} a(P, P) dv.$$

Ferner gilt

$$\Sigma(A) = \sum_1^{\infty} \mu \int_{\Omega} \left| \int_{\Omega} a(P, P') \varphi_{\mu}(P') dv' \right|^2 dv,$$

also wegen (Satz 7. γ), II. 2.)

$$\begin{aligned} \sum_1^{\infty} \mu \left| \int_{\Omega} g(P') \varphi_{\mu}(P') dv' \right|^2 &= \sum_1^{\infty} \mu \left| \int_{\Omega} \overline{g(P')} \overline{\varphi_{\mu}(P')} dv' \right|^2 \\ &= \int_{\Omega} |\overline{g(P')}|^2 dv' = \int_{\Omega} |g(P')|^2 dv', \end{aligned}$$

weiter

$$\Sigma(A) = \int_{\Omega} \int_{\Omega} |a(P, P')|^2 dv dv'.$$

Man sieht: $\text{Spur } (A)$, $\Sigma(A)$ bewirken das, was in I. 4. durch Anwendung mathematisch recht bedenklicher Kunstgriffe angestrebt wurde: beim Übergange von F_Z zu F_{Ω} wird $\sum_1^{\infty} \mu \dots$ durch $\int \dots dv$ ersetzt.

Damit sind wir mit unseren mathematischen Ausführungen über die Hermiteschen Operatoren fertig. Weiteres über diesen Gegenstand findet der mathematisch interessierte Leser in der einschlägigen Literatur¹¹⁶.

III. Die quantenmechanische Statistik.

1. Die statistischen Aussagen der Quantenmechanik.

Kehren wir zur Analyse der quantenmechanischen Theorien zurück, die wir durch die mathematischen Ausführungen des II. Teiles unterbrochen hatten. Dort wurde nur erörtert, wie die Quantenmechanik die Bestimmung aller möglichen Werte einer bestimmten physikalischen Größe, der Energie, ermöglicht — es sind die Eigenwerte des Energieoperators H (d. h. die Zahlen seines Spektrums). Unerörtert blieb dagegen, was sie über die Werte anderer Größen sowie über die kausalen oder statistischen Zusammenhänge zwischen den Werten mehrerer Größen auszusagen vermag. Die diesbezüglichen Aussagen der Theorie sollen nun ins Auge gefaßt werden. Bei dieser Gelegenheit legen wir die wellenmechanische Beschreibungsweise zugrunde — die Gleichwertigkeit beider Theorien ist ja gesichert.

Bei dieser Beschreibungsweise ist es klar, daß alles, was man über den Zustand eines Systems aussagen will, aus seiner Wellenfunktion $\varphi(q_1, \dots, q_k)$ herausgeholt werden muß. (Das System habe k Freiheitsgrade, q_1, \dots, q_k seien die Koordinaten seines Zustandsraumes.) Und zwar beschränken wir uns dabei nicht auf die stationären Zustände des Systems (Quantenbahnen, bei denen φ Eigenfunktion von H ist: $H\varphi = \lambda\varphi$, vgl. I. 3.), sondern lassen alle Zustände — d. h. Wellenfunktionen φ (die sich nach SCHRÖDINGERS zeitabhängiger Differentialgleichung ändern: $H\varphi = -\frac{\hbar}{2\pi i} \frac{\partial}{\partial t} \varphi$, vgl. I. 2.) — desselben zu. Welche Aussagen kann man nun über ein System, das sich im Zustande φ befindet, machen?

Vor allem bemerken wir: φ war (I. 3.) durch

$$\int_{-\infty}^{\infty} \dots \int_{-\infty}^{\infty} |\varphi(q_1 \dots q_k)|^2 dq_1 \dots dq_k = 1$$

normiert, d. h. in unserer jetzigen Terminologie, als Punkt des Hilbertschen Raumes \mathfrak{R}_∞ aller $f(q_1 \dots q_k)$ mit endlichem

$$\int_{-\infty}^{\infty} \dots \int_{-\infty}^{\infty} |f(q_1 \dots q_k)|^2 dq_1 \dots dq_k$$

(eines F_Ω !), durch $\|\varphi\| = 1$. D. h.: es soll auf der Einheitskugeloberfläche im Hilbertschen Raume liegen¹¹⁷. Wir wissen bereits, daß ein konstanter (d. h. von q_1, \dots, q_k unabhängiger) Faktor in φ physikalisch bedeutungslos ist. (D. h. das Ersetzen von φ durch $a\varphi$, a eine komplexe Zahl. Wegen der Normierung $\|\varphi\| = 1$ muß $|a| = 1$ sein.) Ferner sei noch darauf hingewiesen, daß φ außer den Koordinaten q_1, \dots, q_k des Zustandsraumes unseres Systems auch noch von der Zeit t abhängt, jedoch wird der Hilbertsche Raum nur im Hinblick auf q_1, \dots, q_k gebildet (weil sich auch die Normierung auf diese allein bezog), und die Abhängigkeit von t ist hierbei nicht zu beachten, vielmehr ist dieses als ein Parameter anzusehen. Infolgedessen hängt φ , als Punkt des \mathfrak{R}_∞ , von t ab, von den q_1, \dots, q_k ist es dagegen unabhängig: denn als Punkt von \mathfrak{R}_∞ repräsentiert es den gesamten q_1, \dots, q_k -Funktionsverlauf. Mit Rücksicht hierauf werden wir an φ manchmal, wenn es als \mathfrak{R}_∞ -Punkt gilt, den Parameter t andeuten: φ_t .

Betrachten wir nun den Zustand $\varphi = \varphi(q_1 \dots q_k)$. Die statistische Aussage, die dann gemacht werden kann, lautet so: das System befindet sich mit der Wahrscheinlichkeitsdichte $|\varphi(q_1 \dots q_k)|^2$ im Zustandsraum-Punkte q_1, \dots, q_k — d. h. die Wahrscheinlichkeit dafür, daß es sich im Stücke V des Zustandsraumes befindet, ist

$$\int_V \dots \int |\varphi(q_1 \dots q_k)|^2 dv.$$

(Dies ist eines der ersten und einfachsten Beispiele, an denen der statistische Charakter der Quantenmechanik erkannt wurde¹¹⁸; übrigens

ist der Zusammenhang zwischen dieser Aussage und SCHRÖDINGERS Ladungs-Verteilungsannahme, vgl. I. 2., klar.) Wenn ferner die Energie des Systems den Operator H hat, und dieser Operator die Eigenwerte $\lambda_1, \lambda_2, \dots$ und die Eigenfunktionen $\varphi_1, \varphi_2, \dots$ hat, so ist die Wahrscheinlichkeit des Energiewertes λ_n im Zustande φ gleich $|\int \dots \int \varphi(q_1 \dots q_k) \overline{\varphi_n(q_1 \dots q_k)} dq_1 \dots dq_k|^2$ (vgl. die in Anm. 118. genannten Abhandlungen). Wir wollen nun beide Aussagen umformen und in eine einheitliche Form bringen.

Sei V das k -dimensionale Quader

$$q'_1 < q_1 \leq q''_1, \dots, q'_k < q_k \leq q''_k,$$

wir nennen die Intervalle $\{q'_1, q''_1\}, \dots, \{q'_k, q''_k\}$ bzw. I_1, \dots, I_k . q_1, \dots, q_k haben bzw. die Operatoren $q_1 \dots, q_k \dots$, die zu diesen gehörigen Zerlegungen der Einheit sind so definiert (vgl. II. 8.): die zu q_j ($j = 1, \dots, k$) gehörige heiße $E_j(\lambda)$, es ist

$$E_j(\lambda) f(q_1 \dots q_k) = \begin{cases} f(q_1 \dots q_k), & \text{für } q_j \leq \lambda \\ 0, & \text{für } q_j > \lambda \end{cases}$$

Wir führen allgemein die folgende Bezeichnung ein: wenn $F(\lambda)$ eine Zerlegung der Einheit und I ein Intervall $\{\lambda', \lambda''\}$ ist, so ist $F(I) = F(\lambda'') - F(\lambda')$ (wegen $\lambda' \leq \lambda'', F(\lambda') \leq F(\lambda'')$ ein Projektionsoperator). Die Wahrscheinlichkeit dafür, daß das System im obigen V liegt, d. h. q_1 in I_1, \dots, q_k in I_k , beträgt:

$$\int_{q'_1}^{q''_1} \dots \int_{q'_k}^{q''_k} |\varphi(q_1 \dots q_k)|^2 dq_1 \dots dq_k \\ = \int \dots \int |E_1(I_1) \dots E_k(I_k) \varphi(q_1 \dots q_k)|^2 dq_1 \dots dq_k$$

(denn $E_1(I_1) \dots E_k(I_k) \varphi(q_1 \dots q_k)$ ist für q_1 aus I_1, \dots, q_k aus I_k gleich $\varphi(q_1 \dots q_k)$, sonst gleich 0), d. h.

$$= \|E_1(I_1) \dots E_k(I_k) \varphi\|^2.$$

Im zweiten Falle betrachten wir die Wahrscheinlichkeit dafür, daß die Energie im Intervalle I gleich $\{\lambda', \lambda''\}$ liegt. Die zu H gehörige Zerlegung der Einheit, $E(\lambda)$, ist so definiert (vgl. II. 8.): $E(\lambda) = \sum_{\lambda_n \leq \lambda} P_{[\varphi_n]}$, also ist

$$E(I) = E(\lambda'') - E(\lambda') = \sum_{\lambda' < \lambda_n \leq \lambda''} P_{[\varphi_n]}.$$

Die genannte Wahrscheinlichkeit aber ist, da nur die $\lambda_1, \lambda_2, \dots$ als Energiewerte in Frage kommen, die Summe der Wahrscheinlichkeiten aller λ_n mit $\lambda' < \lambda_n \leq \lambda''$, also:

$$\sum_{\lambda' < \lambda_n \leq \lambda''} \left| \int \dots \int \varphi(q_1 \dots q_k) \overline{\varphi_n(q_1 \dots q_k)} dq_1 \dots dq_k \right|^2 = \sum_{\lambda' < \lambda_n \leq \lambda''} |(\varphi, \varphi_n)|^2 \\ = \sum_{\lambda' < \lambda_n \leq \lambda''} (P_{[\varphi_n]} \varphi, \varphi) = \left(\sum_{\lambda' < \lambda_n \leq \lambda''} P_{[\varphi_n]} \right) \varphi, \varphi = (E(I) \varphi, \varphi) = \|E(I) \varphi\|^2.$$

In beiden Fällen haben wir also ein Resultat erzielt, das sich so formulieren läßt:

(**W.**) Die Wahrscheinlichkeit dafür, daß im Zustande φ die Größen mit den bzw. Operatoren R_1, \dots, R_l ¹¹⁹ Werte aus den bzw. Intervallen I_1, \dots, I_l annehmen, ist

$$\|E_1(I_1) \cdots E_l(I_l) \varphi\|^2,$$

wenn $E_1(\lambda), \dots, E_l(\lambda)$ die bzw. zu R_1, \dots, R_l gehörigen Zerlegungen der Einheit sind.

Der erste Fall entsprach $l = k$, $R_1 = q_1, \dots, R_k = q_k, \dots$, der zweite $l = 1$, $R_1 = H$. Wir wollen nun diese Aussage **W.** als allgemeingültig annehmen, sie enthält tatsächlich alle bisher gemachten statistischen Aussagen der Quantenmechanik.

Eine Einschränkung ihrer Gültigkeit ist immerhin notwendig. Da in der Fragestellung die Reihenfolge der R_1, \dots, R_l völlig gleichgültig ist, muß sie es auch im Resultat sein. D. h. die $E_1(I_1), \dots, E_l(I_l)$ oder auch alle $E_1(\lambda_1), \dots, E_l(\lambda_l)$ müssen vertauschbar sein. Nach II. 10. bedeutet dies: R_1, \dots, R_l sind miteinander vertauschbar. Diese Bedingung ist für q_1, \dots, q_k, \dots erfüllt, für $l = 1$, $R_1 = H$ wird sie sogar gegenstandslos.

Somit postulieren **W.** allgemein für vertauschbare R_1, \dots, R_l . Dann sind $E_1(I_1), \dots, E_l(I_l)$ vertauschbar, also $E_1(I_1) \cdots E_l(I_l)$ ein Projektionsoperator (Satz 14. in II. 4.), also die genannte Wahrscheinlichkeit

$$W = \|E_1(I_1) \cdots E_l(I_l) \varphi\|^2 = (E_1(I_1) \cdots E_l(I_l) \varphi, \varphi)$$

(Satz 12. in II. 4.).

Ehe wir weitergehen, müssen wir einige Eigenschaften an **W.** verifizieren, die bei jeder sinnvollen statistischen Theorie vorhanden sein müssen.

1. Die Reihenfolge der Behauptungen ist gleichgültig.

2. Nichtsägende Behauptungen können ohne Änderung von W hinzugefügt werden — d. h. solche, bei denen das Intervall I_j gleich $\{-\infty, +\infty\}$ ist, denn sie geben nur zum Entstehen eines Faktors

$$\text{Anlaß. } E_j(I) = E(+\infty) - E(-\infty) = 1 - 0 = 1$$

3. Das Additionstheorem der Wahrscheinlichkeiten gilt. D. h. wenn wir ein Intervall I_j in zwei Intervalle I'_j, I''_j zerlegen, so ist die alte Wahrscheinlichkeit die Summe der zwei neuen. Denn seien I_j, I'_j, I''_j bzw. $\{\lambda', \lambda''\}, \{\lambda', \lambda\}, \{\lambda, \lambda''\}$, dann ist

$$E(\lambda'') - E(\lambda') = (E(\lambda) - E(\lambda')) + (E(\lambda'') - E(\lambda)),$$

d. h. $E(I_j) = E(I'_j) + E(I''_j)$, was, im Hinblick auf die zweite der oben angegebenen Formen von W (die in $E_1(I_1) \cdots E_j(I_j) \cdots E_l(I_l)$ linear ist) die Additivität der Wahrscheinlichkeiten ergibt.

4. Für absurde Behauptungen (ein I_j leer) ist $W = 0$ — denn dann ist das entsprechende $E_j(I_j) = 0$. Für selbstverständliche Behauptungen (alle I_j gleich $\{-\infty, +\infty\}$) ist $W = 1$ — denn dann sind alle $E_j(I_j) = 1$, $W = \|\varphi\|^2 = 1$. Immer ist $0 \leq W \leq 1$ — wegen Satz 13. in II. 4.

Schließlich erwähnen wir, daß \mathbf{W} . die Aussage enthält, daß eine Größe R_j nur ihre Eigenwerte, d. h. die Zahlen ihres Spektrums, als Werte annehmen kann. Denn liegt das Intervall I_j gleich $\{\lambda', \lambda''\}$ außerhalb des Spektrums, so ist $E_j(\lambda)$ in ihm konstant, also

$$E_j(I_j) = E_j(\lambda'') - E_j(\lambda') = 0,$$

woraus $W = 0$ folgt.

Wir wollen nun $l = 1$ setzen und R_1 mit R bezeichnen. Die physikalische Größe, der R zugeordnet ist, heiße \mathfrak{R} (vgl. Anm. ¹¹⁹). Sei $F(\lambda)$ irgendeine Funktion, der Erwartungswert von $F(\mathfrak{R})$ soll berechnet werden.

Zu diesem Zwecke teilen wir das Intervall $\{-\infty, +\infty\}$ in eine Folge von Teilintervallen $\{\lambda_n, \lambda_{n+1}\}$, $n = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$, ein. Die Wahrscheinlichkeit dafür, daß \mathfrak{R} in $\{\lambda_n, \lambda_{n+1}\}$ liegt, ist

$$\{(E(\lambda_{n+1}) - E(\lambda_n)) \varphi, \varphi\} = (E(\lambda_{n+1}) \varphi, \varphi) - (E(\lambda_n) \varphi, \varphi),$$

und der Erwartungswert von $F(\mathfrak{R})$ somit

$$\sum_{-\infty}^{+\infty} F(\lambda'_n) \{(E(\lambda_{n+1}) \varphi, \varphi) - (E(\lambda_n) \varphi, \varphi)\},$$

wenn λ'_n ein geeigneter Zwischenwert aus $\{\lambda_n, \lambda_{n+1}\}$ ist. Diese Summen konvergieren aber, wenn wir die Einteilung $\dots, \lambda_{-2}, \lambda_{-1}, \lambda_0, \lambda_1, \lambda_2, \dots$ immer feiner wählen, gegen das Stieltjessche Integral

$$= \int_{-\infty}^{+\infty} F(\lambda) d(E(\lambda) \varphi, \varphi);$$

daher ist auch der genannte Erwartungswert ihm gleich. Auf Grund der allgemeinen Definition der Operatorenfunktionen in II. 8. ist aber dieses Integral gleich $(F(R) \varphi, \varphi)$. Somit ergibt sich:

(E_1 .) Sei \mathfrak{R} irgendeine physikalische Größe, R ihr Operator (vgl. Anm. ¹¹⁹), und $F(\lambda)$ eine beliebige Funktion. Dann gilt für den Erwartungswert von $F(\mathfrak{R})$ im Zustande φ :

$$\text{Erw}(F(\mathfrak{R}); \varphi) = (F(R) \varphi, \varphi).$$

Setzen wir insbesondere $F(\lambda) = \lambda$, so ist:

(E_2 .) Seien \mathfrak{R} , R wie vorhin. Dann gilt für den Erwartungswert von \mathfrak{R} im Zustande φ :

$$\text{Erw}(\mathfrak{R}; \varphi) = (R \varphi, \varphi).$$

Im folgenden sollen die Zusammenhänge zwischen \mathbf{W} ., E_1 ., E_2 . untersucht werden.

Wir folgerten aus W , E_1 , und aus E_1 , E_2 .

Wenn wir den Operator von $F(\mathfrak{N})$ mit S bezeichnen, so ergibt der Vergleich von E_1 , E_2 .

$$(S\varphi, \varphi) = (F(R)\varphi, \varphi)$$

für alle Zustände φ , d. h. für alle φ mit $\|\varphi\| = 1$. Somit ist allgemein

$$(Sf, f) = (F(R)f, f)$$

(für $f = 0$ klar, sonst $\varphi = \frac{1}{\|f\|} \cdot f$), also auch

$$(Sf, g) = (F(R)f, g)$$

(man ersetze f durch $\frac{f+g}{2}$ und $\frac{f-g}{2}$ und subtrahiere, dies ergibt die Gleichheit der Realteile; if, g statt f, g die der Imaginärteile). Also muß $S = F(R)$ sein. Wir formulieren dieses wichtige Resultat besonders:

(F.) Wenn die Größe \mathfrak{N} den Operator R hat, so muß die Größe $F(\mathfrak{N})$ den Operator $F(R)$ haben.

Unter Voraussetzung von F. folgt aber offenbar E_2 aus E_1 .

Somit sind (unter Voraussetzung von F.) E_1 , E_2 gleichwertige Aussagen, und wir wollen nun zeigen, daß sie auch W gleichwertig sind. Da sie aus W folgen, ist bloß nachzuweisen, daß W aus E_1 oder E_2 folgt.

Seien R_1, \dots, R_l vertauschbare Operatoren, zu den bzw. Größen $\mathfrak{N}_1, \dots, \mathfrak{N}_l$ gehörend. Nach II. 10. sind sie Funktionen eines Hermiteischen Operators R :

$$R_1 = F_1(R), \dots, R_l = F_l(R).$$

Wir nehmen an, daß auch R zu einer Größe \mathfrak{N} gehört. (Wir machen also die Annahme, daß zu jeder Größe \mathfrak{N} ein [hypermaximaler] Hermiteischer Operator R gehört, und umgekehrt. Vgl. Anm. 11⁹ und IV. 2.). Dann ist nach F.

$$\mathfrak{N}_1 = F_1(\mathfrak{N}), \dots, \mathfrak{N}_l = F_l(\mathfrak{N}).$$

Seien nun I_1, \dots, I_l die in W auftretenden Intervalle,

$$G_j(\lambda) = \begin{cases} 1 & \text{für } \lambda \text{ in } I_j \\ 0 & \text{sonst} \end{cases} \quad (j = 1, \dots, l).$$

Wir setzen

$$H(\lambda) = G_1(F_1(\lambda)) \cdots G_l(F_l(\lambda))$$

und bilden die Größe

$$\mathfrak{E} = H(\mathfrak{N}).$$

Falls \mathfrak{N}_j in I_j liegt, d. h. $F_j(\mathfrak{N})$ in I_j , so ist $G_j(F_j(\mathfrak{N}))$ gleich 1, sonst ist es gleich 0. $\mathfrak{E} = H(\mathfrak{N})$ ist also gleich 1, wenn alle \mathfrak{N}_j in ihren I_j liegen ($j = 1, \dots, l$), sonst ist es gleich 0. Der Erwartungswert von \mathfrak{E}

ist daher gleich der Wahrscheinlichkeit W dafür, daß \mathfrak{N}_1 in I_1 liegt, ..., \mathfrak{N}_l in I_l . Also:

$$W = \text{Erw}(\mathfrak{C}, \varphi) = (H(R) \varphi, \varphi) \\ = (G_1(F_1(R)) \cdots G_l(F_l(R)) \varphi, \varphi) = (G_1(R_1) \cdots G_l(R_l) \varphi, \varphi).$$

Die zu R_j gehörige Zerlegung der Einheit heiße wieder $E_j(\lambda)$, I_j sei das Intervall $\{\lambda'_j, \lambda''_j\}$, dann ist auf Grund des am Ende von II. 8. Gesagten und mit den dortigen Bezeichnungen:

$$G_j(\lambda) = e_{\lambda''_j}(\lambda) - e_{\lambda'_j}(\lambda), \\ G_j(R_j) = e_{\lambda''_j}(R_j) - e_{\lambda'_j}(R_j) = E_j(\lambda''_j) - E_j(\lambda'_j) = E_j(I_j);$$

und daher

$$W = (E_1(I_1) \cdots E_l(I_l) \varphi, \varphi).$$

Das ist aber gerade W .

Infolge der Einfachheit ihrer Form sind E_j , F besonders geeignet, als die Grundlagen angesehen zu werden, auf die die ganze Theorie aufgebaut wird. Wir sahen, daß die allgemeinstmögliche Wahrscheinlichkeitsaussage, W , aus ihnen folgt. Auffallend ist aber an dieser Aussage W zweierlei:

1. W ist statistisch, und nicht kausal, d. h. es gibt nicht an, welche Werte $\mathfrak{N}_1, \dots, \mathfrak{N}_l$ im Zustande φ besitzen, sondern nur mit welcher Wahrscheinlichkeit sie alle möglichen Werte annehmen.
2. Die Fragestellung von W kann nicht für beliebige Größen $\mathfrak{N}_1, \dots, \mathfrak{N}_l$ beantwortet werden, sondern nur für solche, deren Operatoren R_1, \dots, R_l miteinander vertauschbar sind.

Die Bedeutung dieser zwei Tatsachen zu diskutieren, ist unsere nächste Aufgabe.

2. Die statistische Deutung.

Die klassische Mechanik ist eine kausale Disziplin, d. h. wenn man den Zustand eines Systems in ihr genau kennt — wozu bei k Freiheitsgraden $2k$ Zahlenangaben nötig sind: die k Zustandsraumkoordinaten q_1, \dots, q_k und ihre k zeitlichen Ableitungen $\frac{\partial q_1}{\partial t}, \dots, \frac{\partial q_k}{\partial t}$, oder an Stelle derselben die k Impulse p_1, \dots, p_k — so kann man den Wert einer jeden physikalischen Größe (Energie, Drehmomente usw.) zahlenmäßig genau und eindeutig bestimmt angeben. Trotzdem existiert auch eine statistische Behandlungsweise der klassischen Mechanik, diese ist aber sozusagen ein Luxus, eine Zutat: Wenn man nämlich nicht alle $2k$ Bestimmungsstücke ($q_1, \dots, q_k, p_1, \dots, p_k$) kennt, sondern nur einige von diesen, und evtl. auch diese nicht ganz genau, so kann man, über die unbekannt gebliebenen Bestimmungsstücke in irgendeiner Weise mittelnd, wenigstens statistische Aussagen über alle physikalischen Größen machen. Entsprechendes gilt für die früheren oder

späteren Zustände des Systems: kennt man $q_1, \dots, q_k, p_1, \dots, p_k$ zur Zeit $t = t_0$, so kann man sie, mit Hilfe der klassisch-mechanischen Bewegungsgleichungen für jede andere Zeit t (kausal) berechnen; kennt man aber nur ein Teil von ihnen, so muß man über die übrigen mitteln, und kann für andere Zeitpunkte nur statistische Aussagen machen¹²⁰.

Die statistischen Aussagen, die wir in der Quantenmechanik vorfinden, haben einen anderen Charakter. Hier wird, im Falle von k Freiheitsgraden, der Zustand durch die Wellenfunktion $\varphi(q_1 \dots q_k)$ beschrieben — d. h. durch einen Punkt φ des geeignet realisierten \mathfrak{R}_∞ ($\|\varphi\| = 1$, ein Zahlenfaktor vom Absolutwert 1 ist unwesentlich). Obwohl wir also nach Angabe von φ den Zustand vollkommen zu kennen glauben, ermöglicht es doch nur statistische Aussagen über die Werte der physikalischen Größen.

Übrigens ist dieser statistische Charakter auf das Voraussagen der Werte physikalischer Größen beschränkt, die früheren und die späteren Zustände φ_t lassen aus $\varphi_{t_0} = \varphi$ kausal berechnen. Die zeitabhängige Schrödingersche Differentialgleichung (vgl. I. 2.) ermöglicht dies: denn

$$\varphi_{t_0} = \varphi, \quad \frac{\hbar}{2\pi i} \frac{\partial}{\partial t} \varphi_t = -H\varphi_t$$

bestimmen den ganzen Verlauf von φ_t . Die Auflösung dieser Differentialgleichung ist sogar im expliziter Form möglich:

$$\varphi_t = e^{-\frac{2\pi i}{\hbar}(t-t_0)H} \varphi$$

($e^{-\frac{2\pi i}{\hbar}(t-t_0)H}$ ist unitär)¹²¹. (In dieser Formel wurde H als zeitunabhängig vorausgesetzt, aber auch bei zeitabhängigem H ist φ_t eindeutig bestimmt, da die Differentialgleichung vom ersten Grade ist — nur gibt es dann keine so einfache Auflösungsformel mehr.)

Wenn man den akausalen Charakter der Verknüpfung zwischen φ und den Werten der physikalischen Größen nach dem Beispiel der klassischen Mechanik erklären will, so ist offenbar die folgende Auffassung die gegebene: In Wahrheit bestimmt φ gar nicht den Zustand genau, um diesen restlos zu kennen sind vielmehr noch weitere Zahlenangaben notwendig. D. h. das System hat neben φ noch weitere Bestimmungsstücke, weitere Koordinaten. Würde man diese alle kennen, so könnte man die Werte aller physikalischen Größen genau und bestimmt angeben — mit Hilfe von φ allein sind dagegen, genau so wie in der klassischen Mechanik auf Grund eines Teiles der $q_1, \dots, q_k, p_1, \dots, p_k$, nur statistische Aussagen möglich. Diese Auffassung ist natürlich nur hypothetisch, sie ist ein Versuch, dessen Wert davon abhängt, ob es gelingt, die zu φ hinzutretenden weiteren Koordinaten tatsächlich aufzufinden, und mit ihrer Hilfe eine kausale Theorie aufzubauen, welche mit der Erfahrung im Einklang steht, und bei alleiniger

Vorgabe von φ (und Mitteln über die übrigen Koordinaten) wieder die statistischen Aussagen der Quantenmechanik ergibt.

Diese hypothetischen weiteren Koordinaten pflegt man, da sie neben dem, durch die bisherige Forschung allein aufgedeckten, φ eine recht versteckte Rolle spielen müßten, als „verborgene Koordinaten“ oder „verborgene Parameter“ zu bezeichnen. Die Erklärung mittels der verborgenen Parameter hat in der klassischen Physik schon manches scheinbar statistische Verhalten auf die kausale Grundlage der Mechanik zurückgeführt — charakteristisch hierfür ist z. B. die kinetische Gastheorie (vgl. Anm. ¹²⁰).

Ob für die Quantenmechanik eine derartige Erklärung durch verborgene Parameter in Frage kommt, ist eine viel erörterte Frage. Die Ansicht, daß sie einmal in bejahendem Sinne zu beantworten sein wird, hat auch gegenwärtig hervorragende Vertreter. Sie würde, wenn sie berechtigt wäre, die heutige Form der Theorie zu einem Provisorium stempeln, da dann die φ -Beschreibung der Zustände wesentlich unvollständig wäre.

Wir werden später (IV. 2.) zeigen, daß eine Einführung von verborgenen Parametern gewiß nicht möglich ist, ohne die gegenwärtige Theorie wesentlich zu ändern. Vorläufig sei nur darauf hingewiesen, daß sich das φ darin ganz wesentlich von den Teilsystemen der $q_1, \dots, q_k, \dot{p}_1, \dots, \dot{p}_k$ in der klassischen Mechanik unterscheidet, daß seine Zeitabhängigkeit kausal, und nicht statistisch, ist: φ_{t_0} bestimmt, wie wir oben sahen, alle φ_t eindeutig.

Bis uns eine genauere Analyse der Aussagen der Quantenmechanik nicht in die Lage versetzen wird, die Möglichkeit der Einführung verborgener Parameter objektiv zu prüfen, was am oben a. O. erfolgen wird, wollen wir auf diese Erklärungsmöglichkeit verzichten. Wir nehmen also den entgegengesetzten Standpunkt ein. D. h. wir fügen uns in die Tatsache, daß diejenigen Naturgesetze, die die Elementarprozesse regeln (d. h. die Gesetze der Quantenmechanik) statistischer Natur sind. (Die Kausalität der makroskopischen Welt kann allenfalls durch die bei vielen gleichzeitig zusammenwirkenden Elementarprozessen fühlbar werdende nivellierende Wirkung des „Gesetzes der großen Zahlen“ vorgetäuscht werden. Vgl. die Bemerkung am Ende von Anm. ¹²⁰ und Anm. ¹⁷⁵.) Demgemäß erkennen wir W . (oder auch E_2 .) als weitestgehende Aussage über die Elementarprozesse an.

Diese Auffassung der Quantenmechanik, die ihre statistischen Aussagen als die wirkliche Form der Naturgesetze anerkennt und das Prinzip der Kausalität aufgibt, ist die sog. statistische Deutung. Sie stammt von M. BORN¹²², sie ist die einzige heute konsequent durchführbare Interpretation der Quantenmechanik — d. h. der Summe unserer auf die Elementarprozesse bezüglichen Erfahrungen — und ihr wollen wir uns im folgenden (bis wir nicht an die ausführliche Diskussion der Verhältnisse herantreten können) anschließen.

3. Gleichzeitige Meßbarkeit und Meßbarkeit im allgemeinen.

Der zweite Umstand, den wir am Ende von III. 1. als auffallend vermerkt hatten, hing damit zusammen, daß W . zwar nicht nur über diejenigen Wahrscheinlichkeiten Aufschluß gab, mit denen eine Größe \mathfrak{N} gegebene Zahlenwerte annimmt, sondern auch über Wahrscheinlichkeitszusammenhänge mehrerer Größen $\mathfrak{N}_1, \dots, \mathfrak{N}_l$ — W . gab ja die Wahrscheinlichkeiten dafür an, daß diese gleichzeitig gewisse gegebene Werte annehmen (genauer: in gewissen Intervallen I_1, \dots, I_l liegen). (Alles in einem gegebenen Zustande φ .) Aber diese Größen $\mathfrak{N}_1, \dots, \mathfrak{N}_l$ waren einer eigentümlichen Beschränkung unterworfen: ihre Operatoren R_1, \dots, R_l hatten vertauschbar zu sein. Im Falle unvertauschbarer R_1, \dots, R_l dagegen gab W . keinerlei Auskunft über die gegenseitigen Wahrscheinlichkeitsabhängigkeiten der $\mathfrak{N}_1, \dots, \mathfrak{N}_l$, es konnte nur dazu verwendet werden, die Wahrscheinlichkeitsverteilung einer jeden dieser Größen für sich, ohne Rücksicht auf die anderen, zu bestimmen.

Das Naheliegendste wäre anzunehmen, daß dies eine Unvollkommenheit von W . ist, und daß eine allgemeinere, auch diese Fälle umfassende Formel existieren muß. Denn wenn die Quantenmechanik auch nur statistische Auskünfte über die Natur erteilt, so ist doch das mindeste, was wir von ihr erwarten dürfen, nicht nur die Statistiken einzelner Größen zu beschreiben, sondern auch die Korrelationen zwischen mehreren zu erfassen.

Entgegen dieser, auf den ersten Blick billig erscheinenden, Auffassung werden wir aber alsbald erkennen, daß eine solche Verallgemeinerung von W . nicht möglich ist, und daß neben formalen (in der Struktur des mathematischen Werkzeugs der Theorie begründeten) auch schwerwiegende physikalische Gründe für eine derartige Einschränkung sprechen. Die Notwendigkeit dieser Einschränkung und ihre physikalische Deutung wird uns sogar wesentliche Einblicke in die Natur der Elementarprozesse ermöglichen.

Um diesbezüglich Klarheit zu erlangen, müssen wir näher untersuchen, was der Prozeß des Messens einer Größe \mathfrak{N} , über den W . eine (Wahrscheinlichkeits-) Aussage macht, für die quantenmechanische Beschreibungsweise bedeutet.

Zunächst werde auf ein wichtiges Experiment hingewiesen, das COMPTON und SIMONS noch vor der Aufstellung der Quantenmechanik ausführten¹²³. In diesem Versuch wurde Licht an Elektronen gestreut, und dieser Streuprozeß dadurch quantitativ kontrolliert, daß das gestreute Licht und die gestreuten Elektronen nachher aufgefangen, und ihre Energie sowie ihr Impuls gemessen wurden. D. h. es erfolgten Zusammenstöße zwischen Lichtquanten und Elektronen, und der

Beobachter konnte, indem er ihre Bahnen nach dem Zusammenstoße maß, prüfen, ob die Gesetze des elastischen Stoßes erfüllt sind. (Ein anderer als der elastische Stoß kommt nicht in Frage, da man weder vom Elektron noch vom Lichtquant glaubte, Energie in anderer Form als aufnehmen zu können, als kinetische Energie. Beide scheinen ja nach aller Erfahrung eindeutig festgelegte Strukturen zu sein! Die Stoßrechnung muß natürlich relativistisch angesetzt werden¹²³.) In der Tat war eine solche rechnerische Nachprüfung möglich: denn die Bahnen vor dem Stoße waren bekannt, die nach dem Stoße wurde beobachtet — also war das Stoßproblem überbestimmt. Um dasselbe mechanisch zu bestimmen, genügen ja 2 von diesen 4 Bahnen, und die „Zentrallinie“ des Stoßes (die Richtung der Impulsübertragung) — also allenfalls 3 Bahnen, die 4-te ist die Kontrolle. Das Experiment ergab eine vollkommene Bestätigung der mechanischen Stoßgesetze.

Dieses Ergebnis läßt sich, wenn man die Gültigkeit der Stoßgesetze anerkennt, und die Bahnen vor dem Stoße als bekannt ansieht, auch so formulieren: Sowohl die Messung der Bahn nach dem Stoße fürs Lichtquant als auch diejenige fürs Elektron genügt, um den Ort und die Zentrallinie des Stoßes zu berechnen. Das Compton-Simonssche Experiment zeigt nun, daß diese zwei Beobachtungen dasselbe Resultat ergeben.

Allgemeiner formuliert: dieselbe physikalische Größe (nämlich irgendeine Koordinate des Stoßortes oder der Zentrallinienrichtung) wird auf zwei verschiedene Weisen gemessen (durch Einfangen des Lichtquants und des Elektrons), das Resultat ist immer dasselbe.

Diese zwei Messungen erfolgen nicht ganz gleichzeitig (Lichtquant und Elektron kommen nicht auf einmal an, durch geeignete Anordnung der Meßapparate kann man dasjenige früher fangen, das man will — freilich handelt es sich um 10^{-9} — 10^{-10} Sekunden), die frühere heiße M_1 , die spätere M_2 ; die gemessene Größe \mathfrak{N} . Wesentlich ist nun folgendes: Obwohl die ganze Anordnung derart ist, daß man vor der Messung nur statistische Voraussagen über \mathfrak{N} , d. h. über M_1, M_2 , machen kann (vgl. a. a. O., Anm. ¹²³), ist die statistische Korrelation zwischen M_1, M_2 eine ganz scharfe (kausale): der \mathfrak{N} -Wert von M_1 ist dem von M_2 bestimmt gleich. Vor den Messungen M_1, M_2 sind also beide Meßresultate weitgehend unbestimmt; nachdem M_1 erfolgte, M_2 aber noch nicht, ist aber das Resultat von M_2 schon kausal-eindeutig festgelegt.

Vom prinzipiellen Standpunkte aus kann man sagen: An und für sich sind drei Stufen der Kausalität oder Akausalität denkbar. Erstens könnte \mathfrak{N} -s Wert ganz statistisch sein, d. h. das Resultat einer Messung nur statistisch voraussagbar; und wenn gleich nach der ersten Messung eine zweite vorgenommen wird, könnte diese, ohne Rücksicht auf den bei der ersten gefundenen Wert, wieder eine Streuung haben — z. B. evtl. genau so stark streuen wie die erste¹²⁴. Zweitens ist denkbar, daß

\mathfrak{N} -s Wert wohl bei der ersten Messung streut, aber jede unmittelbar nachfolgende Messung gezwungen ist, ein Resultat zu ergeben, das mit demjenigen der ersten übereinstimmt. Drittens könnte \mathfrak{N} von vornherein kausal bestimmt sein.

Das Compton-Simonssche Experiment zeigt nun, daß für eine statistische Theorie nur der zweite Fall in Frage kommt. Wenn sich also das System zunächst in einem Zustande befindet, in dem der Wert von \mathfrak{N} nicht mit Sicherheit vorausgesagt werden kann, so wird dieser Zustand durch eine Messung M von \mathfrak{N} (im obigen Beispiel M_1) in einen anderen Zustand übergeführt: nämlich in einen, in dem der Wert von \mathfrak{N} eindeutig feststeht. Der neue Zustand, in den M das System versetzt, hängt übrigens nicht nur von der Anordnung von M ab, sondern auch vom Meßresultat von M (das im alten Zustande nicht kausal vorausgesagt werden konnte) — denn der Wert von \mathfrak{N} im neuen Zustande muß ja gerade diesem M -Resultat gleich sein.

Sei nun \mathfrak{N} eine Größe, deren Operator R ein reines Punktspektrum hat, $\lambda_1, \lambda_2, \dots$, mit den bzw. Eigenfunktionen $\varphi_1, \varphi_2, \dots$, die also ein vollständiges normiertes Orthogonalsystem bilden. Und zwar möge jeder Eigenwert einfach sein (d. h. von der Vielfachheit 1, vgl. II. 6.), d. h. $\lambda_\mu \neq \lambda_\nu$ für $\mu \neq \nu$. Nehmen wir an, wir hätten \mathfrak{N} gemessen und einen Wert λ^* gefunden. Welcher ist der Zustand des Systems nach der Messung?

Nach dem vorhin Gesagten muß dieser Zustand φ derart sein, daß eine erneute Messung von \mathfrak{N} mit Gewißheit das Resultat λ^* ergibt. (Natürlich muß diese Messung sofort vorgenommen werden, denn nach τ Sekunden hat sich φ in $e^{-\frac{2\pi i}{h} \tau H} \varphi$ verwandelt. Vgl. III. 2., H ist der Energieoperator.)

Diese Frage, wann die Messung von \mathfrak{N} im Zustande φ mit Gewißheit den Wert λ^* ergibt, wollen wir allgemeiner, ohne einschränkende Annahmen über den Operator R beantworten.

Sei $E(\lambda)$ die zu R gehörige Zerlegung der Einheit, I ein Intervall $\{\lambda', \lambda''\}$. Unsere Annahme läßt sich auch so formulieren, daß \mathfrak{N} mit der Wahrscheinlichkeit 0 in I liegt, wenn dieses λ^* nicht enthält — oder: mit der Wahrscheinlichkeit 1, wenn λ^* zu I gehört, d. h. wenn $\lambda' < \lambda^* \leq \lambda''$ ist.

Nach **W.** besagt dies $\|E(I)\varphi\|^2 = 1$, oder, da $\|\varphi\| = 1$ ist, $\|E(I)\varphi\| = \|\varphi\|$. Da $E(I)$ ein Projektionsoperator ist, und $1 - E(I)$ auch, ist (Satz 13., II. 4.)

$$\|\varphi - E(I)\varphi\|^2 = \|\varphi\|^2 - \|E(I)\varphi\|^2 = 0,$$

$$\varphi - E(I)\varphi = 0,$$

$$E(\lambda'')\varphi - E(\lambda')\varphi = E(I)\varphi = \varphi.$$

$$\lambda' \rightarrow -\infty \text{ ergibt } E(\lambda'')\varphi = \varphi; \lambda'' \rightarrow +\infty \text{ } E(\lambda')\varphi = 0.$$

(Vgl. \widehat{S}_1 , II. 7.) Also:

$$E(\lambda)\varphi = \begin{cases} \varphi & \text{für } \lambda \geq \lambda^* \\ 0 & \text{für } \lambda < \lambda^* \end{cases}.$$

Nach II. 8. ist dies aber gerade für $R\varphi = \lambda^*\varphi$ charakteristisch.

Ein anderer Weg, $R\varphi = \lambda^*\varphi$ zu beweisen, beruht auf E_1 . (d. h. E_2 .) Daß \mathfrak{R} bestimmt den Wert λ^* hat, bedeutet, daß $(\mathfrak{R} - \lambda^*)^2$ den Erwartungswert 0 hat. D. h. der Operator $F(R)$ mit $F(\lambda) = (\lambda - \lambda^*)^2$, also $(R - \lambda^* \cdot 1)^2$. Es muß somit

$$\begin{aligned} ((R - \lambda^* \cdot 1)^2 \varphi, \varphi) &= ((R - \lambda^* \cdot 1) \varphi, (R - \lambda^* \cdot 1) \varphi) = \|(R - \lambda^* \cdot 1) \varphi\|^2 \\ &= \|R \varphi - \lambda^* \varphi\|^2 = 0 \end{aligned}$$

sein, d. h. $R\varphi = \lambda^*\varphi$.

Im vorhin behandelten Spezialfalle sehen wir also, daß $R\varphi = \lambda^*\varphi$ sein muß, was, wie wir in II. 6. diskutierten, die Folge hat, daß λ^* einem λ_μ gleich sein muß (wegen $\|\varphi\| = 1$ ist $\varphi \neq 0$), und $\varphi = a\varphi_\mu$. Wegen $\|\varphi\| = \|\varphi_\mu\| = 1$ muß noch $|a| = 1$ sein, also kann a ohne Änderung des Zustandes fortgelassen werden. Also: $\lambda^* = \lambda_\mu$, $\varphi = \varphi_\mu$ für irgendein $\mu = 1, 2, \dots$ (Die λ^* -Aussage hätten wir auch direkt aus \mathbf{W} . folgern können, nicht aber diejenige über φ !)

Unter den obigen Annahmen über R hat also eine Messung von \mathfrak{R} die Konsequenz, jeden Zustand ψ in einen der Zustände $\varphi_1, \varphi_2, \dots$ zu verwandeln, die bzw. mit den Meßresultaten $\lambda_1, \lambda_2, \dots$ verknüpft sind. Die Wahrscheinlichkeiten dieser Umwandlungen sind somit den Meßwahrscheinlichkeiten für $\lambda_1, \lambda_2, \dots$ gleich, und können daher aus \mathbf{W} . berechnet werden.

Die Wahrscheinlichkeit dafür, daß der Wert von \mathfrak{R} in I liegt, ist nämlich nach \mathbf{W} . $\|E(I)\psi\|^2$, also, wenn wir beachten, daß nach II. 8. $E(I) = \sum_{\lambda_n \text{ in } I} P_{[\varphi_n]}$ ist,

$$\begin{aligned} W &= \|E(I)\psi\|^2 = (E(I)\psi, \psi) = \sum_{\lambda_n \text{ in } I} (P_{[\varphi_n]}\psi, \psi) \\ &= \sum_{\lambda_n \text{ in } I} |(\psi, \varphi_n)|^2. \end{aligned}$$

Man wird daher vermuten, daß die Wahrscheinlichkeit für λ_n $|(\psi, \varphi_n)|^2$ beträgt. Wenn wir I so wählen können, daß das einzige in I liegende λ_m eben λ_n ist, so folgt dies direkt aus der obigen Formel. Andernfalls (d. h. wenn sich die übrigen λ_m bei λ_n häufen) können wir z. B. so schließen: Sei $F(\lambda)$ für $\lambda = \lambda_n$ gleich 1, sonst 0, die gesuchte Wahrscheinlichkeit W_n ist der Erwartungswert von $F(\mathfrak{R})$, also nach E_2 . (oder E_1 .) $(F(R)\psi, \psi)$. Nun ist nach Definition (II. 8.)

$$(F(R)\psi, \psi) = \int_{-\infty}^{\infty} F(\lambda) d(\|E(\lambda)\psi\|^2),$$

und man erkennt leicht, wenn man sich der Definition des Stieltjeschen Integrals erinnert, daß dies 0 ist, wenn $E(\lambda)\psi$ für $\lambda = \lambda_n$ stetig

ist (in $\lambda!$), und allgemein der Sprung der (monoton-nichtfallenden) λ -Funktion $\|E(\lambda)\psi\|^2$ an der Stelle $\lambda = \lambda_n$ ist. Dieser ist aber gleich $\|P_{\mathfrak{M}}\psi\|^2$, wenn \mathfrak{M} die durch alle Lösungen von $R\psi = \lambda_n\psi$ aufgespannte abgeschlossene Linearmannigfaltigkeit ist (vgl. II. 8.). Im vorliegenden Falle ist $\mathfrak{M} = [\varphi_n]$, also

$$W_n = \|P_{[\varphi_n]}\psi\|^2 = |(\psi, \varphi_n)|^2.$$

Damit ist die Frage, was sich bei der Messung einer Größe \mathfrak{N} ereignet, unter den obigen Voraussetzungen für ihren Operator R , beantwortet. Freilich bleibt vorläufig das „wie“ ungeklärt: dieser unstetige, sprunghafte Übergang aus ψ in einen der Zustände $\varphi_1, \varphi_2, \dots$ (die von ψ unabhängig sind, denn nur in die bzw. Wahrscheinlichkeiten $W_n = |(\psi, \varphi_n)|^2, n = 1, 2, \dots$, dieser Sprünge geht ψ ein) ist sicher nicht von der Art, wie es die zeitabhängige Schrödingersche Differentialgleichung beschreibt. Vermittelt doch diese stets eine stetige Änderung von ψ , bei der das Endresultat eindeutig bestimmt und von ψ abhängig ist (vgl. das in III. 2. Gesagte)! Wir werden erst später versuchen, diese Kluft zu überbrücken (vgl. VI.)¹²⁵.

Nehmen wir immer noch an, daß R ein reines Punktspektrum hat, fordern wir aber nicht mehr die Einfachheit aller Eigenwerte. Dann können wir wieder die $\varphi_1, \varphi_2, \dots$ und $\lambda_1, \lambda_2, \dots$ bilden, unter den λ_n dürfen aber gleiche vorkommen. Nach einer Messung von \mathfrak{N} liegt bestimmt ein Zustand φ mit $R\varphi = \lambda^*\varphi$ vor (λ^* ist das Meßresultat), somit ist λ^* einem λ_n gleich, von φ können wir aber nur dies aussagen: die λ^* gleichen λ_n seien $\lambda_{n_1}, \lambda_{n_2}, \dots$ (ihre Anzahl ist endlich oder unendlich), dann ist

$$\varphi = \sum_{\nu} a_{\nu} \varphi_{n_{\nu}}.$$

(Wenn es unendlich viele n_{ν} -s gibt, muß $\sum_{\nu} |a_{\nu}|^2$ endlich sein.) Denselben Zustand repräsentieren zwei solche φ nur, wenn sie sich nur durch einen Zahlenfaktor unterscheiden, d. h. wenn das Verhältnis $a_1 : a_2 : \dots$ dasselbe ist. Sobald also mehr als ein n_{ν} existiert, d. h. wenn der Eigenwert λ^* mehrfach ist, ist der Zustand φ nach der Messung auch durch die Kenntnis des Meßresultats nicht eindeutig festgelegt.

Die Wahrscheinlichkeit von λ^* berechnet man (nach \mathbf{W} . bzw. \mathbf{E}_1 . oder \mathbf{E}_2 .), genau wie vorhin, zu

$$W(\lambda^*) = \sum_{\lambda_n = \lambda^*} |(\psi, \varphi_n)|^2 = \sum_{\nu} |(\psi, \varphi_{n_{\nu}})|^2.$$

Wenn R kein reines Punktspektrum hat, liegen die Verhältnisse so.

Alle Lösungen f von $Rf = \lambda f$ spannen eine abgeschlossene Linearmannigfaltigkeit \mathfrak{M}_{λ} auf, alle \mathfrak{M}_{λ} zusammen eine weitere $\overline{\mathfrak{M}}$, und für das Nichtvorhandensein eines reinen Punktspektrums ist $\overline{\mathfrak{M}} \neq \mathfrak{R}_{\infty}$, d. h. $\overline{\mathfrak{M}} = \mathfrak{R}_{\infty} - \overline{\mathfrak{M}} \neq (0)$, charakteristisch. (Vgl. hierzu, wie zum folgenden, II. 8.) \mathfrak{M}_{λ} ist höchstens für eine Folge von λ -s $\neq (0)$, diese

bilden das Punktspektrum von R . Wenn wir \mathfrak{N} im Zustande ψ messen, so ist die Wahrscheinlichkeit dafür, daß das Meßresultat λ^* sein wird,

$$W(\lambda^*) = \|P_{\mathfrak{M}_{\lambda^*}} \psi\|^2 = (P_{\mathfrak{M}_{\lambda^*}} \psi, \psi);$$

hierzu verwendet man zweckmäßigerweise die w. o. benützte, auf E_2 (oder E_1 .) und der Funktion

$$F(\lambda) = \begin{cases} 1, & \text{für } \lambda = \lambda^* \\ 0, & \text{für } \lambda \neq \lambda^* \end{cases}$$

beruhende Schlußweise. Die Wahrscheinlichkeit dafür, daß der Wert von \mathfrak{N} irgendein λ^* des Punktspektrums \mathfrak{P} von R sein wird, ist entsprechend

$$W = \sum_{\lambda^* \text{ in } \mathfrak{P}} (P_{\mathfrak{M}_{\lambda^*}} \psi, \psi) = (P_{\mathfrak{M}} \psi, \psi) = \|P_{\mathfrak{M}} \psi\|^2;$$

man kann dies auch direkt mit Hilfe der Funktion

$$F(\lambda) = \begin{cases} 1, & \text{für } \lambda^* \text{ aus } \mathfrak{P} \\ 0, & \text{sonst} \end{cases}$$

einsehen.

Wenn wir aber \mathfrak{N} genau messen, so muß nachher ein Zustand φ mit $R\varphi = \lambda^*\varphi$ vorliegen, also das Meßresultat λ^* zu \mathfrak{P} gehören — die Wahrscheinlichkeit für das Gelingen einer exakten Messung ist also (höchstens) $\|P_{\mathfrak{M}} \psi\|^2$. Diese Zahl ist aber nicht immer 1, für die ψ von \mathfrak{N} ist sie sogar 0 — also ist eine genaue Messung nicht immer möglich.

Wir sahen: eine Größe \mathfrak{N} kann dann und nur dann immer (d. h. in jedem Zustande ψ) genau gemessen werden, wenn sie ein reines Punktspektrum besitzt. Besitzt sie keines, so kann sie also nur mit beschränkter Genauigkeit gemessen werden, d. h. man kann die Zahlengerade $-\infty < \lambda < +\infty$ in Intervalle $\dots, I^{(-2)}, I^{(-1)}, I^{(0)}, I^{(1)}, I^{(2)}, \dots$ einteilen (die Teilpunkte seien $\dots, \lambda^{(-2)}, \lambda^{(-1)}, \lambda^{(0)}, \lambda^{(1)}, \lambda^{(2)}, \dots, I^{(n)} = \{\lambda^{(n)}, \lambda^{(n+1)}\}$; die maximale Intervalllänge $\varepsilon = \text{Max}(\lambda^{(n+1)} - \lambda^{(n)})$, oder Maschenweite der Teilung, ist die Meßgenauigkeit), und entscheiden, in welchem Intervalle \mathfrak{N} liegt. Dieser letztere Vorgang kann rechnerisch weiter verfolgt werden. Sei nämlich $F(\lambda)$ die folgende Funktion (λ'_n irgendein Zwischenwert aus $I^{(n)}$, der für jedes $n = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$ beliebig, aber fürs Folgende fest gewählt werde):

$$F(\lambda) = \lambda'_n, \quad \text{wenn } \lambda \text{ in } I^{(n)} \text{ liegt.}$$

Dann kommt die angenäherte Messung von \mathfrak{N} der genauen Messung von $F(\mathfrak{N})$ gleich. Nun ist

$$\begin{aligned} F(R) &= \int_{-\infty}^{+\infty} F(\lambda) dE(\lambda) = \sum_{n=-\infty}^{+\infty} \int_{\lambda^{(n)}}^{\lambda^{(n+1)}} F(\lambda) dE(\lambda) \\ &= \sum_{n=-\infty}^{+\infty} \lambda'_n \int_{\lambda^{(n)}}^{\lambda^{(n+1)}} dE(\lambda) = \sum_{n=-\infty}^{+\infty} \lambda'_n E(I^{(n)}). \end{aligned}$$

Offenbar gilt für alle f der zu $E(I^{(n)})$ gehörenden abgeschlossenen Linearmannigfaltigkeit $F(R)f = \lambda'_n f$, d. h. für $F(R)$ enthält $\mathfrak{M}_{\lambda'_n}$ dieselbe. Somit ist $P_{\mathfrak{M}_{\lambda'_n}} \geq E(I^{(n)})$, also

$$P_{\mathfrak{M}} \geq \sum_{n=-\infty}^{+\infty} P_{\mathfrak{M}_{\lambda'_n}} \geq \sum_{n=-\infty}^{+\infty} E(I^{(n)}) = \sum_{n=-\infty}^{+\infty} (E(\lambda^{(n+1)}) - E(\lambda^{(n)})) = 1 - 0 = 1.$$

Hieraus folgt

$$\sum_{n=-\infty}^{+\infty} P_{\mathfrak{M}_{\lambda'_n}} = P_{\mathfrak{M}} = 1, \quad P_{\mathfrak{M}_{\lambda'_n}} = E(I_n),$$

d. h. $F(R)$ hat ein reines Punktspektrum, und dasselbe besteht aus den λ'_n .

Also ist $F(\mathfrak{R})$ wirklich genau meßbar, und die Wahrscheinlichkeit dafür, daß sein Wert λ'_n ist, d. h. daß derjenige von \mathfrak{R} in $I^{(n)}$ liegt, ist

$$\| P_{\mathfrak{M}_{\lambda'_n}} \psi \|^2 = \| E(I^{(n)}) \psi \|^2,$$

im Einklang mit der Aussage von **W.** für \mathfrak{R} .

Dieses Resultat läßt sich übrigens auch physikalisch deuten, und es läßt eine gute Übereinstimmung der Theorie mit der gewöhnlichen physikalischen Anschauung erkennen.

Bei der Betrachtungsweise der klassischen Mechanik (ohne irgendwelche Quantenbedingungen) schreibt man zwar jeder Größe \mathfrak{R} in jedem Zustande einen vollkommen bestimmten Wert zu, aber man erkennt gleichzeitig, daß jeder denkbare Meßapparat infolge der Unvollkommenheiten der menschlichen Beobachtungsgabe (die einen Zeiger oder die Schwärzung einer photographischen Platte nur mit beschränkter Genauigkeit abzulesen bzw. zu lokalisieren vermag) diesen Wert nur mit einer gewissen, nie verschwindenden, Fehlergrenze ermitteln kann. Diese Fehlergrenze läßt sich zwar, durch genügende Verfeinerung der Meßanordnung, beliebig nahe an 0 herunterdrücken — genau gleich 0 aber wird sie nie. Man wird erwarten, daß dies auch in der Quantentheorie für jene Größen \mathfrak{R} so sein wird, die nach dem anschaulichen Bilde, das man sich von diesen Dingen (besonders vor der Entdeckung der Quantenmechanik) zu machen pflegte, nicht gequantelt sind: z. B. für die cartesischen Koordinaten eines Elektrons (die jeden Wert zwischen $-\infty$ und $+\infty$ annehmen können, ihre Operatoren haben Streckenspektren). Für jene Größen dagegen, die (auf Grund der anschaulichen Vorstellung) „gequantelt“ sind, ist es umgekehrt: da diese nur diskreter Werte fähig sind, genügt es, sie so genau zu beobachten, daß kein Zweifel mehr darüber besteht, welcher der „gequantelten“ Werte in Frage kommt — dieser wird dann bestimmt absolut genau angenommen. Z. B.: Wenn man von einem Wasserstoffatom weiß, daß es weniger Energie enthält, als zum zweitiefsten Energieniveau notwendig ist, so kennt man seinen Energieinhalt absolut genau: es ist das tiefste Energieniveau.

Diese Einteilung in „gequantelte“ und „ungequantelte“ Größen entspricht aber, wie es schon die Verhältnisse der „Matrizentheorie“ (vgl. I. 2. und II. 6.) zeigen, der Einteilung in Größen \mathfrak{H} mit einem Operator R , der ein reines Punktspektrum hat, bzw. der nicht so ist. Und gerade für die ersteren, und nur diese, fanden wir die Möglichkeit einer absolut genauen Beobachtung — während die letzteren nur mit beliebig großer (aber nie mit absoluter) Genauigkeit beobachtet werden konnten¹²⁶.

(Nebenbei sei erwähnt, daß die in der Einleitung, sowie in I. 3., erwähnte Einführung „uneigentlicher“ oder nicht zum Hilbertschen Raume gehöriger Eigenfunktion — vgl. auch II. 8., insbesondere die Anm. ⁸⁴, ⁸⁶ — gerade hier die Wirklichkeit schlechter wiedergibt als unser Verfahren. Denn sie täuscht die Existenz solcher Zustände vor, in denen Größen mit Streckenspektrum gewisse Werte genau annehmen, obwohl gerade dies nie vorkommt. Wir glauben, neben ihrer mathematischen Unhaltbarkeit, auch aus diesem Grunde derartige Idealisierungen ablehnen zu müssen, obwohl diese mehrfach vorge schlagen wurden.) —

Damit haben wir die Frage über die Vorgänge bei der Messung einer Größe zu einem vorläufigen Abschluß gebracht, und wir können uns der gleichzeitigen Messung mehrerer Größen zuwenden.

Seien zunächst \mathfrak{H} , \mathfrak{G} zwei Größen mit den bzw. Operatoren R , S , nehmen wir an, daß sie gleichzeitig meßbar sind. Was folgt hieraus?

Zunächst wollen wir absolut genaue Messungen verlangen, so daß R , S beide reine Punktspektren haben müssen: $\lambda_1, \lambda_2, \dots$ bzw. μ_1, μ_2, \dots . Die zugehörigen vollständigen normierten Orthogonalsysteme aus Eigenfunktionen seien $\varphi_1, \varphi_2, \dots$ bzw. ψ_1, ψ_2, \dots .

Um den einfachsten Fall vorwegzunehmen, wollen wir zuerst annehmen, daß einer der beiden Operatoren, etwa R , lauter einfache Eigenwerte hat: d. h. $\lambda_m \neq \lambda_n$ für $m \neq n$.

Wenn wir \mathfrak{H} , \mathfrak{G} gleichzeitig messen, so liegt nachher ein Zustand vor, in dem \mathfrak{H} wie \mathfrak{G} bestimmt den vorher gemessenen Wert hat, diese Werte sind etwa λ_m, μ_n , der Zustand ψ aber, der nachher vorliegt, muß $R\psi = \lambda_m\psi$, $S\psi = \mu_n\psi$ erfüllen. Aus dem ersteren folgt, daß $\psi = \varphi_m$ ist (bis auf einen Zahlenfaktor, den wir weglassen können), aus dem letzteren $\psi = \sum_{\nu} a_{\nu}\psi_{n\nu}$, wenn $\mu_{n_1}, \mu_{n_2}, \dots$ alle μ_n gleichen μ_n sind.

Wenn der Ausgangszustand φ war, so hat λ_m, φ_m die Wahrscheinlichkeit $|(\varphi, \varphi_m)|^2$. Für $\varphi = \varphi_m$ wird also $\bar{m} = m$ zur Bestimmtheit, so daß wir für jedes m sagen können: φ_m ist ein $\sum_{\nu} a_{\nu}\psi_{n\nu}$, mit lauter gleichen $\mu_{n\nu}$, d. h. es ist $S\varphi_m = \bar{\mu}\varphi_m$ (mit $\bar{\mu} = \mu_{n_1} = \mu_{n_2} = \dots$). Für die $f = \varphi_m$ gilt somit $RSf = SRf$ (beide sind gleich $\lambda_m\bar{\mu}\varphi_m$), somit gilt dies auch für ihre Linearaggregate und, falls R, S stetig sind, auch für deren Häufungspunkte — d. h. für alle f . Also sind R, S vertauschbar.

Wenn sie nicht stetig sind, so schließen wir so: die zu R, S gehörigen Zerlegungen der Einheit $E(\lambda), F(\mu)$ sind durch

$$E(\lambda) = \sum_{\lambda_m \leq \lambda} P_{[\varphi_m]}, \quad F(\mu) = \sum_{\mu_n \leq \mu} P_{[\psi_n]}$$

definiert. Somit ist $F(\mu)\varphi_m = \varphi_m$ oder $= 0$, je nachdem ob $\mu \geq$ oder $<$ ist als das obige $\bar{\mu}$. Ferner ist $E(\lambda)\varphi_m = \varphi_m$ oder $= 0$, $\lambda \geq$ oder $<$ λ_m entsprechend. Also ist allenfalls $E(\lambda)F(\mu)\varphi_m = F(\mu)E(\lambda)\varphi_m$, für alle φ_m — woraus wie oben die Vertauschbarkeit der $E(\lambda), F(\mu)$ folgt, also (nach II. 10.) auch die von R, S .

Nach II. 10. existiert aber ein vollständiges normiertes Orthogonalsystem aus gemeinsamen Eigenfunktionen von R, S — d. h. wir dürfen $\varphi_m = \psi_m$ annehmen. Da für $m \neq n$ $\lambda_m \neq \lambda_n$ ist, können wir eine Funktion $F(\lambda)$ mit

$$F(\lambda) = \begin{cases} \mu_n, & \text{für } \lambda = \lambda_n, n = 1, 2, \dots, \\ \text{beliebig,} & \text{sonst} \end{cases}$$

aufstellen, und es wird $S = F(R)$, d. h. $\mathfrak{S} = F(\mathfrak{R})$. D. h.: $\mathfrak{R}, \mathfrak{S}$ sind nicht nur gleichzeitig meßbar, sondern es ist sogar jede Messung von \mathfrak{R} auch eine von \mathfrak{S} , da \mathfrak{S} Funktion von \mathfrak{R} , d. h. kausal durch \mathfrak{R} bestimmt ist¹²⁷.

Gehen wir nun zum anderen, allgemeineren Falle über, wo nichts über die Eigenwert-Vielfachheiten von R, S vorausgesetzt wird. In diesem Falle verwenden wir eine wesentlich andere Methode.

Betrachten wir zunächst die Größe $\mathfrak{R} + \mathfrak{S}$. Eine gleichzeitige Messung von $\mathfrak{R}, \mathfrak{S}$ ist auch eine Messung von $\mathfrak{R} + \mathfrak{S}$: denn die Addition der Meßresultate ergibt den Wert von $\mathfrak{R} + \mathfrak{S}$. Infolgedessen ist der Erwartungswert von $\mathfrak{R} + \mathfrak{S}$ in jedem Zustand ψ die Summe der Erwartungswerte von \mathfrak{R} und von \mathfrak{S} . Man beachte: dies gilt unabhängig davon, ob $\mathfrak{R}, \mathfrak{S}$ voneinander statistisch unabhängig sind, oder ob (und welche) Korrelationen zwischen ihnen bestehen, oder gar eines das andere kausal bestimmt — denn das Gesetz

Erwartungswert der Summe = Summe der Erwartungswerte

gilt bekanntlich allgemein. Wenn also T der Operator von $\mathfrak{R} + \mathfrak{S}$ ist, so ist dieser Erwartungswert einerseits $(T\psi, \psi)$, andererseits

$$(R\psi, \psi) + (S\psi, \psi) = ((R + S)\psi, \psi);$$

d. h. es ist für alle ψ

$$(T\psi, \psi) = ((R + S)\psi, \psi),$$

also $T = R + S$. Somit hat $\mathfrak{R} + \mathfrak{S}$ den Operator $R + S$ ¹²⁸. Ebenso zeigt man, daß $a\mathfrak{R} + b\mathfrak{S}$ (a, b reelle Zahlen) den Operator $aR + bS$ hat. (Dies folgt auch aus der ersten Formel, wenn man $\mathfrak{R}, \mathfrak{S}$ und R, S in die Funktionen $F(\lambda) = a\lambda, G(\mu) = b\mu$ einsetzt.)

Eine gleichzeitige Messung von $\mathfrak{R}, \mathfrak{S}$ ist auch eine Messung von $\frac{\mathfrak{R} + \mathfrak{S}}{2}, \left(\frac{\mathfrak{R} + \mathfrak{S}}{2}\right)^2, \frac{\mathfrak{R} - \mathfrak{S}}{2}, \left(\frac{\mathfrak{R} - \mathfrak{S}}{2}\right)^2, \left(\frac{\mathfrak{R} + \mathfrak{S}}{2}\right)^2 - \left(\frac{\mathfrak{R} - \mathfrak{S}}{2}\right)^2 = \mathfrak{R} \cdot \mathfrak{S}$.

Operatoren dieser Größen sind daher (wenn wir noch verwenden, daß, falls T der Operator von \mathfrak{Z} ist, $F(\mathfrak{Z})$ den Operator $F(T)$ hat — also \mathfrak{Z}^2 den Operator T^2):

$$\begin{aligned} \frac{R+S}{2}, \left(\frac{R+S}{2}\right)^2 &= \frac{R^2+S^2+RS+SR}{4}, \frac{R-S}{2}, \left(\frac{R-S}{2}\right)^2 \\ &= \frac{R^2+S^2-RS-SR}{4}, \left(\frac{R+S}{2}\right)^2 - \left(\frac{R-S}{2}\right)^2 = \frac{RS+SR}{2}. \end{aligned}$$

D. h.: $\mathfrak{R} \cdot \mathfrak{S}$ hat den Operator $\frac{RS+SR}{2}$. Dies gilt auch für alle $F(\mathfrak{R}), G(\mathfrak{S})$ (die ja auch mitgemessen sind), also hat $F(\mathfrak{R}) \cdot G(\mathfrak{S})$ den Operator $\frac{F(R)G(S)+G(S)F(R)}{2}$.

Seien nun $E(\lambda), F(\mu)$ die zu R, S gehörigen Zerlegungen der Einheit, ferner

$$F(\lambda) = \begin{cases} 1, & \text{für } \lambda \leq \bar{\lambda} \\ 0, & \text{für } \lambda > \bar{\lambda} \end{cases} \quad G(\mu) = \begin{cases} 1, & \text{für } \mu \leq \bar{\mu} \\ 0, & \text{für } \mu > \bar{\mu} \end{cases}$$

Wie wir wissen, ist $F(R) = E(\bar{\lambda}), G(S) = F(\bar{\mu})$, also hat $F(\mathfrak{R}) \cdot G(\mathfrak{S})$ den Operator $\frac{EF+FE}{2}$ (wir schreiben für $E(\bar{\lambda}), F(\bar{\mu})$ kürzer E, F). Da $F(\mathfrak{R})$ stets $= 0, 1$ ist, ist $F(\mathfrak{R})^2 = F(\mathfrak{R})$, also

$$F(\mathfrak{R}) \cdot (F(\mathfrak{R}) \cdot G(\mathfrak{S})) = F(\mathfrak{R}) \cdot G(\mathfrak{S}).$$

Wenden wir nun unsere Multiplikationsformel auf $F(\mathfrak{R})$ und $F(\mathfrak{R}) \cdot G(\mathfrak{S})$ an (all dies ist ja gleichzeitig meßbar), so gewinnen wir für dieses Produkt den Operator

$$E \frac{EF+FE}{2} + \frac{EF+FE}{2} E = \frac{E^2F+2EFE+FE^2}{4} = \frac{EF+FE+2EFE}{4}.$$

Dies muß gleich $\frac{EF+FE}{2}$ sein, daraus folgt

$$EF+FE = 2 \cdot EFE.$$

Linksmultiplikation mit E ergibt

$$E^2F + EFE = 2 \cdot E^2FE, \quad EF + EFE = 2 \cdot EFE, \quad EF = EFE,$$

Rechtsmultiplikation

$$EFE + FE^2 = 2 \cdot EFE^2, \quad EFE + FE = 2 \cdot EFE, \quad FE = EFE,$$

also ist $EF = FE$. D. h. alle $E(\bar{\lambda}), F(\bar{\mu})$ sind vertauschbar — somit sind R, S wieder vertauschbar.

Nach II. 10. bedeutet diese Bedingung, R, S vertauschbar, dasselbe wie die Forderung, daß ein Hermitescher Operator T existiert, von dem R, S Funktionen sind: $R = F(T), S = G(T)$. Wenn er zur Größe \mathfrak{Z} gehört, so ist also $\mathfrak{M} = F(\mathfrak{Z}), \mathfrak{C} = G(\mathfrak{Z})$. Diese Bedingung ist, aber für die gleichzeitige Meßbarkeit auch hinreichend, denn eine Messung von \mathfrak{Z} (eine absolut genaue, denn \mathfrak{Z} hat ein reines Punktspektrum, vgl. II. 10.) mißt gleichzeitig auch dessen Funktionen $\mathfrak{M}, \mathfrak{C}$. Die Vertauschbarkeit von R, S ist also die notwendige und hinreichende Bedingung.

Wenn mehrere Größen $\mathfrak{M}, \mathfrak{C}, \dots$ (aber eine endliche Anzahl) gegeben sind, ihre Operatoren seien R, S, \dots , und wieder absolut genaue Messung verlangt wird, so steht es mit der gleichzeitigen Meßbarkeit so: Wenn alle Größen $\mathfrak{M}, \mathfrak{C}, \dots$ gleichzeitig meßbar sind, so müssen auch alle aus ihnen gebildete Paare sein, d. h. alle Operatoren R, S, \dots sind miteinander vertauschbar. Sind umgekehrt R, S, \dots miteinander vertauschbar, so existiert nach II. 10. ein Operator T , von dem alle Funktionen sind: $R = F(T), S = G(T), \dots$, also für die entsprechende Größe \mathfrak{Z} : $\mathfrak{M} = F(\mathfrak{Z}), \mathfrak{C} = G(\mathfrak{Z}), \dots$. Eine genaue Messung von \mathfrak{Z} (\mathfrak{Z} hat wieder ein reines Punktspektrum, vgl. II. 10.) ist somit auch eine gleichzeitige für $\mathfrak{M}, \mathfrak{C}, \dots$. D. h.: für die gleichzeitige Meßbarkeit von $\mathfrak{M}, \mathfrak{C}, \dots$ ist die Vertauschbarkeit von R, S, \dots notwendig und hinreichend.

Betrachten wir nunmehr solche Messungen, die nicht absolut genau, sondern nur von (beliebig großer) vorgegebener Genauigkeit sind. Dann brauchen R, S, \dots nicht mehr reine Punktspektren zu haben.

Da die $\mathfrak{M}, \mathfrak{C}, \dots$ -Messungen beschränkter Genauigkeit dasselbe bewirken wie absolut genaue Messungen von $F(\mathfrak{M}), G(\mathfrak{C}), \dots$ — wobei $F(\lambda), G(\lambda), \dots$ gewisse Funktionen sind, deren Bildungsweise am Anfang dieses Paragraphen (bei der Diskussion der beschränkt genauen Messung, es wurde natürlich nur $F(\lambda)$ angegeben) beschrieben wurde, so sind $\mathfrak{M}, \mathfrak{C}, \dots$ gewiß gleichzeitig meßbar, wenn es alle $F(\mathfrak{M}), G(\mathfrak{C}), \dots$ mit absoluter Genauigkeit sind. Letzteres ist aber mit der Vertauschbarkeit von $F(R), G(S), \dots$ gleichbedeutend, und diese folgt aus derjenigen von R, S, \dots . Die Vertauschbarkeit von R, S, \dots ist also jedenfalls hinreichend.

Werden umgekehrt $\mathfrak{M}, \mathfrak{C}, \dots$ als gleichzeitig meßbar angenommen, so folgern wir so. Eine hinreichend genaue Messung von \mathfrak{M} erlaubt zu entscheiden, ob sein Wert $> \bar{\lambda}$ oder $\leq \bar{\lambda}$ ist (vgl. unsere, insbesondere in Anm. ¹²⁶ diskutierte, Definition der „beschränkten Genauigkeit“). Wenn also $F(\lambda) = 1, 0$ für $\lambda \leq$ bzw. $> \bar{\lambda}$ definiert wird, so ist $F(\mathfrak{M})$ absolut genau meßbar. Entsprechend ist für $G(\mu) = 1, 0$ für $\mu \leq$ bzw. $> \bar{\mu}$ $G(\mathfrak{C})$ absolut genau meßbar, und beide Größen außerdem gleichzeitig meßbar. Also sind $F(R), G(S)$ vertauschbar. Nun seien

$E(\lambda), F(\mu)$, die zu R, S gehörigen Zerlegungen der Einheit, dann ist $F(R) = E(\bar{\lambda}), G(S) = F(\bar{\mu})$, also $E(\bar{\lambda}), F(\bar{\mu})$ vertauschbar — für alle $\bar{\lambda}, \bar{\mu}$. Somit sind R, S vertauschbar, und da dasselbe für jedes Paar aus R, S, \dots gelten muß, sind alle R, S, \dots miteinander vertauschbar. Diese Bedingung ist also auch notwendig.

Wir sehen also: Die für die gleichzeitige Meßbarkeit einer beliebigen (endlichen) Zahl von Größen $\mathfrak{N}, \mathfrak{S}, \dots$ charakteristische Bedingung ist die Vertauschbarkeit ihrer Operatoren R, S, \dots . Und zwar gilt dies sowohl für absolut genaue, wie für beliebig genaue Messungen, nur ist im ersteren Falle noch das zu verlangen, was für die Möglichkeit absolut genauer Messung charakteristisch ist: daß die Operatoren reine Punktspektren besitzen sollen.

Damit ist der mathematische Beweis dafür erbracht, daß **W.** die weitestgehende Aussage macht, die in dieser (d. h. in einer **W.** enthaltenden) Theorie überhaupt möglich ist. Denn es setzt nur die Vertauschbarkeit der Operatoren R_1, \dots, R_l voraus, und ohne diese kann von gleichzeitigen Meßresultaten für $\mathfrak{N}_1, \dots, \mathfrak{N}_l$ ohnehin nichts ausgesagt werden, da dann gleichzeitige Messungen dieser Größen überhaupt nicht möglich sind.

4. Unbestimmtheitsrelationen.

In den vorhergehenden Paragraphen haben wir wesentliche Aufschlüsse über den Meßprozeß gewonnen, wenn es sich um eine Größe handelte, oder um mehrere gleichzeitig meßbare; nunmehr müssen wir uns darüber orientieren, welches Verhalten nicht gleichzeitig meßbare Größen zeigen, wenn man sich für ihre Statistik am selben System (im selben Zustände φ) interessiert.

Seien also zwei solche Größen $\mathfrak{N}, \mathfrak{S}$ sowie ihre (nicht vertauschbaren!) Operatoren R, S gegeben. Trotz dieser Annahme kann es Zustände φ geben, in denen beide Größen scharfe Werte (d. h. Streuungen 0) haben — d. h. gemeinsame Eigenfunktionen beider; nur darf kein vollständiges Orthogonalsystem aus solchen gebildet werden können, da dann R, S vertauschbar wären. (Vgl. die in II. 8. angegebene Konstruktion der entsprechenden Zerlegungen der Einheit $E(\lambda), F(\lambda)$: wenn $\varphi_1, \varphi_2, \dots$ das genannte vollständige Orthogonalsystem ist, sind die $E(\lambda)$ wie die $F(\lambda)$ $P_{[\varphi_\alpha]}$ -Summen, also vertauschbar, weil es die $P_{[\varphi_\alpha]}$ sind.) Man überlegt sich leicht, was dies bedeutet: die von diesen φ aufgespannte abgeschlossene Linearmannigfaltigkeit \mathfrak{M} muß kleiner sein als \mathfrak{N}_∞ — denn wäre sie gleich \mathfrak{N}_∞ , so könnte das gesuchte vollständige normierte Orthogonalsystem genau so aufgestellt werden, wie es am Anfang von II. 6. für einen einzigen Operator geschah.

Für die Zustände aus \mathfrak{M} sind $\mathfrak{N}, \mathfrak{S}$ gleichzeitig meßbar, was man am einfachsten durch Angabe eines Modells für diese gleichzeitige

Messung nachweist. Da die gemeinsamen Eigenfunktionen φ von R, S \mathfrak{M} aufspannen, gibt es ein ebenfalls \mathfrak{M} aufspannendes (d. h. in \mathfrak{M} vollständiges) normiertes Orthogonalsystem solcher φ : $\varphi_1, \varphi_2, \dots$ (man gewinnt auch diese an Hand der vorhin erwähnten Konstruktion aus II. 6.). Wir erweitern $\varphi_1, \varphi_2, \dots$ durch Hinzufügen eines normierten Orthogonalsystems ψ_1, ψ_2, \dots , das $\mathfrak{N} - \mathfrak{M}$ aufspannt, zu einem vollständigen System: $\varphi_1, \varphi_2, \dots, \psi_1, \psi_2, \dots$. Seien nun $\lambda_1, \lambda_2, \dots, \mu_1, \mu_2, \dots$ voneinander verschiedene Zahlen, und T durch

$$T(\sum^n x_n \cdot \varphi_n + \sum^n y_n \cdot \psi_n) = \sum^n \lambda_n x_n \cdot \varphi_n + \sum^n \mu_n y_n \cdot \psi_n$$

definiert, \mathfrak{Z} die dazugehörige Größe.

Eine Messung von \mathfrak{Z} erzeugt, wie wir aus III. 3. wissen, einen der Zustände $\varphi_1, \varphi_2, \dots, \psi_1, \psi_2, \dots$ (ist ein φ_n entstanden (was man daran merkt, daß das Meßresultat ein λ_n ist), so kennt man auch die Werte von \mathfrak{R} und von \mathfrak{S} : denn $\mathfrak{R}, \mathfrak{S}$ haben in φ_n nach Annahme scharfe Werte, und man kann mit Bestimmtheit voraussagen, daß bei einer unmittelbar nachfolgenden Messung von \mathfrak{R} bzw. \mathfrak{S} diese bzw. Werte gefunden werden. Ist dagegen ein ψ_n entstanden, so weiß man nichts derartiges (ψ_n liegt nicht in \mathfrak{M} , also sind $\mathfrak{R}, \mathfrak{S}$ in ψ_n nicht scharf). Die Wahrscheinlichkeit ψ_n zu finden ist aber, wie wir wissen, $(P_{[\psi_n]} \varphi, \varphi)$, und die Wahrscheinlichkeit, irgendein ψ_n ($n = 1, 2, \dots$) zu finden

$$\sum^n (P_{[\psi_n]} \varphi, \varphi) = (P_{\mathfrak{N} - \mathfrak{M}} \varphi, \varphi) = \|P_{\mathfrak{N} - \mathfrak{M}} \varphi\|^2 = \|\varphi - P_{\mathfrak{M}} \varphi\|^2.$$

Sie ist also 0, d. h. $\mathfrak{R}, \mathfrak{S}$ werden mit Bestimmtheit gleichzeitig gemessen, wenn $\varphi = P_{\mathfrak{M}} \varphi$ ist, d. h. φ zu \mathfrak{M} gehört¹²⁹.

Da wir uns jetzt für nicht gleichzeitig meßbare Größen interessieren, wollen wir das Bestehen des extremen Falles $\mathfrak{M} = (0)$ annehmen: d. h. voraussetzen, daß $\mathfrak{R}, \mathfrak{S}$ in keinem einzigen Zustande gleichzeitig meßbar sind — oder: daß keine gemeinsame Eigenfunktion von R, S existiert.

Wenn R, S die Zerlegungen der Einheit $E(\lambda), F(\lambda)$ haben, sind im Zustande φ , wie wir aus III. 1. wissen, die Erwartungswerte von R, S

$$\varrho = (R \varphi, \varphi), \quad \sigma = (S \varphi, \varphi);$$

und ihre Streuungen, d. h. die Erwartungswerte von $(\mathfrak{R} - \varrho)^2, (\mathfrak{S} - \sigma)^2$ (vgl. die Diskussion der absolut genauen Messung in III. 3.),

$$\varepsilon^2 = ((R - \varrho \cdot 1)^2 \varphi, \varphi) = \|(R - \varrho \cdot 1) \varphi\|^2 = \|R \varphi - \varrho \varphi\|^2,$$

$$\eta^2 = ((S - \sigma \cdot 1)^2 \varphi, \varphi) = \|(S - \sigma \cdot 1) \varphi\|^2 = \|S \varphi - \sigma \varphi\|^2.$$

Nach einer bekannten Umformung ergibt dies¹³⁰:

$$\varepsilon^2 = \|R \varphi\|^2 - (R \varphi, \varphi)^2, \quad \eta^2 = \|S \varphi\|^2 - (S \varphi, \varphi)^2$$

(wegen $\|\varphi\| = 1$ zeigt schon die Schwarzsche Ungleichheit, d. i. Satz I., II. 1., daß die linken Seiten ≥ 0 sind). Es entsteht nun die Frage: da nie $\varepsilon = 0, \eta = 0$ sein kann, wohl aber ε für sich allein beliebig klein

gemacht werden kann, und η gleichfalls (\mathfrak{R} , \mathfrak{S} sind ja getrennt beliebig genau meßbar, evtl. sogar absolut genau), muß es Relationen zwischen ε , η geben, die ihr gleichzeitiges Kleinwerden verhindern — wie lauten diese?

Das Bestehen solcher Relationen wurde von HEISENBERG entdeckt¹³¹, sie sind für die Erkenntnis der durch die Quantenmechanik verursachten Unbestimmtheiten der Naturbeschreibung von großer Wichtigkeit. Sie werden deshalb Unbestimmtheitsrelationen genannt. Wir wollen die wichtigste derartige Beziehung zuerst mathematisch ableiten, um dann auf ihre prinzipielle Bedeutung und ihr Verhältnis zur Erfahrung zurückzukommen.

In der Matrizentheorie spielten Operatoren P, Q mit der Vertauschungseigenschaft

$$PQ - QP = \frac{h}{2\pi i} 1$$

eine wichtige Rolle: sie waren z. B. der Koordinate und ihrem konjugierten Impuls zugeordnet (vgl. I. 2.) — oder allgemeiner irgend zwei Größen, die in der klassischen Mechanik kanonisch konjugiert waren (vgl. z. B. die in Anm. 2 genannten Abhandlungen). Fassen wir etwas allgemeiner zwei Hermitesche Operatoren P, Q mit

$$PQ - QP = a \cdot 1$$

ins Auge. (Da $(PQ - QP)^* = QP - PQ$ ist, ist $(a \cdot 1)^* = \bar{a} \cdot 1 = -a \cdot 1$, $\bar{a} = -a$, d. h. a rein imaginär. Natürlich ist diese Operatorenleichung für die Definitionsbereiche nicht gültig: $PQ - QP$ braucht nicht überall sinnvoll zu sein.) Für jedes φ gilt dann:

$$\begin{aligned} 2 \operatorname{Im}(P\varphi, Q\varphi) &= -i[(P\varphi, Q\varphi) - (Q\varphi, P\varphi)] = -i[(Q P \varphi, \varphi) - (P Q \varphi, \varphi)] \\ &= (i\{PQ - QP\}\varphi, \varphi) = i a \cdot \|\varphi\|^2. \end{aligned}$$

Sei $a \neq 0$, dann haben wir (Satz I., II. 1.)

$$\|\varphi\|^2 = -\frac{2i}{a} \operatorname{Im}(P\varphi, Q\varphi) \leq \frac{2}{|a|} |(P\varphi, Q\varphi)| \leq \frac{2}{|a|} \|P\varphi\| \cdot \|Q\varphi\|,$$

also für $\|\varphi\| = 1$

$$\|P\varphi\| \cdot \|Q\varphi\| \geq \frac{|a|}{2}.$$

Da $P - \varrho \cdot 1, Q - \sigma \cdot 1$ die obige Vertauschungseigenschaft ebenfalls haben, gilt auch

$$\|P\varphi - \varrho \cdot \varphi\| \cdot \|Q\varphi - \sigma \cdot \varphi\| \geq \frac{|a|}{2},$$

und wenn wir die Mittelwerte und Streuungen einführen:

$$\begin{aligned} \varrho &= (P\varphi, \varphi), & \varepsilon^2 &= \|P\varphi - \varrho \cdot \varphi\|^2, \\ \sigma &= (Q\varphi, \varphi), & \eta^2 &= \|Q\varphi - \sigma \cdot \varphi\|^2, \end{aligned}$$

dann wird:

$$(U.) \quad \varepsilon \eta \geq \frac{|a|}{2}.$$

Damit das Gleichheitszeichen gelte, ist notwendig und hinreichend, daß in den bei der Herleitung benutzten \leq -Ungleichheiten stets das =-Zeichen bestehe. Mit $P' = P - \rho \cdot 1$, $Q' = Q - \sigma \cdot 1$ haben wir also:

$$-\frac{i|a|}{a} \operatorname{Im}(P'\varphi, Q'\varphi) = |(P'\varphi, Q'\varphi)| = \|P'\varphi\| \cdot \|Q'\varphi\|.$$

Letzteres bedeutet nach Satz 1., II. 1., daß $P'\varphi$, $Q'\varphi$ sich nur um einen konstanten Faktor unterscheiden — und da $\|P'\varphi\| \cdot \|Q'\varphi\| \geq \frac{|a|}{2} > 0$, $P'\varphi \neq 0$, $Q'\varphi \neq 0$ nach sich zieht, muß $P'\varphi = c \cdot Q'\varphi$, $c \neq 0$, sein. Das erstere aber besagt, daß $(P'\varphi, Q'\varphi) = c \cdot \|Q'\varphi\|^2$ rein imaginär ist, und zwar hat sein i -Koeffizient dasselbe Vorzeichen, wie $-\frac{i|a|}{a}$ (reell!), d. h. das entgegengesetzte wie derjenige von a . Also: $c = i\gamma$, γ reell und ≥ 0 für $\frac{a}{i} \leq 0$. Somit ist

$$(GL.) \quad P'\varphi = i\gamma \cdot Q'\varphi, \quad \gamma \text{ reell und } \leq 0 \text{ für } ia \leq 0.$$

Die Definition von ρ , σ verlangt auch noch $(P'\varphi, \varphi) = 0$, $(Q'\varphi, \varphi) = 0$, da aber aus (GL.) $(P'\varphi, \varphi) = i\gamma (Q'\varphi, \varphi)$ folgt, wobei links etwas Reelles und rechts etwas rein Imaginäres steht, gelten diese Gleichungen ohnehin. Wir bestimmen noch ε , η . Es ist:

$$\varepsilon \cdot \eta = \|P'\varphi\| : \|Q'\varphi\| = |c| = |\gamma|, \quad \varepsilon \eta = \frac{|a|}{2},$$

also, da ε , η beide positiv sind,

$$\varepsilon = \sqrt{\frac{|a| \cdot |\gamma|}{2}}, \quad \eta = \sqrt{\frac{|a|}{2|\gamma|}}.$$

Für den quantenmechanischen Fall $a = \frac{h}{2\pi i}$ wird aus (U.)

$$(U'.) \quad \varepsilon \cdot \eta \geq \frac{h}{4\pi}.$$

Auch (GL.) können wir diskutieren, wenn P , Q z. B. die Operatoren der Schrödingerschen Theorie sind: $P = \frac{h}{2\pi i} \frac{\partial}{\partial q} \cdot \dots$, $Q = q \cdot \dots$ (Vgl. I. 2., wir nehmen an, daß ein mechanisches System mit einem Freiheitsgrad vorliegt, seine einzige Koordinate ist q .) Dann lautet (GL.):

$$\left(\frac{h}{2\pi i} \frac{\partial}{\partial q} - \rho \right) \varphi = i\gamma \cdot (q - \sigma) \varphi,$$

wegen $ia = \frac{h}{2\pi} > 0$ ist $\gamma > 0$. Also:

$$\frac{\partial}{\partial q} \varphi = \left\{ -\frac{2\pi}{h} \gamma \cdot q + \frac{2\pi}{h} \gamma \sigma + \frac{2\pi}{h} \rho \cdot i \right\} \varphi,$$

d. h.

$$\begin{aligned} \varphi &= e^{\int \left\{ -\frac{2\pi}{h} \gamma \cdot q + \frac{2\pi}{h} \gamma \sigma + \frac{2\pi}{h} \rho \cdot i \right\} dq} \\ &= C e^{-\frac{\pi\gamma}{h} q^2 + \frac{2\pi\gamma}{h} \sigma q + \frac{2\pi\rho}{h} i q} = C' e^{-\frac{\pi\gamma}{h} (q-\sigma)^2 + \frac{2\pi\rho}{h} i q} \end{aligned}$$

$\|\varphi\|^2 = \int_{-\infty}^{+\infty} |\varphi(q)|^2 dq$ ist wegen $\gamma > 0$ tatsächlich endlich, und C' wird aus $\|\varphi\| = 1$ bestimmt:

$$\begin{aligned} \|\varphi\|^2 &= \int_{-\infty}^{+\infty} |\varphi(q)|^2 dq = |C'|^2 \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\frac{2\pi\gamma}{h}(q-o)^2} dq \\ &= |C'|^2 \sqrt{\frac{h}{2\pi\gamma}} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-x^2} dx \\ &= |C'|^2 \sqrt{\frac{h}{2\pi\gamma}} \sqrt{\pi} = |C'|^2 \sqrt{\frac{h}{2\gamma}} = 1, \\ |C'| &= \left(\frac{2\gamma}{h}\right)^{1/4}. \end{aligned}$$

Also ist nach Fortlassung des physikalisch sinnlosen Faktors vom Absolutwert 1, $C' = \left(\frac{2\gamma}{h}\right)^{1/4}$, d. h.

$$\varphi = \varphi(q) \equiv \left(\frac{2\gamma}{h}\right)^{1/4} e^{-\frac{\pi\gamma}{h}(q-o)^2 + \frac{2\pi e}{h}iq}$$

ε, η kennen wir:

$$\varepsilon = \sqrt{\frac{h\gamma}{4\pi}}, \quad \eta = \sqrt{\frac{h}{4\pi\gamma}}.$$

Abgesehen von der Bedingung $\varepsilon\eta = \frac{h}{4\pi}$ sind sie also, wenn γ von 0 bis $+\infty$ variiert, beliebig. D. h.: jedes $\varepsilon\eta = \frac{h}{4\pi}$ erfüllende Quadrupel $\rho, \sigma, \varepsilon, \eta$ wird durch genau ein φ realisiert. Diese φ wurden zuerst von HEISENBERG untersucht, und zur Erläuterung quantenmechanischer Verhältnisse verwendet — sie sind hierzu hervorragend geeignet, weil sie den höchsten in der Quantenmechanik möglichen Grad der Annäherung an klassisch-mechanische Verhältnisse (wo p, q beide nicht streuen!) darstellen, und man nach Belieben ε oder η vorgeschriebene Werte erteilen kann. (Vgl. a. a. O. Anm. ¹³¹.)

Mit den vorangehenden Überlegungen haben wir aber erst eine, nämlich die formale, Seite der Unbestimmtheitsrelationen erfaßt; zum vollen Verständnis derselben ist noch notwendig, sie auch von einem anderen Gesichtspunkte aus zu betrachten: von demjenigen der unmittelbaren physikalischen Erfahrung. Denn sie stehen zu dieser in einem leichter übersehbaren und einfacheren Verhältnisse als viele der Tatsachen, auf die die Quantenmechanik aufgebaut wurde, und darum wird ihnen die obige, ganz formale Herleitung nicht völlig gerecht. Eine anschauliche Diskussion ist um so mehr notwendig, als man auf den ersten Blick sogar den Eindruck gewinnen könnte, daß hier ein Widerspruch mit der Anschauung vorliegt: ist es doch nicht ohne weiteres zu erkennen, warum man Ort und Geschwindigkeit (d. h. Ko-

ordinate und Impuls) eines materiellen Körpers nicht gleichzeitig und mit beliebig hoher Genauigkeit messen könnte — falls man hinreichend feine Meßinstrumente besäße. Darum ist es notwendig, sich durch genaue Analyse der allerfeinsten (evtl. nur im Sinne des Gedankenexperimentes durchführbaren) Meßprozesse klarzumachen, daß dem nicht so ist. Vielmehr stellen die wohlbekanntesten Gesetze der Wellenoptik, der Elektrodynamik, und der atomaren Elementarprozesse dem genauen Messen gerade dort unüberwindliche Schwierigkeiten in den Weg, wo dies von den Unbestimmtheitsrelationen gefordert wird. Und zwar ist es so, daß man dies bereits erkennen kann, wenn die genannten Vorgänge rein klassisch (nicht quantentheoretisch!) untersucht werden. Dies ist von prinzipieller Wichtigkeit: denn es zeigt, daß man auf dem, auch unabhängig von der Richtigkeit der Quantenmechanik gesicherten, klassischen Gebiete (d. h. dort, wo die Quantenerscheinungen noch keine wesentliche Korrektur der älteren Betrachtungsweise erzwingen) — also eigentlich dem einzigen, das unserer Anschauung unmittelbar zugänglich ist¹³² — in keine Kollision mit den paradox klingenden Unbestimmtheitsrelationen der Quantenmechanik gerät.

Zu zeigen ist dieses: wenn p, q zwei kanonisch konjugierte Größen sind, und sich ein System in einem solchen Zustande befindet, in dem sich der Wert von p mit der Genauigkeit ε angeben läßt (d. h. nach einer p -Messung mit der Fehlergrenze ε), so kann q mit keiner höheren Genauigkeit als $\eta = \frac{h}{4\pi} : \varepsilon$ bekannt sein. Oder: eine Messung von p mit der Genauigkeit ε muß eine Unbestimmtheit $\eta = \frac{h}{4\pi} : \varepsilon$ in den Wert von q hereinbringen.

Natürlich können wir bei diesen sehr qualitativen Betrachtungen nicht jedes Detail genau wiederfinden: statt $\varepsilon\eta = \frac{h}{4\pi}$ werden wir für die genauestmögliche Messung nur $\varepsilon\eta \sim h$ (d. h. $\varepsilon\eta$ der Größenordnung nach gleich h) zeigen können. Als charakteristisches Beispiel soll das konjugierte Paar Ort (Koordinate)-Impuls eines Teilchens T betrachtet werden¹³³.

Untersuchen wir zuerst die Ortsbestimmung. Diese erfolgt, indem man sich T ansieht, d. h. es beleuchtet, und das Streulicht im Auge absorbiert. Es wird also aus der Lichtquelle I ein Lichtquant L gegen T geschossen, durch den Stoß mit T aus seiner geradlinigen Bahn $\beta\beta_1$ in $\beta\beta_2$ abgelenkt, und am Ende seiner Bahn, am Schirm Sch (der das Auge bzw. eine photographische Platte ersetzt) durch Absorption vernichtet (Abb. 1). Die Messung wird durch die Feststellung vollzogen, daß L den Schirm Sch nicht bei 1 (am Ende seiner natürlichen Bahn $\beta\beta_1$), sondern bei 2 (am Ende von $\beta\beta_2$) getroffen hat. Um aber hieraus den Ort des Stoßes (d. h. von T) ermitteln zu können, müssen auch die Richtungen von β und β_2 bekannt sein (d. h. L -s Richtung vor und

nach dem Stoß): dies erreicht man durch Einschaltung passender Blendensysteme ss und $s's'$. (Auf diese Weise wird eigentlich nicht eine Messung der Koordinate von T vollzogen, sondern eine Entscheidung der Frage, ob diese einen gewissen — dem Schnittpunkte der Richtungen β und β_2 , die man durch geeignete Anordnung der Blenden beliebig legen kann, entsprechenden — Wert hat, oder nicht. Die Superposition mehrerer solcher Entscheidungen, d. h. das Anbringen mehrerer Blenden $s's'$, kommt erst der Messung gleich.) Wie steht es aber nun mit der Genauigkeit dieser Ortsmessung?

Dieselbe hat eine prinzipielle Schranke in den Gesetzen der optischen Abbildung: in der Tat ist es unmöglich, mit Licht von der Wellenlänge λ Objekte, die kleiner als λ sind, scharf abzubilden, oder auch nur die Streuung so weit herabzusetzen, daß von einem (verzerrten) Bilde gesprochen werden kann. Allerdings verlangten wir keine optische Abbildung, da die bloße Tatsache der Ablenkung von L genügt, um T -s Ort festzustellen. Jedoch dürfen die Blenden ss und $s's'$ nicht enger als λ sein, da sonst L sie nicht glatt passieren kann, vielmehr eine Schar von Interferenzstreifen entsteht — so daß aus der Richtung der hintereinandergeschalteten Blenden ss bzw. $s's'$ nicht mehr auf die Richtung β bzw. β_2 des Lichtstrahles geschlossen werden kann. Somit ist es mit diesem Geschloß L keinesfalls möglich, mit einer größeren Genauigkeit als λ zu zielen und zu treffen.

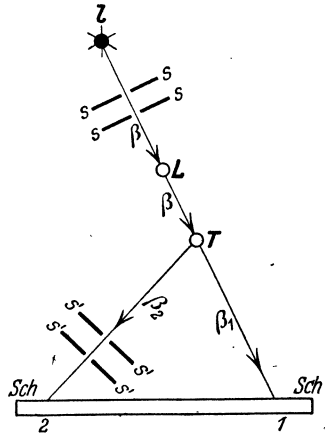


Abb. 1.

Die Wellenlänge λ ist also gleichzeitig das Maß des Koordinatenmessungsfehlers: $\lambda \sim \epsilon$. Weitere Charakteristika von L sind: seine Frequenz ν , seine Energie \bar{E} , sein Impuls \bar{p} ; es bestehen bekanntlich die Relationen:

$$\nu = \frac{c}{\lambda}, \quad \bar{E} = h\nu = \frac{hc}{\lambda}, \quad \bar{p} = \frac{\bar{E}}{c} = \frac{h\nu}{c} = \frac{h}{\lambda}$$

(c ist die Lichtgeschwindigkeit)¹³⁴. Somit ist $\bar{p} \sim \frac{h}{\epsilon}$. Nun findet im nicht genau bekannten Stoßvorgange zwischen L und T eine Impulsübertragung statt, die offenbar von der Größenordnung von \bar{p} , d. h. von $\frac{h}{\epsilon}$ ist, auf diese Weise entsteht also für T eine Impulsunsicherheit $\eta \sim \frac{h}{\epsilon}$.

Damit wäre $\epsilon\eta \sim h$ bewiesen, wenn nicht ein Umstand übersehen worden wäre. Der Stoßprozeß ist nämlich gar nicht so unbekannt:

wir kennen ja die Bewegungsrichtungen von \mathbf{L} vorher und nachher (β und β_2), also auch seine Impulse — aber daraus folgt, wie groß der an \mathbf{T} übertragene Impuls ist. Infolgedessen ist \bar{p} kein Maß für η , sondern viel eher die evtl. Unsicherheit der Strahlrichtungen β und β_2 . Um nun die Zusammenhänge zwischen dem „Zielen“ auf das kleine Objekt \mathbf{T} und der Richtungsunsicherheit, die damit verknüpft ist, genauer ermitteln zu können, ist es zweckmäßig, eine vollkommeneren „Ziel“-Vorrichtung zu verwenden als den Spalt ss — nämlich eine Linse. Infolgedessen ist die bekannte Theorie des Mikroskops zu berücksichtigen, welche folgendes aussagt: um ein Flächenstück mit der Längsausdehnung ε beleuchten (d. h. um \mathbf{T} mit der Genauigkeit ε mit \mathbf{L} treffen) zu können, ist eine Wellenlänge λ und eine Linsen-Apertur φ notwendig, zwischen denen die Beziehung $\frac{\lambda}{2 \sin \frac{\varphi}{2}} \sim \varepsilon$ besteht (Abb. 2¹³⁵).

Die Unbestimmtheit der tt -Komponente des Impulses von \mathbf{L} rührt daher, daß seine Richtung zwischen $-\frac{\varphi}{2}$ und $+\frac{\varphi}{2}$ liegt, aber sonst unbekannt ist — somit beträgt sie $2 \sin \frac{\varphi}{2} \cdot \bar{p} = \frac{\lambda}{\varepsilon} \cdot \frac{h}{\lambda} = \frac{h}{\varepsilon}$. Diese ist aber das richtige Maß für η , also ist wieder $\eta \sim \frac{h}{\varepsilon}$, d. h. $\varepsilon \eta \sim h$.

Dieses Beispiel zeigt den Mechanismus der Unbestimmtheitsprinzipien recht klar: um genau zu zielen, brauchen wir große Augen (hohe

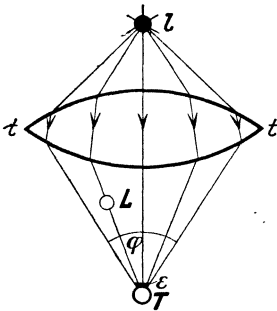


Abb. 2.

Apertur φ) und recht kurzwelliges Licht — d. h. sehr unbestimmte und große Impulse des Lichtquants, welche unübersehbare Zusammenstöße (Comptoneffekte) mit dem beobachteten Objekt \mathbf{T} verursachen, und dadurch dessen Impuls „verschmieren“.

Betrachten wir noch den umgekehrten Meßprozeß: die Geschwindigkeits- (Impuls-) Messung. Hier ist zunächst zu sagen: die natürliche Methode der Geschwindigkeitsmessung für \mathbf{T} ist die, seinen Ort zu zwei verschiedenen Zeitpunkten, etwa 0 und t , zu messen, und die Änderung der Koordinate durch t zu dividieren. Dabei muß jedoch die Geschwindigkeit im Zeitintervalle $0, t$ konstant sein; ändert sie sich, so ist diese Änderung ein Maß für die Abweichung zwischen der soeben berechneten mittleren Geschwindigkeit und der wirklichen Geschwindigkeit (etwa im Augenblick t), d. h. für die Meßunbestimmtheit — dasselbe gilt für den Impuls. Wenn nun die Koordinatenmessungen mit der Genauigkeit ε erfolgen, so beeinflusst dies zwar die Meßgenauigkeit für den mittleren Impuls nicht, da t beliebig groß gewählt werden kann, jedoch verursacht es Impulsänderungen $\sim \frac{h}{\varepsilon}$, also eine Unbe-

stimmtheit bezüglich des schließlichen Impulses $\eta \sim \frac{h}{\varepsilon}$. So kommt also jedenfalls $\varepsilon \eta \sim h$ heraus. Neues könnten daher nur solche Impulsmessungen ergeben, die mit keiner Ortsmessung verknüpft sind. Solche sind durchaus möglich und z. B. in der Astronomie häufig angewandt: sie beruhen auf dem Dopplereffekt. Wenden wir uns diesem zu.

Der Dopplereffekt besteht bekanntlich darin, daß dasjenige Licht, welches von einem mit der Geschwindigkeit v bewegten Körper \mathbf{T} mit der (am bewegten Körper gemessenen) Frequenz ν_0 emittiert wird, vom ruhenden Beobachter mit einer veränderten Frequenz ν wahrgenommen wird, die sich aus der Beziehung $\frac{\nu - \nu_0}{\nu_0} = \frac{v}{c} \cos \theta$ berechnen läßt. (θ ist der Winkel zwischen der Bewegungs- und Emissionsrichtung.

Übrigens ist diese Formel unrelativistisch, d. h. nur für kleine $\frac{v}{c}$ -Werte gültig, jedoch könnte dies leicht berichtigt werden.) Die Geschwindigkeitsbestimmung ist somit möglich, wenn ν beobachtet wird, und ν_0 bekannt ist — etwa weil es eine bestimmte Spektrallinie eines bekannten Elementes ist. Genauer: es wird die Geschwindigkeitskomponente in der Beobachtungs- (Lichtemissions-) Richtung gemessen $v \cos \theta = \frac{c(\nu - \nu_0)}{\nu}$, oder auch die entsprechende Impulskomponente $p' = p \cos \theta = \frac{m c (\nu - \nu_0)}{\nu_0}$ (m die Masse des Körpers \mathbf{T}). Die Streuung η von p' hängt offenbar mit der Streuung $\Delta \nu$ von ν zusammen: daher ist $\eta \sim \frac{m c \Delta \nu}{\nu_0} \sim \frac{m c \Delta \nu}{\nu}$. Der Impuls von \mathbf{T} wird allerdings dadurch geändert, daß er ein Lichtquant von der Frequenz ν , also vom Impuls $\bar{p} = \frac{h \nu}{c}$ emittiert, aber die Unsicherheit dieser Größe, $\frac{h \Delta \nu}{c}$, kann unter normalen Umständen gegen $\frac{m c \Delta \nu}{\nu}$ vernachlässigt werden¹³⁶.

ν wird durch irgendeine Interferenzerscheinung gemessen, eine solche ergibt aber naturgemäß nur bei einem rein monochromatischen Lichtwellenzuge einen absolut scharfen ν -Wert. Ein solcher Wellenzug hat die Gestalt $a \sin \left(2\pi \left(\frac{q}{\lambda} - \nu t \right) + \alpha \right)$ (q die Koordinate, t die Zeit, a die Amplitude, α die Phase — dargestellt wird irgendeine elektrische oder magnetische Feldstärkenkomponente), ist also räumlich und zeitlich unendlich ausgedehnt. Um dies zu vermeiden, müssen wir diesen Ausdruck, der wegen $\lambda = \frac{c}{\nu}$ auch $a \sin \left(2\pi \nu \left(\frac{q}{c} - t \right) + \alpha \right)$ geschrieben werden kann, durch ein anderes $F \left(\frac{q}{c} - t \right)$ ersetzen, welches nur in einem endlichen Intervall fürs Argument $\neq 0$ ist. Hat die Lichtwelle diese Form, so muß sie bekanntlich Fourier-analysiert werden:

$$F(x) = \int_0^{+\infty} a_\nu \sin(2\pi \nu x + \alpha_\nu) d\nu,$$

und das Interferenzbild zeigt alle Frequenzen ν an, deren $a_\nu \neq 0$ ist: und zwar das Frequenzintervall $\nu, \nu + d\nu$ mit der relativen Intensität $a_\nu^2 d\nu$. Die Streuung von ν , d. i. $\Delta\nu$, ist aus dieser Verteilung zu berechnen.

Wenn unser Wellenzug in x die Länge τ hat, d. h. in t bzw. q die Länge τ bzw. $c\tau$, so erkennt man, daß diese ν -Streuung $\sim \frac{1}{\tau}$ ist¹³⁷. Eine Unbestimmtheit des Ortes entsteht nun bei dieser Meßmethode dadurch, daß T bei den einzelnen Lichtemissionen Rückstöße $\frac{h\nu}{c}$ (in der Beobachtungsrichtung) erleidet, d. h. Geschwindigkeitsänderungen $\frac{h\nu}{mc}$. Wir können jedoch, da der Emissionsprozeß die Zeit τ in Anspruch nimmt, den Augenblick dieser Geschwindigkeitsänderung nicht genauer als τ lokalisieren — daher eine Lagenunbestimmtheit $\varepsilon \sim \frac{h\nu}{mc} \tau$. Also:

$$\varepsilon \sim \frac{h\nu}{mc} \tau, \quad \eta \sim \frac{mc \Delta\nu}{\nu} = \frac{mc}{\nu} \frac{1}{\tau}, \quad \varepsilon \eta \sim h.$$

Also wieder $\varepsilon \eta \sim h$.

Wenn T nicht, wie hier angenommen, selbst leuchtet, sondern fremdes Licht streut (d. h. wenn es beleuchtet wird), gestaltet sich die Rechnung ganz analog.

5. Die Projektionsoperatoren als Aussagen.

Wie in III. 1. betrachten wir ein physikalisches System S mit k Freiheitsgraden, dessen Zustandsraum demnach durch die k Koordinaten q_1, \dots, q_k beschrieben wird (vgl. auch I. 2.). Alle physikalischen Größen \mathfrak{M} , die im System S gebildet werden können, sind bei der Betrachtungsweise der klassischen Mechanik Funktionen von q_1, \dots, q_k und der konjugierten Impulse p_1, \dots, p_k : $\mathfrak{M} = \mathfrak{M}(q_1, \dots, q_k, p_1, \dots, p_k)$ [so ist z. B. die Energie die Hamiltonsche Funktion $H(q_1, \dots, q_k, p_1, \dots, p_k)$]. In der Quantenmechanik dagegen sind, wie wir schon in III. 1. andeuteten, die Größen \mathfrak{M} den hypermaximalen Hermiteschen Operatoren R eindeutig zugeordnet; insbesondere entsprechen q_1, \dots, q_k den Operatoren $Q_1 = q_1 \dots Q_k = q_k \dots$, und p_1, \dots, p_k den Operatoren $P_1 = \frac{h}{2\pi i} \frac{\partial}{\partial q_1} \dots P_k = \frac{h}{2\pi i} \frac{\partial}{\partial q_k} \dots$. Daß es im allgemeinen wegen der Nichtvertauschbarkeit der Q_i, P_i nicht möglich ist, $R = \mathfrak{M}(Q_1, \dots, Q_k, P_1, \dots, P_k)$ zu definieren, wurde schon in I. 2. am Falle der Hamiltonschen Funktion klargemacht. Ohne etwas Endgültiges über den Zusammenhang zwischen den $\mathfrak{M}(q_1, \dots, q_k, p_1, \dots, p_k)$ und den R aussagen zu können, haben wir immerhin in III. 1. und III. 3. die folgenden speziellen Feststellungen gemacht:

L. Wenn den gleichzeitig beobachtbaren Größen $\mathfrak{M}, \mathfrak{C}$ die Operatoren R, S entsprechen, so entspricht der Größe $a\mathfrak{M} + b\mathfrak{C}$ (a, b reelle Zahlen) der Operator $aR + bS$.

F. Wenn der Größe \mathfrak{N} der Operator R entspricht, so entspricht der Größe $F(\mathfrak{N})$ [$F(\lambda)$ eine beliebige reelle Funktion] der Operator $F(R)$.

L., F. lassen noch eine gewisse Verallgemeinerung zu. Die von F ist zwingend und lautet so:

F*. Wenn den gleichzeitig beobachtbaren Größen $\mathfrak{N}, \mathfrak{E}, \dots$ die Operatoren R, S, \dots entsprechen (die somit vertauschbar sind, ihre Anzahl sei endlich), so entspricht der Größe $F(\mathfrak{N}, \mathfrak{E}, \dots)$ der Operator $F(R, S, \dots)$.

Dabei wollen wir annehmen, daß $F(\lambda, \mu, \dots)$ ein reelles Polynom in λ, μ, \dots ist, damit der Sinn von $F(R, S, \dots)$ ein klarer sei (R, S, \dots sind vertauschbar), obwohl sich **F*** auch für beliebiges $F(\lambda, \mu, \dots)$ begründen ließe [zur Definition des allgemeinen $F(R, S, \dots)$ vgl. a. a. O. Anm. ⁹⁴]. Da nun jedes Polynom durch Wiederholen der drei Operationen $a\lambda, \lambda + \mu, \lambda\mu$ entsteht, genügt es, diese zu betrachten, und da $\lambda\mu = \frac{1}{4}((\lambda + \mu)^2 - (\lambda - \mu)^2)$ ist, d. h. gleich

$$\frac{1}{4} \cdot (\lambda + \mu)^2 + (-\frac{1}{4}) \cdot (\lambda + (-1) \cdot \mu)^2,$$

können wir diese drei Operationen auch durch $a\lambda, \lambda + \mu, \lambda^2$ ersetzen. Aber die zwei ersten fallen unter **L.**, die letzte unter **F.** Damit ist **F*** bewiesen.

L. dagegen wird in der Quantenmechanik auch auf den Fall ausgedehnt, wo $\mathfrak{N}, \mathfrak{E}$ nicht gleichzeitig meßbar sind. Wir wollen diese Frage erst später (in IV. 1.) erörtern, und uns vorläufig mit der Feststellung begnügen, daß es gar nicht klar ist, was für nicht gleichzeitig meßbare $\mathfrak{N}, \mathfrak{E}$ unter $a\mathfrak{N} + b\mathfrak{E}$ verstanden werden soll.

Neben den physikalischen Größen \mathfrak{N} gibt es aber noch etwas, was Gegenstand der Physik ist: nämlich die Eigenschaften der Zustände des Systems \mathcal{S} . Eine Eigenschaft ist es z. B., daß eine gewisse Größe \mathfrak{N} den Wert λ annimmt — oder, daß der Wert von \mathfrak{N} positiv ist — oder, daß die Werte zweier gleichzeitig beobachtbarer Größen $\mathfrak{N}, \mathfrak{E}$ gleich λ bzw. μ sind — oder, daß die Quadratsumme dieser Werte > 1 ist — usw. Wir bezeichnen die Größen mit $\mathfrak{N}, \mathfrak{E}, \dots$, die Eigenschaften wollen wir mit $\mathfrak{C}, \mathfrak{D}, \dots$ bezeichnen. Den Größen entsprachen die hypermaximalen Hermiteschen Operatoren R, S, \dots , wie soeben diskutiert wurde; was entspricht den Eigenschaften?

Wir können jeder Eigenschaft \mathfrak{C} eine Größe zuordnen, die wir so definieren: jede Messung, die über das Vorhandensein oder Nichtvorhandensein von \mathfrak{C} entscheidet, ist als Messung dieser Größe anzusehen; und zwar ist ihr Wert 1, wenn \mathfrak{C} vorhanden ist, und 0 im entgegengesetzten Falle. Diese \mathfrak{C} zugeordnete Größe wollen wir ebenfalls mit \mathfrak{C} bezeichnen.

Sie nimmt nur die Werte 0 und 1 an, und umgekehrt ist jede Größe \mathfrak{N} , die nur dieser zwei Werte fähig ist, einer Eigenschaft \mathfrak{C} zugeordnet, nämlich offenbar dieser: „der Wert von \mathfrak{N} ist $\neq 0$ “. Die

Eigenschaften zugeordneten Größen \mathfrak{C} sind also durch das obige Merkmal charakterisiert.

Daß \mathfrak{C} nur die Werte 0, 1 annimmt, läßt sich auch so formulieren: es bringt das Polynom $F(\lambda) = \lambda - \lambda^2$ identisch zum Verschwinden. Wenn \mathfrak{C} den Operator E hat, so hat $F(\mathfrak{C})$ den Operator $F(E) = E - E^2$, d. h. die Bedingung lautet $E - E^2 = 0$, oder $E = E^2$. Oder: der Operator E von \mathfrak{C} ist ein Projektionsoperator.

Den Eigenschaften \mathfrak{C} sind also (durch Vermittlung der dazugehörigen Größen \mathfrak{C} , die wir soeben definierten) die Projektionsoperatoren E zugeordnet. Oder auch, wenn wir neben $E = P_{\mathfrak{M}}$ auch die dazugehörige abgeschlossene Linearmannigfaltigkeit \mathfrak{M} betrachten, die abgeschlossenen Linearmannigfaltigkeiten \mathfrak{M} .

Der Kalkül mit den zusammengehörigen $\mathfrak{C}, E, \mathfrak{M}$ soll nun näher untersucht werden.

Wenn wir im Zustande φ entscheiden wollen, ob die Eigenschaft \mathfrak{C} vorliegt oder nicht, so müssen wir die Größe \mathfrak{C} messen, und feststellen, ob ihr Wert 1 ist oder 0 (dies ist nach Definition dasselbe). Die Wahrscheinlichkeit des ersteren, d. h. daß \mathfrak{C} vorliegt, ist somit dem Erwartungswert von \mathfrak{C} gleich, d. h.

$$(E\varphi, \varphi) = \|E\varphi\|^2 = \|P_{\mathfrak{M}}\varphi\|^2,$$

und die des letzteren, d. h. daß \mathfrak{C} nicht vorliegt, ist dem Erwartungswert von $1 - \mathfrak{C}$ gleich, d. h.

$$((1 - E)\varphi, \varphi) = \|(1 - E)\varphi\|^2 = \|\varphi - P_{\mathfrak{M}}\varphi\|^2.$$

[Die Summe ist natürlich gleich (φ, φ) , d. h. 1.] Somit ist \mathfrak{C} mit Sicherheit vorhanden bzw. nicht vorhanden, wenn die zweite bzw. die erste Wahrscheinlichkeit gleich 0 ist, d. h. für $P_{\mathfrak{M}}\varphi = \varphi$ bzw. $= 0$. D. h. wenn φ zu \mathfrak{M} gehört bzw. zu \mathfrak{M} orthogonal ist oder: wenn φ zu \mathfrak{M} bzw. zu $\mathfrak{N}_{\infty} - \mathfrak{M}$ gehört.

\mathfrak{M} kann also auch als Menge aller φ definiert werden, die die Eigenschaft \mathfrak{C} bestimmt besitzen. (Eigentlich nur der auf $\|\varphi\| = 1$ gelegene Teil von \mathfrak{M} , \mathfrak{M} selbst entsteht hieraus durch Multiplizieren mit positiven Konstanten und Hinzufügen der 0.)

Wenn wir die \mathfrak{C} entgegengesetzte Eigenschaft (das Leugnen von \mathfrak{C}) „non \mathfrak{C} “ nennen, so folgt aus obigem sofort: wenn zu \mathfrak{C} E, \mathfrak{M} gehören, so gehören zu „non \mathfrak{C} “ $1 - E, \mathfrak{N}_{\infty} - \mathfrak{M}$.

Wie bei Größen, so entsteht auch bei Eigenschaften die Frage der gleichzeitigen Meßbarkeit (eigentlich Entscheidbarkeit). Es ist klar, daß $\mathfrak{C}, \mathfrak{F}$ dann und nur dann gleichzeitig entscheidbar sind, wenn die dazugehörigen Größen $\mathfrak{C}, \mathfrak{F}$ gleichzeitig meßbar sind (ob mit beliebig großer oder mit absoluter Genauigkeit, ist gleichgültig, da sie ja nur der Werte 0, 1 fähig sind), d. h. wenn E, F vertauschbar sind, Dasselbe gilt für mehrere Eigenschaften $\mathfrak{C}, \mathfrak{F}, \mathfrak{G}, \dots$

Aus gleichzeitig entscheidbaren Eigenschaften \mathfrak{C} , \mathfrak{F} können die weiteren Eigenschaften „ \mathfrak{C} und \mathfrak{F} “ sowie „ \mathfrak{C} oder \mathfrak{F} “ gebildet werden. Die zu „ \mathfrak{C} und \mathfrak{F} “ gehörige Größe ist 1, wenn die zu \mathfrak{C} gehörige und die zu \mathfrak{F} gehörige beide gleich 1 sind, dagegen 0, wenn eine von diesen 0 ist — daher ist sie ihr Produkt. Ihr Operator ist also nach F^* das Produkt der Operatoren von \mathfrak{C} und von \mathfrak{F} , d. h. EF . Die dazugehörige abgeschlossene Linearmannigfaltigkeit ist nach Satz 14., II. 4., der gemeinsame Teil \mathfrak{P} von \mathfrak{M} , \mathfrak{N} .

„ \mathfrak{C} oder \mathfrak{F} “ dagegen kann so geschrieben werden:

$$\text{„non ((non } \mathfrak{C}) \text{ und (non } \mathfrak{F}))\text{“},$$

daher ist sein Operator

$$1 - (1 - E)(1 - F) = E + F - EF,$$

(dies ist natürlich nach Entstehung ein Projektionsoperator). Da $F - EF$ Projektionsoperator ist, ist die zu $E + F - EF$ gehörige Linearmannigfaltigkeit $\mathfrak{M} + (\mathfrak{N} - \mathfrak{P})$ (Satz 14., II. 4.). Sie ist Teil von $\{\mathfrak{M}, \mathfrak{N}\}$, und umfaßt offenbar \mathfrak{M} , also aus Symmetriegründen auch \mathfrak{N} , also $\{\mathfrak{M}, \mathfrak{N}\}$ — somit ist sie gleich $\{\mathfrak{M}, \mathfrak{N}\}$, und dieses, da es demnach abgeschlossen ist, gleich $[\mathfrak{M}, \mathfrak{N}]$.

Ist \mathfrak{C} eine Eigenschaft, die immer vorliegt (d. h. leer), so ist ihre Größe identisch gleich 1, also $E = 1$, $\mathfrak{M} = \mathfrak{N}_\infty$. Liegt dagegen \mathfrak{C} nie vor (d. h. ist es unmöglich), so ist ihre Größe identisch gleich 0, also $E = 0$, $\mathfrak{M} = (0)$. Sind zwei Eigenschaften \mathfrak{C} , \mathfrak{F} unverträglich, so müssen sie allenfalls gleichzeitig entscheidbar sein, und „ \mathfrak{C} und \mathfrak{F} “ muß unmöglich sein: d. h. E, F vertauschbar, $EF = 0$. Da aber $EF = 0$ die Vertauschbarkeit nach sich zieht (Satz 14., II. 4.), ist es für sich allein charakteristisch. Wenn E, F als vertauschbar vorausgesetzt werden, so besagt $EF = 0$ bloß, daß der gemeinsame Teil von \mathfrak{M} und \mathfrak{N} nur aus der 0 besteht — jedoch folgt aus dieser Bedingung allein die Vertauschbarkeit von E, F noch nicht. Vielmehr besagt $EF = 0$ für $\mathfrak{M}, \mathfrak{N}$ allgemein dies: ganz \mathfrak{M} ist zu ganz \mathfrak{N} orthogonal (Satz 14., II. 4.).

Wenn \mathfrak{N} eine Größe mit dem Operator R ist, zu dem die Zerlegung der Einheit $E(\lambda)$ gehören möge, so ist der Operator der Eigenschaft „ \mathfrak{N} liegt im Intervalle $I = \{\lambda', \mu'\}$ “ ($\lambda' \leq \mu'$) offenbar $E(\mu') - E(\lambda')$, z. B. weil die Wahrscheinlichkeit hierfür $(E(\mu') - E(\lambda')\varphi, \varphi)$ ist (vgl. W. in III. 1.); oder weil die zu dieser Eigenschaft gehörige Größe $\mathfrak{C} = F(\mathfrak{N})$ ist, mit

$$F(\lambda) = \begin{cases} 1, & \text{für } \lambda' < \lambda \leq \mu', \\ 0, & \text{sonst} \end{cases}$$

und $F(R) = E(\mu') - E(\lambda')$ gilt (vgl. II. 8. oder III. 1.). Wir nannten diesen Operator in III. 1. auch $E(I)$.

Zusammenfassend haben wir also über den Zusammenhang zwischen Eigenschaften \mathfrak{C} , ihren Projektionsoperatoren E und deren abgeschlossenen Linearmannigfaltigkeiten \mathfrak{M} folgendes ermittelt:

$\alpha)$ Im Zustand φ liegt die Eigenschaft \mathfrak{C} mit den Wahrscheinlichkeiten

$$(E\varphi, \varphi) = \|E\varphi\|^2 = \|P_{\mathfrak{M}}\varphi\|^2$$

bzw.

$$((1-E)\varphi, \varphi) = \|(1-E)\varphi\|^2 = \|\varphi - P_{\mathfrak{M}}\varphi\|^2$$

vor bzw. nicht vor.

$\beta)$ Bestimmt vorhanden bzw. nicht vorhanden ist \mathfrak{C} für die φ von \mathfrak{M} bzw. $\mathfrak{R}_{\infty} - \mathfrak{M}$, und nur für diese.

$\gamma)$ Für die gleichzeitige Entscheidbarkeit mehrerer Eigenschaften $\mathfrak{C}, \mathfrak{F}, \dots$ ist die Vertauschbarkeit ihrer Operatoren E, F, \dots charakteristisch.

$\delta)$ Gehören zu \mathfrak{C} E, \mathfrak{M} , so gehören zu „non \mathfrak{C} “ $1-E, \mathfrak{R}_{\infty} - \mathfrak{M}$.

$\epsilon)$ Gehören zu \mathfrak{C} E, \mathfrak{M} , zu \mathfrak{F} F, \mathfrak{N} , und sind $\mathfrak{C}, \mathfrak{F}$ gleichzeitig entscheidbar, so gehören zu „ \mathfrak{C} und \mathfrak{F} “ EF , gemeinsamer Teil von $\mathfrak{M}, \mathfrak{N}$, und zu „ \mathfrak{C} oder \mathfrak{F} “ $E + F - EF, \{\mathfrak{M}, \mathfrak{N}\}$ (dieses ist gleich $[\mathfrak{M}, \mathfrak{N}]$).

$\eta)$ \mathfrak{C} gilt immer, wenn $E = 1$ ist, oder auch $\mathfrak{M} = \mathfrak{R}_{\infty}$; es gilt nie, wenn $E = 0$ ist oder auch $\mathfrak{M} = (0)$.

$\theta)$ $\mathfrak{C}, \mathfrak{F}$ sind unverträglich, wenn $EF = 0$ ist, oder auch ganz \mathfrak{M} zu ganz \mathfrak{N} orthogonal.

$\zeta)$ Sei \mathfrak{N} eine Größe, R ihr Operator, I ein Intervall. Sei $E(\lambda)$ die zu R gehörige Zerlegung der Einheit, $I = \{\lambda', \mu'\}$ ($\lambda' \leq \mu'$), $E(I) = E(\mu') - E(\lambda')$ (vgl. III. 1.). Dann gehört zur Eigenschaft „ \mathfrak{N} liegt in I “ der Operator $E(I)$.

Aus $\alpha)$ — $\zeta)$ können wir die früheren Wahrscheinlichkeitsaussagen $W., E_1., E_2.$ herleiten, sowie die Aussagen von III. 3. über gleichzeitige Meßbarkeit. Daß die letzteren mit $\gamma)$ gleichbedeutend sind, ist klar; $W.$ folgt aus $\alpha), \epsilon), \zeta)$, und es hat $E_1., E_2.$ zur Folge.

Wie man sieht, ermöglicht die Beziehung zwischen den Eigenschaften eines physikalischen Systems einerseits und den Projektionsoperatoren andererseits eine Art Logikkalkül mit diesem. Nur ist dieser, gegenüber demjenigen der gewöhnlichen Logik, durch die für die Quantenmechanik charakteristische Begriffsbildung der „gleichzeitigen Entscheidbarkeit“ bereichert.

Der auf Projektionsoperatoren gegründete Kalkül mit Aussagen hat übrigens dem auf die Gesamtheit aller (hypermaximalen) Hermiteschen Operatoren gegründeten Kalkül mit Größen gegenüber noch den Vorzug, daß der Begriff der „gleichzeitigen Entscheidbarkeit“ eine Verfeinerung des Begriffes der „gleichzeitigen Meßbarkeit“ darstellt. Damit z. B. die Fragen „liegt \mathfrak{N} in I ?“ und „liegt \mathfrak{C} in J ?“ [$\mathfrak{N}, \mathfrak{C}$ haben die bzw. Operatoren R bzw. S , diese die Zerlegungen der Einheit $E(\lambda)$ bzw. $F(\mu), I = \{\lambda', \lambda''\}, J = \{\mu', \mu''\}$] gleichzeitig entscheidbar seien, brauchen nach $\gamma), \zeta)$ nur die Operatoren $E(I) = E(\lambda'') - E(\lambda')$ und $F(J) = F(\mu'') - F(\mu')$ vertauschbar zu sein — zur gleichzeitigen Meßbarkeit von $\mathfrak{N}, \mathfrak{C}$ dagegen ist die Vertauschbarkeit aller $E(\lambda)$ mit allen $F(\mu)$ notwendig.

6. Lichttheorie.

Die in I. 2. angeführten statistischen Aussagen der Quantenmechanik haben wir alle wiedergefunden, und sogar wesentlich verallgemeinert und systematisch ausgestaltet — mit einer einzigen Ausnahme. Und zwar fehlt uns der Heisenbergsche Ausdruck für die Übergangswahrscheinlichkeit aus einem stationären Zustande eines gequantelten Systems in einen anderen — obwohl gerade dieser bei der Entstehung der Quantenmechanik eine wichtige Rolle spielte (vgl. das dazu in I.2. Gesagte). Im folgenden soll nach DIRAC¹³⁸ gezeigt werden, wie diese Übergangswahrscheinlichkeiten aus den gewöhnlichen statistischen Aussagen der Quantenmechanik, d. h. aus der soeben dargelegten Theorie, hergeleitet werden können; dies ist um so wichtiger, als wir dabei einen tieferen Einblick in die Übergangsmechanismen der stationären Zustände und in die Zusammenhänge der Einstein-Bohrschen Energie-Frequenzbeziehungen tun werden. Die darzulegende Lichttheorie von DIRAC ist überhaupt wohl eine der schönsten Leistungen auf quantenmechanischem Gebiete.

Sei S ein System (etwa ein gequanteltes Atom) mit einer Energie, der der Hermitesche Operator H_0 entspricht. Wir bezeichnen die Koordinaten, die den Zustandsraum von S beschreiben (wenn z. B. S aus l Teilchen besteht, sind es $3l$ cartesische Koordinaten: $x_1 = q_1, y_1 = q_2, z_1 = q_3, \dots, x_l = q_{3l-2}, y_l = q_{3l-1}, z_l = q_{3l}$), zur Abkürzung mit ξ ; ferner habe H_0 der Einfachheit halber ein reines Punktspektrum: Eigenwerte W_1, W_2, \dots , Eigenfunktionen $\varphi_1(\xi), \varphi_2(\xi), \dots$ (es dürfen einige W_n -s zusammenfallen). Ein beliebiger Zustand von S , d. h. eine Wellenfunktion $\varphi(\xi)$, entwickelt sich nach der zeitabhängigen Schrödingerschen Differentialgleichung (vgl. III. 2.):

$$\frac{\hbar}{2\pi i} \frac{\partial}{\partial t} \varphi_t(\xi) = -H_0 \varphi_t(\xi),$$

d. h. wenn für $t = t_0$ $\varphi_t(\xi) = \varphi(\xi) = \sum_1^{\infty} a_k \varphi_k(\xi)$ ist, so ist allgemein

$\varphi_t(\xi) = \sum_k a_k e^{-\frac{2\pi i}{\hbar} W_k(t-t_0)} \varphi_k(\xi)$. Ein Zustand $\varphi(\xi) = \varphi_k(\xi)$ geht also in $e^{-\frac{2\pi i}{\hbar} W_k(t-t_0)} \varphi_k(\xi)$ über, d. h. (da der Faktor $e^{-\frac{2\pi i}{\hbar} W_k(t-t_0)}$ unwesentlich ist) in sich selbst: die $\varphi_k(\xi)$ sind eben stationär. Wir finden also zunächst überhaupt keine Übergänge aus einem $\varphi_k(\xi)$ in andere — wie kommt es dann, daß doch von solchen geredet wird? Die Erklärung ist einfach: wir haben das Agens, das diese Übergänge veranlaßt, außer acht gelassen — das Licht. Die stationären Quantenbahnen zerfallen ja schon auf Grund der ursprünglichen Bohrschen Theorie nur unter Lichtemission (vgl. a. a. O. Anm. 5), wenn aber diese (wie im soeben gegebenen Ansatz) außer acht gelassen wird, so ist es sehr

vernünftig, daß eine absolute und ewige Stabilität herauskommt. Wir müssen also das zu untersuchende System erweitern, indem wir das von S evtl. zu emittierende Licht — also überhaupt alles Licht, das mit S u. U. in Wechselwirkung treten kann — mit in dasselbe aufnehmen. Das System, das vom Lichte gebildet wird (d. i. das elektromagnetische Feld der klassischen Theorie, abzüglich der von den Elektronen- und Kernladungen herrührenden statischen Felder), heiße L , es gilt $S + L$ zu untersuchen.

Es gilt also die folgenden Dinge zu finden:

1. Einen Ansatz für die quantenmechanische Beschreibung von L , d. h. es ist der Zustandsraum von L anzugeben.

2. Den Energieoperator von $S + L$. Dieser zerfällt in drei Teile.

α) Die unabhängig von L vorhandene Energie von S , d. h. die ungestörte S -Energie: fürs System S war es der Operator H_0 .

β) Die unabhängig von S vorhandene Energie von L , d. h. die ungestörte L -Energie. Ihr Operator heiße H_l .

γ) Der Rest der Energie, d. h. die Wechselwirkungsenergie von S und L . Ihr Operator heiße H_w .

Wie man sieht, handelt es sich hier um Fragen, die man im Sinne der Grundprinzipien der Quantenmechanik zuerst klassisch beantworten muß, um das so erzielte Resultat dann in Operatoren umschreiben zu können (vgl. I. 2.). Wir stellen uns daher zunächst auf einen rein klassischen Standpunkt bezüglich der Natur des Lichtes: wir fassen es (im Sinne der elektromagnetischen Lichttheorie) als einen Schwingungszustand des elektromagnetischen Feldes auf¹³⁹.

Um überflüssigen Komplikationen (Verlorengehen des Lichtes im unendlichen Raume usw.) zu entgehen, denken wir uns S und L in einen sehr großen Hohlraum H vom Volum \mathcal{V} eingeschlossen, der etwa spiegelnde Wände haben soll. Der Zustand des elektromagnetischen Feldes in H ist bekanntlich von den elektrischen und magnetischen Feldstärken $\mathfrak{E} = \{\mathfrak{E}_x, \mathfrak{E}_y, \mathfrak{E}_z\}$, $\mathfrak{H} = \{\mathfrak{H}_x, \mathfrak{H}_y, \mathfrak{H}_z\}$ beschrieben. Alle Größen $\mathfrak{E}_x, \dots, \mathfrak{H}_z$ sind Funktionen der cartesischen Koordinaten x, y, z des allgemeinen Punktes von H und der Zeit t ; es sei noch darauf hingewiesen, daß wir jetzt mehrfach reelle räumliche Vektoren $\mathfrak{a} = \{\mathfrak{a}_x, \mathfrak{a}_y, \mathfrak{a}_z\}$, $\mathfrak{b} = \{\mathfrak{b}_x, \mathfrak{b}_y, \mathfrak{b}_z\}$, usw. betrachten werden (z. B. \mathfrak{E} , \mathfrak{H}), und für diese Bildungen wie das innere Produkt

$$[\mathfrak{a}, \mathfrak{b}] = \mathfrak{a}_x \mathfrak{b}_x + \mathfrak{a}_y \mathfrak{b}_y + \mathfrak{a}_z \mathfrak{b}_z$$

— eine Verwechslungsfahr mit dem inneren Produkt (φ, ψ) in \mathfrak{R}_∞ besteht wohl nicht. Mit Δ werden wir den Differentialoperator $\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}$ bezeichnen, mit div , grad , rot die bekannten vektoriiellen Differentialoperationen. Die $\vec{\text{Vektoren}}$ \mathfrak{E} , \mathfrak{H} erfüllen im leeren

Hohlraum \mathbf{H} die Maxwell'schen Gleichungen

$$\begin{aligned} \operatorname{div} \mathfrak{S} &= 0, & \operatorname{rot} \mathfrak{E} + \frac{1}{c} \frac{\partial}{\partial t} \mathfrak{S} &= 0, \\ \operatorname{div} \mathfrak{E} &= 0, & \operatorname{rot} \mathfrak{S} - \frac{1}{c} \frac{\partial}{\partial t} \mathfrak{E} &= 0. \end{aligned}$$

Die erste Gleichung der ersten Zeile wird durch den Ansatz $\mathfrak{S} = \operatorname{rot} \mathfrak{A}$ befriedigt ($\mathfrak{A} = \{\mathfrak{A}_x, \mathfrak{A}_y, \mathfrak{A}_z\}$ ist das sogenannte Vektorpotential, auch seine Komponenten hängen von x, y, z, t ab), und die zweite dann durch $\mathfrak{E} = -\frac{1}{c} \frac{\partial}{\partial t} \mathfrak{A}$. Die Gleichungen der zweiten Zeile bedingen nun:

$$(A.) \quad \operatorname{div} \mathfrak{A} = 0, \quad \Delta \mathfrak{A} - \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} \mathfrak{A} = 0.$$

[Die Einführung des Vektorpotentials wird meistens zur Erhöhung der Symmetrie in Raum und Zeit etwas anders vorgenommen. Daß dieser \mathfrak{A} -Ansatz die allgemeinste Lösung der Maxwell'schen Gleichungen ergibt — wobei insbesondere zu beachten ist, daß die erste Gleichung der zweiten Zeile eigentlich nur $\frac{\partial}{\partial t} \operatorname{div} \mathfrak{A} = 0$, d. h. $\operatorname{div} \mathfrak{A} = f(x, y, z)$ ergibt — wird in den meisten Behandlungen der Maxwell'schen Theorie gezeigt, weshalb es hier nicht weiter erörtert werde. Vgl. a. a. O. Anm. ¹³⁹.] Fürs folgende ist (A.) unser Ausgangspunkt. Die Tatsache, daß die Wände von \mathbf{H} spiegelnd sind, findet ihren Ausdruck darin, daß \mathfrak{A} am Rande von \mathbf{H} zu den Wänden von \mathbf{H} senkrecht stehen muß. Die bekannte Methode, um alle derartigen \mathfrak{A} aufzufinden, ist diese: Da t in das ganze Problem nicht explizite eingeht, ist das allgemeinste \mathfrak{A} ein Linearaggregat solcher Lösungen, die Produkte eines x, y, z -abhängigen Vektors mit einem t -abhängigen Skalar sind:

$$\mathfrak{A} \equiv \mathfrak{A}(xyz t) \equiv \bar{\mathfrak{A}}(xyz) \cdot \tilde{q}(t).$$

Also ergibt (A.):

$$(A_1.) \quad \operatorname{div} \bar{\mathfrak{A}} = 0, \quad \Delta \bar{\mathfrak{A}} = \eta \bar{\mathfrak{A}}, \quad \bar{\mathfrak{A}} \text{ am Rande von } \mathbf{H} \text{ senkrecht,}$$

$$(A_2.) \quad \frac{\partial^2}{\partial t^2} \tilde{q}(t) = c^2 \eta \tilde{q}(t),$$

wobei η nach (A₁.) nur von x, y, z , nach (A₂.) nur von t abhängt — also konstant ist.

(A₁.) ist daher ein Eigenwertproblem, η ist der Eigenwertparameter, $\bar{\mathfrak{A}}$ die allgemeine Eigenfunktion. Die Theorie dieses Problems ist restlos durchgeführt, wir geben hier nur die Resultate an¹⁴⁰: (A₁.) hat ein reines Punktspektrum, alle Eigenwerte η_1, η_2, \dots (die entsprechenden $\bar{\mathfrak{A}}$ seien $\bar{\mathfrak{A}}_1, \bar{\mathfrak{A}}_2, \dots$) sind negativ und streben für $n \rightarrow +\infty$ gegen $-\infty$. Wir können ein vollständiges System $\bar{\mathfrak{A}}_1, \bar{\mathfrak{A}}_2, \dots$ durch

$$\iint_{\mathbf{H}} \iint [\bar{\mathfrak{A}}_m, \bar{\mathfrak{A}}_n] dx dy dz = \begin{cases} 4\pi c^2, & \text{für } m = n, \\ 0, & \text{für } m \neq n, \end{cases}$$

normieren (wir wählen $4\pi c^2$ statt des sonst üblichen 1, weil sich dies später als etwas praktischer erweisen wird). Nennen wir $\eta_n (< 0)$ — $\frac{4\pi^2 \varrho_n^2}{c^2}$ ($\varrho_n > 0$, für $n \rightarrow +\infty$ ist auch $\varrho_n \rightarrow +\infty$), so ergibt (\mathbf{A}_2):

$$\tilde{q}_n(t) = \gamma \cos 2\pi \varrho_n(t - \tau) \quad (\gamma, \tau \text{ beliebig}).$$

Also ist die allgemeinste Lösung \mathfrak{A} gleich:

$$\mathfrak{A} = \mathfrak{A}(xyz) \equiv \sum_1^n \bar{\mathfrak{A}}_n(xyz) \cdot \tilde{q}_n(t) = \sum_1^n \gamma_n \cdot \bar{\mathfrak{A}}_n(xyz) \cdot \gamma_n \cos 2\pi \varrho_n(t - \tau_n)$$

($\gamma_1, \gamma_2, \dots, \tau_1, \tau_2, \dots$ beliebige reelle Konstanten).

Die Energie des willkürlichen Feldes $\mathfrak{A} = \sum_1^n \bar{\mathfrak{A}}_n(xyz) \cdot \tilde{q}_n(t)$ [\mathfrak{A} wird nicht als Lösung von (\mathbf{A}) angenommen, d. h. die $\tilde{q}_n(t)$ sind beliebig] beträgt

$$\begin{aligned} E &= \frac{1}{8\pi} \iiint_{\mathbf{H}} ([\mathfrak{E}, \mathfrak{E}] + [\mathfrak{H}, \mathfrak{H}]) dx dy dz \\ &= \frac{1}{8\pi} \iiint_{\mathbf{H}} \left(\left[\frac{\partial}{\partial t} \mathfrak{A}, \frac{\partial}{\partial t} \mathfrak{A} \right] + [\text{rot } \mathfrak{A}, \text{rot } \mathfrak{A}] \right) dx dy dz \\ &= \frac{1}{8\pi} \sum_1^n \iiint_{\mathbf{H}} \left(\frac{1}{c^2} \frac{\partial}{\partial t} \tilde{q}_m(t) \frac{\partial}{\partial t} \tilde{q}_n(t) [\bar{\mathfrak{A}}_m, \bar{\mathfrak{A}}_n] \right. \\ &\quad \left. + \tilde{q}_m(t) \tilde{q}_n(t) [\text{rot } \bar{\mathfrak{A}}_m, \text{rot } \bar{\mathfrak{A}}_n] \right) dx dy dz. \end{aligned}$$

Durch partielle Integration findet man¹⁴¹:

$$\begin{aligned} \iiint_{\mathbf{H}} [\text{rot } \bar{\mathfrak{A}}_m, \text{rot } \bar{\mathfrak{A}}_n] dx dy dz &= \iiint_{\mathbf{H}} [\text{rot rot } \bar{\mathfrak{A}}_m, \bar{\mathfrak{A}}_n] dx dy dz \\ &= \iiint_{\mathbf{H}} [-\Delta \bar{\mathfrak{A}}_m + \text{grad div } \bar{\mathfrak{A}}_m, \bar{\mathfrak{A}}_n] dx dy dz \\ &= \frac{4\pi^2 \varrho_m^2}{c^2} \iiint_{\mathbf{H}} [\bar{\mathfrak{A}}_m, \bar{\mathfrak{A}}_n] dx dy dz, \end{aligned}$$

also ist

$$\begin{aligned} E &= \frac{1}{8\pi} \sum_1^n \left(\frac{1}{c^2} \frac{\partial}{\partial t} \tilde{q}_m(t) \frac{\partial}{\partial t} \tilde{q}_n(t) + \frac{4\pi^2 \varrho_m^2}{c^2} \tilde{q}_m(t) \tilde{q}_n(t) \right) \iiint_{\mathbf{H}} [\bar{\mathfrak{A}}_m, \bar{\mathfrak{A}}_n] dx dy dz \\ &= \frac{1}{2} \sum_1^n \left[\left(\frac{\partial}{\partial t} \tilde{q}_m(t) \right)^2 + 4\pi^2 \varrho_m^2 (\tilde{q}_m(t))^2 \right]. \end{aligned}$$

Wir können aber die $\tilde{q}_1, \tilde{q}_2, \dots$ als die den augenblicklichen Zustand des Feldes beschreibenden Koordinaten ansehen, d. h. als die Koordi-

naten des Zustandsraumes von \mathbf{L} , aus der Formel

$$E = \frac{1}{2} \sum_1^{\infty} \left(\left(\frac{\partial}{\partial t} \tilde{q}_n \right)^2 + 4\pi^2 \varrho_n^2 \tilde{q}_n^2 \right)$$

bestimmt sich der konjugierte Impuls \tilde{p}_n (klassisch-mechanisch!) zu

$$\tilde{p}_n = \frac{\partial}{\partial \left(\frac{\partial}{\partial t} \tilde{q}_n \right)} E = \frac{\partial}{\partial t} \tilde{q}_n, \quad E = \frac{1}{2} \sum_1^{\infty} (\tilde{p}_n^2 + 4\pi^2 \varrho_n^2 \tilde{q}_n^2)$$

(vgl. I. 2.). Hieraus entstehen aber klassisch-mechanisch die Bewegungsgleichungen

$$\frac{\partial}{\partial t} \tilde{p}_n = - \frac{\partial}{\partial \tilde{q}_n} E = - 4\pi^2 \varrho_n^2 \tilde{q}_n, \quad \frac{\partial}{\partial t} \tilde{q}_n = \frac{\partial}{\partial \tilde{p}_n} E = \tilde{p}_n,$$

d. h.

$$\frac{\partial^2}{\partial t^2} \tilde{q}_n + 4\pi^2 \varrho_n^2 \tilde{q}_n = 0,$$

also genau das aus den Maxwell'schen Gleichungen folgende (\mathbf{A}_2). Somit gilt der Jeans'sche Satz:

Das Strahlungsfeld \mathbf{L} kann durch die Koordinaten $\tilde{q}_1, \tilde{q}_2, \dots$ — die mit dem, das Feld beschreibenden, augenblicklichen Vektorpotential \mathfrak{A} durch

$$\mathfrak{A} \equiv \mathfrak{A}(x y z) \equiv \sum_1^{\infty} \tilde{q}_n \bar{\mathfrak{A}}_n(x y z)$$

zusammenhängen — vermittelt der Energie (Hamilton'schen Funktion)

$$E = \frac{1}{2} \sum_1^{\infty} (\tilde{p}_n^2 + 4\pi^2 \varrho_n^2 \tilde{q}_n^2)$$

rein klassisch-mechanisch beschrieben werden.

Ein auf der Geraden festgehaltener Punkt von der Masse 1, mit der Koordinate \tilde{q} , der im Potentialfelde $C\tilde{q}^2$, $C = 2\pi^2\varrho^2$, liegt, hat die Energie $\frac{1}{2} \left[\left(\frac{\partial}{\partial t} \tilde{q} \right)^2 + 4\pi^2 \varrho^2 \tilde{q}^2 \right]$. Oder, da wieder $\tilde{p} = \frac{\partial}{\partial t} \tilde{q}$ herauskommt, $\frac{1}{2} (\tilde{p}^2 + 4\pi^2 \varrho^2 \tilde{q}^2)$. Seine Bewegungsgleichung ist somit $\frac{\partial^2}{\partial t^2} \tilde{q} + 4\pi^2 \varrho^2 \tilde{q} = 0$, deren Lösung $\tilde{q} = \gamma \cos 2\pi \varrho (t - \tau)$ (γ, τ beliebig). Im Hinblick auf seine Bewegungsform heißt dieses System „linearer Oszillator von der Frequenz ϱ “. \mathbf{L} ist somit als Vereinigung einer Folge linearer Oszillatoren anzusehen, deren Frequenzen die Eigenfrequenzen des Hohlraumes \mathbf{H} sind: $\varrho_1, \varrho_2, \dots$

Diese „mechanische“ Beschreibung des elektromagnetischen Feldes ist darum wichtig, weil sie sofort im Sinne der üblichen Methode quantenmechanisch umgedeutet werden kann: Der Zustandsraum von \mathbf{L} wird durch $\tilde{q}_1, \tilde{q}_2, \dots$ beschrieben, im Ausdruck von E sind \tilde{p}_n, \tilde{q}_n durch $\frac{h}{2\pi i} \frac{\partial}{\partial \tilde{q}_n} \dots$ bzw. $\tilde{q}_n \dots$ zu ersetzen — wir nennen diese Operatoren \tilde{P}_n

bzw. \tilde{Q}_n . Damit sind die Fragen 1. und 2. β) beantwortet, insbesondere ist

$$H_l = \frac{1}{2} \sum_1^{\infty} \tilde{P}_n^2 + 4\pi^2 \sum_n \tilde{Q}_n^2$$

der im Sinne von 2. β) aufzusuchende Operator. 2. α) war von vornherein gelöst, da wir H_0 als bekannt annahmen. Es bleibt also nur noch 2. γ) übrig, welches aber nun auch keine Schwierigkeiten mehr bereitet.

Klassisch-elektrodynamisch ist die Wechselwirkung von \mathbf{S} mit \mathbf{L} so zu berechnen: \mathbf{S} bestehe aus l -Teilchen (etwa Protonen und Elektronen) mit den bzw. Ladungen und Massen $e_1, m_1, \dots, e_l, m_l$, und den cartesischen Koordinaten $x_1 = q_1, y_1 = q_2, z_1 = q_3, \dots, x_l = q_{3l-2}, y_l = q_{3l-1}, z_l = q_{3l}$ (diese bilden das Symbol ξ von früher), die entsprechenden Impulse seien $p_1^x, p_1^y, p_1^z, \dots, p_l^x, p_l^y, p_l^z$. Die Wechselwirkungsenergie beträgt dann (in ausreichender Näherung)

$$\sum_1^l \frac{e_\nu}{c m_\nu} (p_\nu^x \mathfrak{A}_x(x_\nu, y_\nu, z_\nu) + p_\nu^y \mathfrak{A}_y(x_\nu, y_\nu, z_\nu) + p_\nu^z \mathfrak{A}_z(x_\nu, y_\nu, z_\nu)). \quad 142$$

Der entsprechende Operator der Quantenmechanik entsteht, wenn wir $p_\nu^x, p_\nu^y, p_\nu^z, x_\nu, y_\nu, z_\nu$ ($\nu = 1, \dots, l$) durch die Operatoren

$$\frac{h}{2\pi i} \frac{\partial}{\partial x_\nu}, \dots, \frac{h}{2\pi i} \frac{\partial}{\partial y_\nu}, \dots, \frac{h}{2\pi i} \frac{\partial}{\partial z_\nu}, \dots, x_\nu, \dots, y_\nu, \dots, z_\nu, \dots,$$

die $P_\nu^x, P_\nu^y, P_\nu^z, Q_\nu^x, Q_\nu^y, Q_\nu^z$ heißen mögen, ersetzen. Wenn wir noch

$$\mathfrak{A}(x y z) = \sum_1^{\infty} \varrho_n \bar{\mathfrak{A}}_n(x y z)$$

beachten, so haben wir das gesuchte H_w :

$$H_w = \sum_1^{\infty} \sum_1^l \frac{e_\nu}{c m_\nu} \tilde{Q}_n \{ P_\nu^x \bar{\mathfrak{A}}_{n,x}(Q_\nu^x, Q_\nu^y, Q_\nu^z) + P_\nu^y \bar{\mathfrak{A}}_{n,y}(Q_\nu^x, Q_\nu^y, Q_\nu^z) + P_\nu^z \bar{\mathfrak{A}}_{n,z}(Q_\nu^x, Q_\nu^y, Q_\nu^z) \}.$$

Hierbei ist jedoch zu beachten, daß wir beim Ersetzen der Produkte $p_\nu^x \bar{\mathfrak{A}}_{n,x}(x_\nu, y_\nu, z_\nu), \dots$ durch Operatoren willkürlicherweise die Reihenfolge $P_\nu^x \bar{\mathfrak{A}}_{n,x}(Q_\nu^x, Q_\nu^y, Q_\nu^z), \dots$ festgesetzt haben — obwohl wir ebensogut $\bar{\mathfrak{A}}_{n,x}(Q_\nu^x, Q_\nu^y, Q_\nu^z) P_\nu^x, \dots$ hätten nehmen können, und zur Sicherung des Hermiteschen Charakters des entstehenden Operators eigentlich eine symmetrische Form, wie $\frac{1}{2} (P_\nu^x \bar{\mathfrak{A}}_{n,x}(Q_\nu^x, Q_\nu^y, Q_\nu^z) + \bar{\mathfrak{A}}_{n,x}(Q_\nu^x, Q_\nu^y, Q_\nu^z) P_\nu^x), \dots$ erforderlich wäre. Glücklicherweise macht all dies keinen Unterschied aus, denn es ist

$$\begin{aligned} & [P_\nu^x \bar{\mathfrak{A}}_{n,x}(Q_\nu^x, Q_\nu^y, Q_\nu^z) + \dots] - [\bar{\mathfrak{A}}_{n,x}(Q_\nu^x, Q_\nu^y, Q_\nu^z) P_\nu^x + \dots] \\ &= [P_\nu^x \bar{\mathfrak{A}}_{n,x}(Q_\nu^x, Q_\nu^y, Q_\nu^z) - \bar{\mathfrak{A}}_{n,x}(Q_\nu^x, Q_\nu^y, Q_\nu^z) P_\nu^x] + \dots \quad 143 \\ &= \frac{h}{2\pi i} \frac{\partial}{\partial x} \bar{\mathfrak{A}}_{n,x}(Q_\nu^x, Q_\nu^y, Q_\nu^z) + \dots = \frac{h}{2\pi i} \operatorname{div} \bar{\mathfrak{A}}_n(Q_\nu^x, Q_\nu^y, Q_\nu^z) = 0. \end{aligned}$$

Damit wäre die Gesamtenergie unseres Systems $\mathbf{S} + \mathbf{L}$ bzw. ihr Operator

$$H = H_0 + H_l + H_w,$$

genau angegeben. Ehe wir aber H weiter umformen, bemerken wir noch folgendes: $\mathbf{S} + \mathbf{L}$ -s Zustandsraum wird durch die Koordinaten ξ (d. h. q_1, \dots, q_{3l} oder auch $x_1, y_1, z_1, \dots, x_l, y_l, z_l$) und $\tilde{q}_1, \tilde{q}_2, \dots$ beschrieben, von diesen hängt also auch die Wellenfunktion ab. Nun ist es formal unbequem und bedenklich, Systeme mit unendlich vielen Freiheitsgraden bzw. Wellenfunktionen mit unendlich vielen Argumenten zuzulassen — unsere Anweisungen bezogen sich ja stets auf endlich viele Koordinaten. Wir wollen darum von den $\tilde{q}_1, \tilde{q}_2, \dots$ zunächst nur die N ersten, $\tilde{q}_1, \dots, \tilde{q}_N$, berücksichtigen (d. h. \mathfrak{A} auf die Linearaggregate von $\mathfrak{A}_1, \dots, \mathfrak{A}_N$ beschränken), und erst am fertigen Resultat den sachlich notwendigen Grenzübergang $N \rightarrow +\infty$ vollziehen.

So wird:

$$\begin{aligned} H = H_0 + \frac{1}{2} \sum_1^N (\tilde{P}_n^2 + 4\pi^2 \varrho_n^2 \tilde{Q}_n^2) \\ + \sum_1^N \sum_1^l \frac{e_\nu}{c m_\nu} \tilde{Q}_n \{ P_\nu^x \bar{\mathfrak{A}}_{n,x}(Q_\nu^x, Q_\nu^y, Q_\nu^z) + \\ + P_\nu^y \bar{\mathfrak{A}}_{n,y}(Q_\nu^x, Q_\nu^y, Q_\nu^z) + P_\nu^z \bar{\mathfrak{A}}_{n,z}(Q_\nu^x, Q_\nu^y, Q_\nu^z) \}. \end{aligned}$$

Es erweist sich als zweckmäßig, an Stelle von \tilde{P}_n, \tilde{Q}_n den (nicht Hermiteschen!) Operator \tilde{R}_n und seine Adjungierte \tilde{R}_n^* einzuführen:

$$\tilde{R}_n = \frac{1}{\sqrt{2\hbar\varrho_n}} (2\pi\varrho_n \tilde{Q}_n + i\tilde{P}_n), \quad \tilde{R}_n^* = \frac{1}{\sqrt{2\hbar\varrho_n}} (2\pi\varrho_n \tilde{Q}_n - i\tilde{P}_n).$$

Dann ist $\tilde{Q}_n = \frac{1}{2\pi} \sqrt{\frac{\hbar}{2\varrho_n}} (\tilde{R}_n + \tilde{R}_n^*)$ und wegen $\tilde{P}_n \tilde{Q}_n - \tilde{Q}_n \tilde{P}_n = \frac{\hbar}{2\pi} i$

$$\tilde{R}_n \tilde{R}_n^* = \frac{1}{2\hbar\varrho_n} (\tilde{P}_n^2 + 4\pi^2 \varrho_n^2 \tilde{Q}_n^2) + \frac{1}{2} \cdot 1,$$

$$\tilde{R}_n^* \tilde{R}_n = \frac{1}{2\hbar\varrho_n} (\tilde{P}_n^2 + 4\pi^2 \varrho_n^2 \tilde{Q}_n^2) - \frac{1}{2} \cdot 1,$$

also insbesondere $R_n \tilde{R}_n^* - \tilde{R}_n^* R_n = 1$. Und die Energieformel lautet:

$$\begin{aligned} H = H_0 + \sum_1^N \hbar\varrho_n \cdot \tilde{R}_n^* R_n + \sum_1^N \sum_1^l \frac{e_\nu}{2\pi c m_\nu} \sqrt{\frac{\hbar}{2\varrho_n}} (\tilde{R}_n + \tilde{R}_n^*) \\ \cdot [P_\nu^x \bar{\mathfrak{A}}_{n,x}(Q_\nu^x, Q_\nu^y, Q_\nu^z) + P_\nu^y \bar{\mathfrak{A}}_{n,y}(Q_\nu^x, Q_\nu^y, Q_\nu^z) + P_\nu^z \bar{\mathfrak{A}}_{n,z}(Q_\nu^x, Q_\nu^y, Q_\nu^z)] + C, \end{aligned}$$

wobei $C = \text{Konstans} = \frac{1}{2} \sum_1^N \hbar\varrho_n$ ist. Da eine additive Konstante im Energieausdruck sinnlos ist, können wir C fortlassen, was um so mehr geboten ist, als C für $N \rightarrow +\infty$ unendlich wird, also das sinngemäße Abschließen der Theorie stört.

Der Hermitesche Operator $\tilde{R}_n^* \tilde{R}_n$ ist hypermaximal, und zwar hat er ein reines Punktspektrum, bestehend aus den Zahlen $0, 1, 2, \dots$, die entsprechenden Eigenfunktionen mögen $\psi_0^n(\tilde{q}_n), \psi_1^n(\tilde{q}_n), \psi_2^n(\tilde{q}_n), \dots$ heißen.

[Schreiben wir an Stelle der Variablen \tilde{q}_n lieber $\frac{1}{2\pi} \sqrt{\frac{\hbar}{\varrho_n}} q$, dann gehen $\frac{1}{\sqrt{2\hbar\varrho_n}} 2\pi\varrho_n \tilde{q}_n = 2\pi \sqrt{\frac{\varrho_n}{2\hbar}} \tilde{q}_n$ und $\frac{1}{\sqrt{2\hbar\varrho_n}} \frac{\hbar}{2\pi i} \frac{\partial}{\partial \tilde{q}_n} = \frac{1}{2\pi} \sqrt{\frac{\hbar}{2\varrho_n}} \frac{1}{i} \frac{\partial}{\partial q}$ bzw. in $\frac{1}{\sqrt{2}} q$ und $\frac{1}{\sqrt{2}} \frac{1}{i} \frac{\partial}{\partial q}$ über, so daß

$$\begin{aligned}\tilde{R}_n &= \frac{1}{\sqrt{2}} \left(q + \frac{\partial}{\partial q} \right), & \tilde{R}_n^* &= \frac{1}{\sqrt{2}} \left(q - \frac{\partial}{\partial q} \right), \\ \tilde{R}_n \tilde{R}_n^* &= -\frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial q^2} + \frac{1}{2} q^2 + \frac{1}{2}, \\ \tilde{R}_n^* \tilde{R}_n &= -\frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial q^2} + \frac{1}{2} q^2 - \frac{1}{2}\end{aligned}$$

wird. Die Eigenwerttheorie dieser Operatoren findet der Leser in vielen Darstellungen, z. B. COURANT-HILBERT: S. 261, Formeln (42), (43) und anschließend, sowie S. 76, Formeln (60), (61); oder WEYL: Gruppentheorie und Quantenmechanik S. 74 u. ff.]

Da die $\psi_1(\xi), \psi_2(\xi), \dots$ ein vollständiges Orthogonalsystem im ξ -Raume bilden, und die $\psi_0^n(\tilde{q}_n), \psi_1^n(\tilde{q}_n), \dots$ eines im \tilde{q}_n -Raume, bilden die $\Phi_{k M_1 \dots M_N}(\xi \tilde{q}_1 \dots \tilde{q}_N) = \psi_k(\xi) \cdot \psi_{M_1}^1(\tilde{q}_1) \dots \psi_{M_N}^N(\tilde{q}_N)$, $k = 1, 2, \dots, M_1, \dots, M_N = 0, 1, 2, \dots$, ein vollständiges Orthogonalsystem im $\xi, \tilde{q}_1, \dots, \tilde{q}_N$ -Raume — d. h. im Zustandsraume. Wir können als jede Wellenfunktionen $\Phi = \Phi(\xi, \tilde{q}_1, \dots, \tilde{q}_N)$ so entwickeln:

$$\begin{aligned}\varphi(\xi, \tilde{q}_1, \dots, \tilde{q}_N) &= \sum_1^{\infty} k \sum_0^{\infty} M_1 \dots \sum_0^{\infty} M_N a_{k M_1 \dots M_N} \Phi_{k M_1 \dots M_N}(\xi \tilde{q}_1 \dots \tilde{q}_N) \\ &= \sum_1^{\infty} k \sum_0^{\infty} M_1 \dots \sum_0^{\infty} M_N a_{k M_1 \dots M_N} \psi_k(\xi) \cdot \psi_{M_1}^1(\tilde{q}_1) \dots \psi_{M_N}^N(\tilde{q}_N).\end{aligned}$$

Daß wir das vollständige Orthogonalsystem und die Entwicklungskoeffizienten mit $N + 1$ Indices k, M_1, \dots, M_N statt mit einem numerieren, ist unwesentlich, auf Grund der Betrachtungen von II. 2. können wir feststellen: der Hilbertsche Raum der Wellenfunktionen Φ kann auch als einer der $(N + 1)$ -fachen Folgen $a_{k M_1 \dots M_N}$ (mit endlichem $\sum_1^{\infty} k \sum_0^{\infty} M_1 \dots \sum_0^{\infty} M_N |a_{k M_1 \dots M_N}|^2$) aufgefaßt werden. Welcher Operator ist nun H bei dieser Auffassung des Hilbertschen Raumes? Um dies zu ermitteln, wollen wir zunächst die $H \Phi_{k M_1 \dots M_N}$ berechnen. Da H_0 auf ξ allein operiert, und $\psi_k(\xi)$ Eigenfunktion von H_0 mit dem Eigenwert W_k ist, da ferner $\tilde{R}_n^* \tilde{R}_n$ auf \tilde{q}_n allein operiert, und $\psi_{M_n}^n(\tilde{q}_n)$

Eigenfunktion von $\tilde{R}_n^* \tilde{R}_n$ vom Eigenwert M_n ist, so wird:

$$\begin{aligned} \text{H } \Phi_{k M_1 \dots M_N} &= \left(W_k + \sum_1^N \hbar \varrho_n \cdot M_n \right) \Phi_{k M_1 \dots M_N} + \sum_1^N \sum_1^l \frac{e_\nu}{2 \pi c m_\nu} \sqrt{\frac{\hbar}{2 \varrho_n}} \\ &\times [P_\nu^x \bar{\mathfrak{U}}_{n,x}(Q_\nu^x, Q_\nu^y, Q_\nu^z) + P_\nu^y \bar{\mathfrak{U}}_{n,y}(Q_\nu^x, Q_\nu^y, Q_\nu^z) + P_\nu^z \bar{\mathfrak{U}}_{n,z}(Q_\nu^x, Q_\nu^y, Q_\nu^z)] \psi_k(\xi) \\ &\times \psi_{M_1}^1(\tilde{q}_1) \dots (\tilde{R}_n + \tilde{R}_n^*) \psi_{M_n}^n(\tilde{q}_n) \dots \psi_{M_N}^N(\tilde{q}_N). \end{aligned}$$

Für alle Operatoren A , die (wie der $[\dots]$ -Ausdruck) nur die Variable ξ beeinflussen, können wir die Entwicklung

$$A \psi_k(\xi) = \sum_1^\infty \tilde{A}^j (A \psi_k, \psi_j) \cdot \psi_j(\xi) = \sum^j (A)_{kj} \cdot \psi_j(\xi)$$

verwenden, wobei also $(A)_{kj} = (A \psi_k, \psi_j)$ definiert wird. Ferner ist, wie am w. o. genannten Orte gezeigt wird,

$$\tilde{R}_n \psi_M^n(\tilde{q}_n) = \sqrt{M} \psi_{M-1}^n(\tilde{q}_n), \quad \tilde{R}_n^* \psi_M^n(\tilde{q}_n) = \sqrt{M+1} \psi_{M+1}^n(\tilde{q}_n)$$

(für $M=0$ ist die rechte Seite der ersten Formel, ohne Rücksicht auf das darin auftretende sinnlose ψ_{-1}^n , gleich 0 zu setzen). Somit ist

$$\begin{aligned} \text{H } \Phi_{k M_1 \dots M_N} &= \left(W_k + \sum_1^N \hbar \varrho_n \cdot M_n \right) \Phi_{k M_1 \dots M_N} + \sum_1^\infty \sum_1^N \sqrt{\frac{\hbar}{2 \varrho_n}} \cdot \\ &\left(\sum_1^l \frac{e_\nu}{2 \pi c m_\nu} (P_\nu^x \bar{\mathfrak{U}}_{n,x}(Q_\nu^x, Q_\nu^y, Q_\nu^z) + \dots)_{kj} \right) \\ &\times (\sqrt{M_n+1} \Phi_{k M_1 \dots M_{n+1} \dots M_N} + \sqrt{M_n} \Phi_{k M_1 \dots M_{n-1} \dots M_N}). \end{aligned}$$

Nun können wir die Form von H als $a_{k M_1 \dots M_N}$ -Operation ermitteln: es ist

$$\text{H } \sum^k M_1 \dots M_N a_{k M_1 \dots M_N} \Phi_{k M_1 \dots M_N} = \sum^k M_1 \dots M_N a'_{k M_1 \dots M_N} \Phi_{k M_1 \dots M_N},$$

mit

$$\begin{aligned} \text{H } a_{k M_1 \dots M_N} &= a'_{k M_1 \dots M_N} = \left(W_k + \sum_1^N \hbar \varrho_n \cdot M_n \right) a_{k M_1 \dots M_N} \\ &+ \sum_1^\infty \sum_1^N \sqrt{\frac{\hbar}{2 \varrho_n}} \left(\sum_1^l \frac{e_\nu}{2 \pi c m_\nu} (P_\nu^x \bar{\mathfrak{U}}_{n,x}(Q_\nu^x, Q_\nu^y, Q_\nu^z) + \dots)_{kj} \right) \\ &\times (\sqrt{M_n} a_{j M_1 \dots M_{n-1} \dots M_N} + \sqrt{M_n+1} a_{j M_1 \dots M_{n+1} \dots M_N}). \end{aligned}$$

Jetzt ist die Diskussion von H so weit gediehen, daß es angebracht ist, den Grenzübergang $N \rightarrow \infty$ durchzuführen. Da sich dabei die Indizierung der $a_{k M_1 \dots M_N}$ ändert, entsteht dabei ein ganz neuer H -Operator. Wir müssen Komponenten $a_{k M_1 M_2 \dots}$ mit unendlich vielen Indices M_1, M_2, \dots einführen, aber schon um die Endlichkeit der in H auftretenden Summe $\sum_1^\infty \hbar \varrho_n \cdot M_n$ zu wahren, müssen wir uns auf solche

M_1, M_2, \dots -Folgen beschränken, in denen nur endlich viele von 0 verschiedene Zahlen stehen. Von nun an wird also der Hilbertsche Raum von allen Folgen $a_{k M_1 M_2 \dots}$ mit endlichem $\sum_1^{\infty} k \sum_0^{\infty} M_1 \sum_0^{\infty} M_2 \dots |a_{k M_1 M_2 \dots}|^2$ gebildet, wobei die Indices k, M_1, M_2, \dots über den folgenden Bereich laufen: $k = 1, 2, \dots, M_1, M_2, \dots = 0, 1, 2, \dots$, nur endlich (aber beliebig) viele $M_n \neq 0$ ¹⁴⁴. Und die endgültige Form von H ist:

$$H a_{k M_1 M_2 \dots} = a'_{k M_1 M_2 \dots} = (W_k + \sum_1^{\infty} \hbar \varrho_n \cdot M_n) \cdot a_{k M_1 M_2 \dots} \\ + \sum_1^{\infty} \sum_1^{\infty} w_{kj}^n \cdot (\sqrt{M_n + 1} a_{j M_1 M_2 \dots M_{n+1} \dots} + \sqrt{M_n} a_{j M_1 M_2 \dots M_{n-1} \dots}),$$

wobei w_{kj}^n durch

$$w_{kj}^n = \sqrt{\frac{\hbar}{2 \varrho_n}} \sum_1^i \frac{e_\nu}{2 \pi c m_\nu} (P_\nu^x \bar{M}_{n,x} (Q_\nu^x, Q_\nu^y, Q_\nu^z) + \dots)_{kj}$$

definiert ist.

Ehe wir aus diesem Resultat die uns interessierenden physikalischen Folgerungen ziehen, sei noch daran erinnert, daß es auf Grund der elektrodynamischen Theorie des Lichtes gewonnen wurde. Man wird zunächst feststellen wollen, ob die schablonenmäßige quantenmechanische Umformung, die wir vornahmen, genügt hat, um die Abweichungen des Lichtes vom Wellenmodell wiederzugeben — insbesondere seine in Wahrheit diskret-korpuskulare Natur. (Es wäre ja denkbar, daß man, um diese zu erfassen, direkt von einem korpuskularen Modell fürs Licht ausgehen müßte, anstatt, wie wir es hier taten, das elektromagnetische Feld zu „quanteln“.)

Unserem Ausdruck für H sieht man sofort an, daß so etwas wie Lichtkorpuskel durch ihn erfaßt wird. Denn wenn wir seinen zweiten Addenden fortlassen, der eine Art Störung darstellt, und wie wir bald sehen werden, die Quantensprünge des Systems S aus einem „stationären“ Zustand in den anderen veranlaßt (d. i. das uns eigentlich interessierende Phänomen, das aber immerhin bedeutend schwächer ist, als das materielle System S und die bereits vorhandene Strahlung, die, wie wir sehen werden, im ersten Addenden von H verkörpert sind), so bleibt

$$H_1 a_{k M_1 M_2 \dots} = (W_k + \sum_1^{\infty} \hbar \varrho_n \cdot M_n) \cdot a_{k M_1 M_2 \dots}$$

übrig. Dieser Energieausdruck kann aber so gedeutet werden: die Energie W_k des Systems S, vermehrt um die Energien $\hbar \varrho_n \cdot M_n$ ($n = 1, 2, \dots$), wobei es nahe liegt, die Zahlen $M_n = 0, 1, 2, \dots$ als Anzahlen von Teilchen mit den bzw. Energien $\hbar \varrho_n$ aufzufassen — aber $\hbar \varrho_n$ ist gerade diejenige Energie, die nach EINSTEIN einem Lichtquant von der Frequenz ϱ_n zuzuschreiben ist (vgl. Anm. ¹³⁴). Somit legt der Bau von H_1 die Vermutung nahe, daß das in **H** bestehende elektro-

magnetische Feld (abzüglich des elektrostatischen Teiles), also \mathbf{L} , eigentlich aus Lichtquanten mit den Frequenzen $\varrho_1, \varrho_2, \dots$ und den Energien $\hbar \varrho_1, \hbar \varrho_2, \dots$ besteht, deren bzw. Anzahlen die Indices $M_1, M_2, \dots (= 0, 1, 2, \dots)$ sind. Daß keine anderen Frequenzen als gerade $\varrho_1, \varrho_2, \dots$ Berücksichtigung finden, kann dadurch plausibel gemacht werden, daß dies die Eigenfrequenzen von \mathbf{H} sind: stellen doch die Vektorpotentiale $\overline{\mathfrak{A}}_n(xyz) \cdot \gamma \cos 2\pi \varrho_n(t - \tau)$ die einzigen in \mathbf{H} möglichen stationären elektromagnetischen Schwingungen dar.

Indessen sind diese Spekulationen und Interpretationen nur von heuristischem Wert, eine befriedigende und endgültige Antwort auf unsere Frage haben wir nur, wenn es uns gelingt, vom Lichtquantenmodell für die Strahlung \mathbf{L} ausgehend zum Energieausdruck H zu gelangen. Daß wir die klassische Betrachtung zuerst ausführten, ist dadurch begründet, daß kein Ansatz für die Wechselwirkungsenergie eines Lichtquants mit der Materie vorliegt (an diesem Punkte war die Umdeutung der klassischen Elektrodynamik nicht durchführbar) — jetzt werden wir sie aber, wenn unser mit allgemeiner Wechselwirkungsenergie herzuleitendes Resultat der Form nach mit H übereinstimmt, dieselbe durch Koeffizientenvergleich bestimmen können.

Was ist der Zustandsraum von \mathbf{L} (Frage 1.) auf Grund der Lichtquantenhypothese? Ein einzelnes Lichtquant (im Hohlraum \mathbf{H}) möge durch gewisse Koordinaten gekennzeichnet sein, deren Gesamtheit wir durch das Symbol u ersetzen wollen¹⁴⁵. Seine stationären Zustände (in \mathbf{H}) mögen die Wellenfunktion $\psi_1(u), \psi_2(u), \dots$ (die ein normiertes vollständiges Orthogonalsystem bilden) und die Energien E_1, E_2, \dots haben — diese entsprechen den elektromagnetischen Eigenschwingungen $\overline{\mathfrak{A}}_1, \overline{\mathfrak{A}}_2, \dots$ mit den Frequenzen $\varrho_1, \varrho_2, \dots$ (Im Sinne der Einsteinschen Auffassung muß $E_n = \hbar \varrho_n$ sein, was wir auch beweisen werden.) Hierbei ist noch folgendes zu beachten: Schon in der elektromagnetischen Überlegung hatten wir die Energie des Lichtes so normiert, daß ihr Minimalwert 0 war, er entsprach den Indices $M_1 = M_2 = \dots = 0$; damit haben wir auch das Nichtvorhandensein als einen möglichen Zustand des Lichtes anerkannt, was auch sachlich gerechtfertigt ist. Tatsächlich können ja Lichtquanten emittiert und absorbiert werden, d. h. erzeugt und vernichtet. Indessen ist der Quantenmechanik eine solche Auffassung völlig fremd: jedes Teilchen trägt seine Koordinaten zum Zustandsraume des Systems bei, geht also so innig in die formale Beschreibung des Gesamtsystems ein, daß es absolut unvernichtbar ist — man muß ihm auch nach der Vernichtung eine Art latente Existenz zuschreiben, indem seine Koordinaten auch dann zum Zustandsraum gehören. Somit muß einer der Zustände $\psi_n(u)$ mit einer Energie $E_n = 0$ dem Nichtvorhandensein des Lichtquants entsprechen — wir ziehen es vor, denselben mit $\psi_0(u)$ zu bezeichnen ($E_0 = 0$), so daß $\psi_1(u), \psi_2(u), \dots$

dem existierenden Lichtquant entsprechen, aber erst $\psi_0(u), \psi_1(u), \psi_2(u), \dots$ ein vollständiges Orthogonalsystem bilden.

Nummehr gehen wir zu \mathbf{L} , dem System aller Lichtquanten über. Da wir auch nichtvorhandene Lichtquanten mitzählen, besteht \mathbf{L} aus soviel Lichtquanten, daß niemals mehr als diese Anzahl entstehen können: d. h. aus unendlich vielen. Da es aber unzweckmäßig ist, von vornherein mit unendlich vielen Bestandteilen in \mathbf{L} zu operieren, tun wir zuerst so, als ob bloß S Lichtquanten existierten ($S = 1, 2, \dots$), und nehmen erst am Ende den Grenzübergang $S \rightarrow +\infty$ vor¹⁴⁶. Diese S Lichtquanten versehen wir mit Nummern $1, \dots, S$, ihre Koordinaten mögen u_1, \dots, u_S heißen. Der Zustandsraum von \mathbf{L} wird also durch u_1, \dots, u_S beschrieben, und derjenige von $\mathbf{S} + \mathbf{L}$ durch ξ, u_1, \dots, u_S . Die allgemeinste Wellenfunktion für $\mathbf{S} + \mathbf{L}$ ist also $f(\xi, u_1, \dots, u_S)$, die $\varphi_k(\xi) \cdot \psi_{n_1}(u_1) \cdots \psi_{n_S}(u_S)$, $k = 1, 2, \dots, u_1, \dots, u_S = 0, 1, 2, \dots$, bilden ein vollständiges Orthogonalsystem.

Die Lichtquanten haben nun die fundamentale Eigenschaft, einander vollkommen gleich zu sein, d. h. es gibt kein Mittel auf der Welt, zwei Lichtquanten mit übereinstimmender Koordinate u voneinander zu unterscheiden. Oder auch: ein Zustand, in dem die Lichtquanten Nr. m bzw. n die u -Werte $u_m = u', u_n = u''$ haben, unterscheidet sich nicht vom Zustande, in dem $u_m = u'', u_n = u'$ ist (dies ist die klassische, nicht die quantenmechanische Beschreibungsweise, denn wir gaben den Wert von u , und nicht die Wellenfunktion $\varphi(u)$ an!). Quantenmechanisch besagt dies: die zu den Wellenfunktionen $f(\xi, u_1, \dots, u_m, \dots, u_n, \dots, u_S)$ und $f(\xi, u_1, \dots, u_n, \dots, u_m, \dots, u_S)$ gehörigen Zustände sind ununterscheidbar. D. h.: jede physikalische Größe \mathfrak{H} hat in ihnen denselben Erwartungswert (also, da dies auch für die $F(\mathfrak{H})$ gilt, auch dieselbe Statistik — vgl. die in III. 1. durchgeführte Diskussion von \mathbf{E}_1 und \mathbf{E}_2). Bezeichnen wir die Funktionaloperation, die u_m, u_n vertauscht, mit O_{mn} (O_{mn} ist, wie man sofort erkennt, gleichzeitig Hermitesch und unitär, $O_{mn}^2 = 1$), so besagt dies: \mathfrak{H} hat für f denselben Erwartungswert wie für $O_{mn}f$, d. h.

$$(Rf, f) = (RO_{mn}f, O_{mn}f) = (O_{mn}RO_{mn}f, f),$$

also

$$R = O_{mn}RO_{mn}, \quad \text{oder auch} \quad O_{mn}R = RO_{mn}.$$

Dies bedeutet, daß im vorliegenden Falle nur solche Operatoren R zulässig sind, die mit allen O_{mn} ($m, n = 1, \dots, S, m \neq n$) vertauschbar sind, d. h. (mit Rücksicht auf die Definition der O_{mn}) in die alle Koordinaten u_1, \dots, u_S symmetrisch eingehen.

Eine Wellenfunktion f , die in allen Variablen u_1, \dots, u_S symmetrisch ist, d. h. für die $O_{m,n}f = f$ gilt ($m, n = 1, \dots, S, m \neq n$), wird durch einen solchen Operator R in eine ebensolche übergeführt: $O_{mn}Rf = RO_{mn}f = Rf$. Diese f bilden eine abgeschlossene Linear-mannigfaltigkeit; also einen Hilbertschen Teilraum $\mathfrak{H}_\infty^{(S)}$ im Hilbertschen

Räume $\mathfrak{R}_\infty^{(S)}$ aller f — und die R bilden Elemente von $\overline{\mathfrak{R}_\infty^{(S)}}$ auf eben-solche ab, d. h. sie können als Operatoren im Hilbertschen Räume $\overline{\mathfrak{R}_\infty^{(S)}}$ angesehen werden. Infolgedessen ist $\overline{\mathfrak{R}_\infty^{(S)}}$ für die Zwecke der Quanten-mechanik ebenso verwendbar wie das ursprünglich in Aussicht ge-nommene $\mathfrak{R}_\infty^{(S)}$, und es entsteht die Frage, ob man, im Hinblick auf die Symmetrie von L in bezug auf die Vertauschungen der Licht-quanten, sich nicht auf symmetrische Wellenfunktionen beschränken, d. h. $\mathfrak{R}_\infty^{(S)}$ durch $\overline{\mathfrak{R}_\infty^{(S)}}$ ersetzen soll. Dies wollen wir tun, und der Erfolg, d. h. der zu erzielende vollkommene Anschluß an den elektromagnetisch hergeleiteten H-Ausdruck, wird uns nachträglich rechtfertigen¹⁴⁷.

Die $\varphi_k(\xi) \cdot \psi_{n_1}(u_1) \cdots \psi_{n_S}(u_S)$ bildeten ein vollständiges normiertes Orthogonalsystem in $\mathfrak{R}_\infty^{(S)}$, wir wollen nun mit seiner Hilfe eines in $\overline{\mathfrak{R}_\infty^{(S)}}$ angeben. Seien M_0, M_1, \dots irgendwelche Zahlen $= 0, 1, 2, \dots$ mit $M_0 + M_1 + \dots = S$ (also nur endlich viele $\neq 0$!), bezeichnen wir mit $[M_1, M_2, \dots]$ die Gesamtheit aller Indexsysteme u_1, \dots, u_S , in denen M_0 -mal die 0, M_1 -mal die 1, \dots vorkommt — es sind genau $M_0! \cdot M_1! \cdots$ verschiedene. Wir setzen:

$$\Phi_{M_0 M_1 \dots}(u_1 \cdots u_S) = \sum_{n_1 \cdots n_S \text{ in } [M_0, M_1, \dots]} \psi_{n_1}^{S_1}(u_1) \cdots \psi_{n_S}(u_S).$$

Da $\Phi_{M_0 M_1 \dots}^2$ Summe von $M_0! \cdot M_1! \cdots$ paarweise orthogonalen Addenden vom Betrage 1 ist, ist sein Betragsquadrat die Summe von $M_0! \cdot M_1! \cdots$ 1-en, also sein Betrag $\sqrt{M_0! \cdot M_1! \cdots}$. Zwei verschiedene $\Phi_{M_0 M_1 \dots}$ haben paarweise orthogonale Addenden, sind also ortho-gonal. Die

$$\psi_{M_0 M_1 \dots}(u_1 \cdots u_S) = \frac{1}{\sqrt{M_0! M_1! \cdots}} \Phi_{M_0 M_1 \dots}(u_1 \cdots u_S)$$

bilden also ein normiertes Orthogonalsystem. Ein in den u_1, \dots, u_S symmetrisches $f(\xi, u_1, \dots, u_S)$ hat mit allen Addenden von $\varphi_k(\xi) \Phi_{M_0 M_1 \dots}(u_1 \cdots u_S)$ dasselbe innere Produkt, ist also zu jedem von ihnen orthogonal, wenn es zu $\varphi_k(\xi) \Phi_{M_0 M_1 \dots}(u_1 \cdots u_S)$ — d. h. zu $\varphi_k(\xi) \psi_{M_0 M_1 \dots}(u_1 \cdots u_S)$ — orthogonal ist. D. h.: wenn es zu allen $\varphi_k(\xi) \psi_{M_0 M_1 \dots}(u_1 \cdots u_S)$ orthogonal ist, ist es auch zu allen $\varphi_k(\xi) \psi_{n_1}(u_1) \cdots \psi_{n_S}(u_S)$ orthogonal — also $\equiv 0$. Somit bilden die $\varphi_k(\xi) \psi_{M_0 M_1 \dots}(u_1 \cdots u_S)$ (die ja selbst zu $\overline{\mathfrak{R}_\infty^{(S)}}$ gehören) ein in $\overline{\mathfrak{R}_\infty^{(S)}}$ vollständiges normiertes Orthogonalsystem.

Betrachten wir jetzt System die im $S + L$ auftretenden Energien. Erstens ist [2 a)] die Energie von S da, deren Operator für S durch $H_0 \varphi_k(\xi) = W_k \varphi_k(\xi)$ definiert ist, für $S + L$ also durch

$$H_0 \varphi_k(\xi) \psi_{M_0 M_1 \dots}(u_1 \cdots u_S) = W_k \varphi_k(\xi) \psi_{M_0 M_1 \dots}(u_1 \cdots u_S).$$

Zweitens hat [2 b)] jedes Lichtquant l die Energie H_l , $\psi_n(u) = E_n \psi_n(u)$,

also das m -te in $\mathbf{S} + \mathbf{L}$ ($m = 1, \dots, S$)

$$\begin{aligned} H_{l_m} \varphi_k(\xi) \cdot \psi_{n_1}(u_1) \cdots \psi_{n_m}(u_m) \cdots \psi_{n_S}(u_S) \\ = E_{n_m} \varphi_k(\xi) \cdot \psi_{n_1}(u_1) \cdots \psi_{n_m}(u_m) \cdots \psi_{n_S}(u_S), \end{aligned}$$

und es ist $H_l = H_{l_1} + \cdots + H_{l_S}$ zu bilden. Schließlich sei [2 c)] die Wechselwirkungsenergie eines Lichtquants l' mit \mathbf{S} durch einen, vorläufig nicht näher bekannten, Operator V beschrieben, den wir durch seine Matrix kennzeichnen:

$$V_{l'} \varphi_k(\xi) \psi_n(u) = \sum_1^{\infty} \sum_0^{\infty} V_{kn/jp} \varphi_j(\xi) \psi_p(u).$$

In $\mathbf{S} + \mathbf{L}$ ist dies für das m -te Lichtquant:

$$\begin{aligned} V_{l_m} \varphi_k(\xi) \cdot \psi_{n_1}(u_1) \cdots \psi_{n_m}(u_m) \cdots \psi_{n_S}(u_S) \\ = \sum_1^{\infty} \sum_0^{\infty} V_{knm/jp} \varphi_j(\xi) \cdot \psi_{n_1}(u_1) \cdots \psi_p(u_m) \cdots \psi_{n_S}(u_S) \\ = \sum_1^{\infty} \sum_0^{\infty} p_1 \cdots p_m \cdots p_S \delta(n_1 - p_1) \cdots V_{knm/jp_m} \cdots \delta(n_S - p_S) \\ \times \varphi_j(\xi) \cdot \psi_{p_1}(u_1) \cdots \psi_{p_m}(u_m) \cdots \psi_{p_S}(u_S) \end{aligned}$$

($\delta(n)$ ist 1 für $n = 0$, 0 für $n \neq 0$), und es ist $H_w = V_{l_1} + \cdots + V_{l_S}$ zu bilden.

Zusammen wird also:

$$\begin{aligned} H \varphi_k(\xi) \cdot \psi_{n_1}(u_1) \cdots \psi_{n_S}(u_S) \\ = (W_k + E_{n_1} + \cdots + E_{n_S}) \varphi_k(\xi) \cdot \psi_{n_1}(u_1) \cdots \psi_{n_S}(u_S) \\ + \sum_1^{\infty} \sum_0^{\infty} p_1 \cdots p_S \sum_1^S \delta(n_1 - p_1) \cdots V_{knm/jp_m} \cdots \delta(n_S - p_S) \\ \times \varphi_j(\xi) \cdot \psi_{p_1}(u_1) \cdots \psi_{p_S}(u_S). \end{aligned}$$

Durch eine leichte Umrechnung folgt hieraus:

$$\begin{aligned} H \varphi_k(\xi) \Phi_{M_0 M_1 \dots}(u_1 \cdots u_S) = (W_k + \sum_0^{\infty} M_n E_n) \varphi_k(\xi) \Phi_{M_0 M_1 \dots}(u_1 \cdots u_S) \\ + \sum_1^{\infty} \sum_0^{\infty} n, p M_n V_{kn/jp} \varphi_j(\xi) \Phi_{M_0 M_1 \dots M_n - 1 \dots M_p + 1 \dots}(u_1 \cdots u_S) \end{aligned}$$

(für $n = p$ ist $\cdots M_n - 1 \cdots M_p + 1 \cdots$ durch $\cdots M_n \cdots$ zu ersetzen), also für die normierten Orthogonalfunktionen:

$$\begin{aligned} H \varphi_k(\xi) \psi_{M_0 M_1 \dots}(u_1 \cdots u_S) = (W_k + \sum_0^{\infty} M_n E_n) \varphi_k \psi_{M_0 M_1 \dots}(u_1 \cdots u_S) \\ + \sum_1^{\infty} \sum_0^{\infty} n, p \sqrt{M_n(M_p + 1 - \delta(n-p))} V_{kn/jp} \varphi_j(\xi) \psi_{M_0 M_1 \dots M_n - 1 \dots M_p + 1 \dots}(u_1 \cdots u_S). \end{aligned}$$

Das allgemeine $f(\xi, u_1 \cdots u_S)$ von $\mathfrak{R}_{\infty}^{(S)}$ können wir nach diesen Ortho-

gonalfunktionen entwickeln:

$$f(\xi u_1 \cdots u_S) = \sum_1^{\infty k} \sum_{(M_0+M_1+\cdots=S)}^{\infty} a_{k M_0 M_1 \cdots} \varphi_k(\xi) \Psi_{M_0 M_1 \cdots}(u_1 \cdots u_S),$$

daher ist $\mathfrak{R}_{\infty}^{(S)}$ auch als der Hilbertsche Raum der Folgen $a_{k M_0 M_1 \cdots}$, $k = 1, 2, \dots$, $M_0 M_1, \dots = 0, 1, 2, \dots$, $M_0 + M_1 + \dots = S$ mit endlichen $\sum_k a_{k M_0 M_1 \cdots} |a_{k M_0 M_1 \cdots}|^2$ aufzufassen. Dabei ist

$$H a_{k M_0 M_1 \cdots} = a'_{k M_0 M_1 \cdots}$$

durch

$$\begin{aligned} H \sum_1^{\infty k} \sum_{(M_0+M_1+\cdots=S)}^{\infty} a_{k M_0 M_1 \cdots} \varphi_k(\xi) \Psi_{M_0 M_1 \cdots}(u_1 \cdots u_S) \\ = \sum_1^{\infty k} \sum_{(M_1+M_2+\cdots=S)}^{\infty} a'_{k M_0 M_1 \cdots} \varphi_k(\xi) \Psi_{M_0 M_1 \cdots}(u_1 \cdots u_S) \end{aligned}$$

definiert, also

$$H a_{k M_0 M_1 \cdots} = a'_{k M_0 M_1 \cdots} = (W_k + \sum_0^{\infty n} M_n E_n) a_{k M_0 M_1 \cdots}$$

$$+ \sum_1^{\infty j} \sum_0^{\infty m, p} \sqrt{M_n(M_p + 1 - \delta(n-p))} \overline{V_{kn/jp}} a_{j M_0 M_1 \cdots M_{n-1} \cdots M_{p+1} \cdots}$$

(k, j und n, p haben, gegenüber der $\varphi_k(\xi) \psi_{M_0 M_1 \cdots}(u_1 \cdots u_S)$ -Formel, ihre Rollen vertauscht; an Stelle von $V_{j/p/kn}$ haben wir, im Hinblick auf den Hermiteschen Charakter von V , $\overline{V_{kn/jp}}$ geschrieben.)

Jetzt gilt es, die Vorbereitungen zum Grenzübergange $S \rightarrow +\infty$ zu treffen. Da M_0 durch M_1, M_2, \dots mitbestimmt ist, $M_0 = S - M_1 - M_2 - \dots$, können wir an Stelle von $a_{k M_0 M_1 \cdots}$ $a_{k M_1 M_2 \cdots}$ schreiben, dabei sind die Indices durch die Bedingungen $k = 1, 2, \dots, M_1, M_2, \dots = 0, 1, 2, \dots, M_1 + M_2 + \dots \leq S$ eingeschränkt. Wenn wir $E_0 = 0$ beachten, und die Bezeichnungen $S V_{k_0/j_0} = V_{k/j}$, $\sqrt{S} V_{k_0/j_n} = V_{k/jn}$, $\sqrt{S} V_{kn/j_0} = \overline{V_{j/kn}}$ ($V_{kn/jp}$ ist Hermitesch!) einführen, so wird:

$$\begin{aligned} H a_{k M_1 M_2 \cdots} &= a'_{k M_1 M_2 \cdots} = (W_k + \sum_1^{\infty n} M_n E_n) a_{k M_1 M_2 \cdots} \\ &+ \sum_1^{\infty j} V_{k/j} a_{j M_1 M_2 \cdots} \\ &+ \sum_1^{\infty j} \sum_1^{\infty n} \sqrt{M_n} \sqrt{\frac{S - M_1 - M_2 - \dots + 1}{S}} V_{j/kn} a_{j M_1 M_2 \cdots M_{n-1} \cdots} \\ &+ \sum_1^{\infty j} \sum_1^{\infty n} \sqrt{M_n + 1} \sqrt{\frac{S - M_1 - M_2 - \dots}{S}} \overline{V_{k/jn}} a_{j M_1 M_2 \cdots M_{n+1} \cdots} \\ &+ \sum_1^{\infty j} \sum_1^{\infty m, p} \sqrt{M_n(M_p + 1)} \overline{V_{kn/jp}} a_{j M_1 M_2 \cdots M_{n-1} \cdots M_{p+1} \cdots} \end{aligned}$$

Nun ist $S \rightarrow +\infty$ durchführbar: die $a_{k M_1 M_2 \cdots}$ sind dann wieder über alle Folgen $k M_1 M_2 \cdots$ mit $k = 1, 2, \dots, M_1, M_2, \dots = 0, 1, 2, \dots$,

nur endlich (aber beliebig) viele $M_n \neq 0$, definiert (vgl. Anm. ¹⁴⁴), und aus H wird:

$$\begin{aligned} \text{H } a_{k M_1 M_2 \dots} &= a'_{k M_1 M_2 \dots} = (W_k + \sum_1^{\infty} M_n E_n) a_{k M_1 M_2 \dots} \\ &+ \sum_1^{\infty} V_{k/j} a_{j M_1 M_2 \dots} \\ &+ \sum_1^{\infty} \sum_1^{\infty} (V_{j/kn} \sqrt{M_n + 1} a_{j M_1 M_2 \dots M_{n+1} \dots} + \overline{V}_{k/jn} \sqrt{M_n} a_{j M_1 M_2 \dots M_{n-1} \dots}) \\ &+ \sum_1^{\infty} \sum_1^{\infty} \overline{V}_{kn/jp} \sqrt{M_n (M_p + 1)} a_{j M_1 M_2 \dots M_{n-1} \dots M_{p+1} \dots} \end{aligned}$$

Die Analogie mit der aus der elektromagnetischen Lichttheorie hergeleiteten Gleichung springt in die Augen: um eine völlige Übereinstimmung zu erzielen, brauchen wir nur

$$E_n = h \varrho_n, \quad V_{k/j} = 0, \quad V_{k/jn} = w_{jk}^n = \overline{w}_{kj}^n, \quad V_{kn/jp} = 0$$

zu setzen. Man sieht: die Lichtquanten-Auffassung erweist sich als mit der klassisch-elektromagnetischen identisch, wenn

1. die letztere dem allgemeinen quantenmechanischen Schema gemäß umgeschrieben wird;

2. die Energie der Lichtquanten der Einsteinschen Regel entsprechend ihrer h -fachen Frequenz gleichgesetzt wird;

3. die Wechselwirkungsenergie der Lichtquanten mit der Materie richtig angesetzt wird (vgl. die obigen Ausdrücke für V).

Damit ist eine der schwersten Paradoxien der früheren Formen der Quantentheorie, die Doppelnatur des Lichtes (elektromagnetische Wellen bzw. diskrete Korpuskel, Lichtquanten), glänzend aufgelöst¹⁴⁸. Allerdings ist es schwer, eine direkte, anschauliche Deutung für die soeben berechnete Wechselwirkungsenergie V zwischen Licht und Materie zu finden, um so mehr, als ihre einzigen von Null verschiedenen Matrizen-elemente $V_{kn/jp}$ (diejenigen mit $n = 0, p \neq 0$ oder $n \neq 0, p = 0$) von der Anzahl aller möglichen Lichtquanten, S , abhängen (sie sind $\frac{1}{\sqrt{S}}$ proportional) — obwohl zum Schluß $S \rightarrow +\infty$ vorgenommen werden muß. Immerhin kann man dies, mit Rücksicht darauf, daß jede modellmäßige Beschreibung nur eine Näherung ist, während der exakte Inhalt der Theorie eben durch den Ausdruck für den H-Operator vermittelt wird, hinnehmen.

Kehren wir nunmehr zu unserer eigentlichen Aufgabe, der Bestimmung der Übergangswahrscheinlichkeiten, zurück. Im Sinne der zeitabhängigen Schrödingerschen Differentialgleichung sind die Änderungen der $a_{k M_1 M_2 \dots} = a_{k M_1 M_2 \dots}(t)$ durch

$$\begin{aligned} \frac{\hbar}{2\pi i} \frac{\partial}{\partial t} a_{k M_1 M_2 \dots} &= -\text{H } a_{k M_1 M_2 \dots} = -(W_k + \sum_1^{\infty} \hbar \varrho_n \cdot M_n) a_{k M_1 M_2 \dots} \\ &- \sum_1^{\infty} \sum_1^{\infty} w_{kj}^n \cdot (\sqrt{M_n + 1} a_{j M_1 M_2 \dots M_{n+1} \dots} + \sqrt{M_n} a_{j M_1 M_2 \dots M_{n-1} \dots}) \end{aligned}$$

bestimmt. Da die Hauptänderung der $a_{kM_1M_2\dots}$ durch den ersten Addenden dieses Ausdruckes veranlaßt wird, ist es zweckmäßig, dieselbe durch den Ansatz

$$a_{kM_1M_2\dots}(t) = e^{-\frac{2\pi i}{h}(W_k + \sum_1^{\infty} h \epsilon_n \cdot M_n)t} \cdot b_{kM_1M_2\dots}(t)$$

abzuspalten; dann wird:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} b_{kM_1M_2\dots} \\ = -\frac{2\pi i}{h} \sum_1^{\infty} \sum_1^{\infty} w_{kj}^n \cdot \left(e^{-\frac{2\pi i}{h}(W_j - W_k + h \epsilon_n)t} \sqrt{M_n + 1} b_{jM_1M_2\dots M_n+1\dots} \right. \\ \left. - e^{-\frac{2\pi i}{h}(W_j - W_k - h \epsilon_n)t} \sqrt{M_n} b_{jM_1M_2\dots M_n-1\dots} \right). \end{aligned}$$

Die physikalische Bedeutung der $a_{kM_1M_2\dots}$ und der $b_{kM_1M_2\dots}$ ist durch ihre Entstehung festgelegt: bei endlichem $\bar{M}_0 + \bar{M}_1 + \bar{M}_2 + \dots = S$ war $\varphi_{\bar{k}}(\xi) \Psi_{\bar{M}_0 \bar{M}_1 \dots}(u_1 \dots u_S)$ derjenige Zustand, in dem S in der k -ten Quantenbahn ist, und bzw. $\bar{M}_0, \bar{M}_1, \bar{M}_2, \dots$ Lichtquanten der bzw. Zustände $\psi_0, \psi_1, \psi_2, \dots$ da sind — d. h. \bar{M}_0 im Zustande des „Nichtvorhanden-Seins“, und $\bar{M}_1, \bar{M}_2, \dots$ in den zu den bzw. Eigenschwingungen $\mathfrak{Q}_1, \mathfrak{Q}_2, \dots$ gehörigen Zuständen. Die zu dieser Wellenfunktion gehörigen $a_{kM_1M_2\dots}$ sind also:

$$a_{kM_1M_2\dots} = \delta(k - \bar{k}) \cdot \delta(M_0 - \bar{M}_1) \cdot \delta(M_2 - \bar{M}_2) \cdot \dots$$

(Nur endlich viele Faktoren sind $\neq 1$, da immer, mit endlich vielen Ausnahmen, $M_n = \bar{M}_n = 0$ ist.) Hieran ist natürlich auch nach $S \rightarrow \infty$ festzuhalten. Für einen beliebigen Zustand $a_{kM_1M_2\dots}$ von $S + L$ hat also die genannte Konfiguration (falls dies gemessen wird, vgl. das in III. 3. über das einfache reine Punktspektrum Gesagte) die Wahrscheinlichkeit

$$\begin{aligned} \left| \sum_{kM_1M_2\dots} a_{kM_1M_2\dots} \delta(k - \bar{k}) \delta(M_1 - \bar{M}_1) \delta(M_2 - \bar{M}_2) \dots \right|^2 \\ = |a_{\bar{k} \bar{M}_1 \bar{M}_2 \dots}|^2 = |b_{\bar{k} \bar{M}_1 \bar{M}_2 \dots}|^2. \end{aligned}$$

Insbesondere ist die Gesamtwahrscheinlichkeit dafür, daß sich S in der \bar{k} -ten Quantenbahn befindet, $\theta_{\bar{k}} = \sum_{\bar{M}_1 \bar{M}_2 \dots} |b_{\bar{k} \bar{M}_1 \bar{M}_2 \dots}|^2$.

Sei im ersten Augenblick ($t = 0$) das Atom im \bar{k} -ten Zustande, und bzw. $\bar{M}_1, \bar{M}_2, \dots$ Lichtquanten der Zustände $\mathfrak{Q}_1, \mathfrak{Q}_2, \dots$ vorhanden — d. h.

$$b_{kM_1M_2\dots} = a_{kM_1M_2\dots} = \delta(k - \bar{k}) \cdot \delta(M_1 - \bar{M}_1) \cdot \delta(M_2 - \bar{M}_2) \cdot \dots$$

Im Sinne der obigen Differentialgleichung werden dann in erster Näherung (d. h. für so kurze Zeiten t , daß die rechten Seiten noch als Kon-

stanten behandelt werden können) überhaupt nur diejenigen $\frac{\partial}{\partial t} b_{k M_1 M_2 \dots} \neq 0$ sein, für die ein $M_1, M_2, \dots, M_n + 1, \dots$ oder ein $M_1, M_2, \dots, M_n - 1, \dots$ mit $\bar{M}_1, \bar{M}_2, \dots$ zusammenfällt: d. h. alle $k, \bar{M}_1, \bar{M}_2, \dots, \bar{M}_n \pm 1, \dots$. Für diese integriert man:

$$b_{k \bar{M}_1 \bar{M}_2 \dots \bar{M}_{n+1} \dots} = w_{k \bar{k}}^n \frac{1 - e^{-\frac{2\pi i}{h} (W_{\bar{k}} - W_k - h \varrho_n) t}}{W_{\bar{k}} - W_k - h \varrho_n} \sqrt{\bar{M}_n + 1},$$

$$b_{k \bar{M}_1 \bar{M}_2 \dots \bar{M}_{n-1} \dots} = w_{k \bar{k}}^n \frac{1 - e^{-\frac{2\pi i}{h} (W_{\bar{k}} - W_k + h \varrho_n) t}}{W_{\bar{k}} - W_k - h \varrho_n} \sqrt{\bar{M}_n}.$$

Alle anderen $b_{k M_1 M_2 \dots}$ sind in dieser Näherung $= 0$. (Ausgenommen $b_{k \bar{M}_1 \bar{M}_2 \dots}$, dieses sollte in dieser Näherung, d. h. bis auf t^2 -Glieder, seinem Anfangswerte 1 gleich sein. Indessen wird der Schluß $\frac{\partial}{\partial t} b_{k \bar{M}_1 \bar{M}_2 \dots} = 0$ dadurch bedenklich, daß die rechte Seite unserer Differentialgleichung in diesem Falle unendlich viele, in unserer Näherung nicht verschwindende $b_{k \bar{M}_1 \bar{M}_2 \dots \bar{M}_{n \pm 1} \dots}$ enthält, so daß man aus der Kleinheit eines jeden dieser Addenden — für kleine t — noch nicht auf die Kleinheit ihrer Summe schließen darf. Tatsächlich würde die Berechnung der nächsten Näherung zeigen, daß $b_{k \bar{M}_1 \bar{M}_2 \dots}$ von 1 nicht um t^2 , sondern um t -Glieder abweicht¹⁴⁹. Indessen ist wegen

$$\sum_{k M_1 M_2 \dots} |b_{k M_1 M_2 \dots}|^2 = \sum_{k M_1 M_2 \dots} |a_{k M_1 M_2 \dots}|^2 = 1,$$

also

$$|b_{k \bar{M}_1 \bar{M}_2 \dots}|^2 = 1 - \sum_{k M_1 M_2 \dots \neq k \bar{M}_1 \bar{M}_2 \dots} |b_{k M_1 M_2 \dots}|^2,$$

die direkte Bestimmung dieses $b_{k \bar{M}_1 \bar{M}_2 \dots}$ gar nicht nötig.)

Die qualitative Natur des Prozesses ist hier klar erkennbar: ein $b_{k \bar{M}_1 \bar{M}_2 \dots \bar{M}_{n+1} \dots}$, das der Emission eines $\bar{\mathfrak{U}}_n$ -Lichtquants (von der Frequenz ϱ_n) entspricht, reichert sich um so mehr an, d. h. je kleiner der Nenner $W_{\bar{k}} - W_k - h \varrho_n$ ist, d. h. je näher zur „Bohrschen Frequenz“ $\frac{W_{\bar{k}} - W_k}{h}$ ¹⁵⁰ die Lichteigenfrequenz ϱ_n liegt; ebenso reichert sich das, der Absorption entsprechende, $b_{k \bar{M}_1 \bar{M}_2 \dots \bar{M}_{n-1} \dots}$ um so mehr an, je näher zu $\frac{W_k - W_{\bar{k}}}{h}$ das ϱ_n liegt. Man sieht: die Bohrsche Frequenzrelation gilt nicht exakt (in den ϱ_n stehen ja gar nicht sämtliche Frequenzen zur Verfügung), wohl aber mit erdrückender Wahrscheinlichkeit — wenn die Zeit t kurz ist, und die ϱ_n sehr dicht liegen (was für einen großen Hohlraum H der Fall ist). Weiter erhöhen auch die $w_{k \bar{k}}^n$ die Häufigkeiten dieser Prozesse — sie werden bald mit den Übergangswahrscheinlichkeiten identifiziert werden können.

Aus unseren $b_k \bar{M}_1 \bar{M}_2 \dots \bar{M}_{n \pm 1} \dots$ -Formeln folgt weiter:

$$|b_k \bar{M}_1 \bar{M}_2 \dots \bar{M}_{n+1} \dots|^2 = \frac{2}{h^2} (\bar{M}_n + 1) |w_{k\bar{k}}^n|^2 \frac{1 - \cos 2\pi \left(\varrho_n - \frac{W_{\bar{k}} - W_k}{h} \right) t}{\left(\varrho_n - \frac{W_{\bar{k}} - W_k}{h} \right)^2} \quad {}^{151}$$

$$|b_k \bar{M}_1 \bar{M}_2 \dots \bar{M}_{n-1} \dots|^2 = \frac{2}{h^2} \bar{M}_n |w_{k\bar{k}}^n|^2 \frac{1 - \cos 2\pi \left(\varrho_n - \frac{W_k - W_{\bar{k}}}{h} \right) t}{\left(\varrho_n - \frac{W_k - W_{\bar{k}}}{h} \right)^2} \quad {}^{151}$$

$$|b_k M_1 M_2 \dots|^2 = 0$$

für $k M_1 M_2 \dots \neq \bar{k} \bar{M}_1 \bar{M}_2 \dots$, $k \bar{M}_1 \bar{M}_2 \dots \bar{M}_n \pm 1 \dots$.

Hieraus ergibt sich für θ_k , $k \neq \bar{k}$,

$$\begin{aligned} \theta_k &= \sum_1^\infty \frac{2}{h^2} (\bar{M}_n + 1) |w_{k\bar{k}}^n|^2 \frac{1 - \cos 2\pi \left(\varrho_n - \frac{W_{\bar{k}} - W_k}{h} \right) t}{\left(\varrho_n - \frac{W_{\bar{k}} - W_k}{h} \right)^2} \\ &+ \sum_1^\infty \frac{2}{h^2} \bar{M}_n |w_{k\bar{k}}^n|^2 \frac{1 - \cos 2\pi \left(\varrho_n - \frac{W_k - W_{\bar{k}}}{h} \right) t}{\left(\varrho_n - \frac{W_k - W_{\bar{k}}}{h} \right)^2}. \end{aligned}$$

(Die erste \sum_1^∞ entspricht den Emissionen, die zweite \sum_1^∞ den Absorptionen.) Um diese θ_k in geschlossener Form angeben zu können, müssen wir nun vereinfachende Annahmen machen, indem wir einerseits \mathbf{H} als sehr groß annehmen (d. h. sein Volum $\mathcal{V} \rightarrow \infty$), und andererseits die Eigenschwingungen $\bar{\mathfrak{M}}_n$ von \mathbf{H} statistisch behandeln. Zu diesem Zwecke fassen wir in einer jeden der beiden Summen alle Glieder zusammen, die zu ϱ_n zwischen ϱ und $\varrho + d\varrho$ gehören (für $w_{k\bar{k}}^n$ setzen wir seinen Wert ein, und nehmen $d\varrho \ll \varrho$ an):

$$\frac{1}{4\pi^2 c^2 h \varrho} \left[\sum_{\varrho \leq \varrho_n < \varrho + d\varrho} \left| \sum_1^l \frac{\varepsilon_\nu}{m_\nu} (P_\nu^x \bar{\mathfrak{M}}_{n,x} (Q_\nu^x, Q_\nu^y, Q_\nu^z) + \dots)_{k\bar{k}} \right|^2 (\bar{M}_n + 1) \right] \frac{1 - \cos 2\pi \left(\varrho - \frac{W_{\bar{k}} - W_k}{h} \right) t}{\left(\varrho - \frac{W_{\bar{k}} - W_k}{h} \right)^2},$$

und noch einmal dasselbe, aber mit \bar{M}_n an Stelle von $\bar{M}_n + 1$, und $\frac{W_k - W_{\bar{k}}}{h}$ an Stelle von $\frac{W_{\bar{k}} - W_k}{h}$. Nunmehr sind die Klammern $[\dots]$ zu bestimmen.

Die übliche Beschreibungsweise der $M_1, M_2 \dots$ ist aber nicht die Angabe ihrer Werte, sondern viel weniger: nämlich die Angabe der Intensitäten, d. h. die Angabe, daß auf das Spektralintervall von ϱ bis

$\varrho + d\varrho$ und die Volumeinheit die Lichtenergie $I(\varrho)d\varrho$ entfällt. Das bedeutet

$$\sum_{e \leq \varrho < \varrho + d\varrho} h \varrho_n \cdot \bar{M}_n \approx h \varrho \sum_{e \leq \varrho + d\varrho} \bar{M}_n = \mathcal{V} \cdot I(\varrho) d\varrho,$$

$$\sum_{e \leq \varrho < \varrho + d\varrho} \bar{M}_n = \frac{\mathcal{V} I(\varrho)}{h \varrho} d\varrho.$$

Die Zahl der ϱ_n im Intervalle $\varrho \leq \varrho_n < \varrho + d\varrho$ ist nach einer allgemeingültigen asymptotischen Formel von WEYL (vgl. a. a. O., Anm. 140), $\frac{8\pi \mathcal{V} \varrho^2}{c^2} d\varrho$, daher ist

$$\sum_{e \leq \varrho < \varrho + d\varrho} (\bar{M}_n + 1) \approx \frac{\mathcal{V} \left(I(\varrho) + \frac{8\pi h \varrho^3}{c^3} \right)}{h \varrho} d\varrho.$$

Für die oben gewonnenen $[\dots]$ ergeben sich also, falls $\left| \sum_1^l \frac{e_\nu}{m_\nu} (P_\nu^x \bar{M}_{n,x}(Q_\nu^x, Q_\nu^y, Q_\nu^z) + \dots)_{k\bar{k}} \right|^2$ im Intervalle $\varrho \leq \varrho_n < \varrho + d\varrho$ (hinreichend schnelle) Schwankungen um einen Mittelwert, der $w_{k\bar{k}}(\varrho)$ heißen möge, ausführt, die folgenden Ausdrücke:

$$w_{k\bar{k}}(\varrho) \frac{\mathcal{V} \left(I(\varrho) + \frac{8\pi h \varrho^3}{c^3} \right)}{h \varrho} d\varrho \quad \text{und} \quad w_{k\bar{k}}(\varrho) \frac{\mathcal{V} I(\varrho)}{h \varrho} d\varrho.$$

Schreiben wir noch $\nu_{\bar{k}k}$ für $\frac{W_{\bar{k}} - W_k}{h}$ und $\nu_{k\bar{k}}$ für $\frac{W_k - W_{\bar{k}}}{h}$, so erhalten wir für unsere Summen:

$$\theta_k = \frac{\mathcal{V}}{4\pi^2 c^2 h^2} \int_0^\infty \left\{ \left(I(\varrho) + \frac{8\pi h \varrho^3}{c^3} \right) \frac{1 - \cos 2\pi(\varrho - \nu_{\bar{k}k})t}{(\varrho - \nu_{\bar{k}k})^2} + I(\varrho) \frac{1 - \cos 2\pi(\varrho - \nu_{k\bar{k}})t}{(\varrho - \nu_{k\bar{k}})^2} \right\} \frac{w_{k\bar{k}}(\varrho)}{\varrho^2} d\varrho.$$

Dieses Integral hat für kleine t offenbar die Größenordnung von t^2 (weil es $1 - \cos 2\pi c t$ tut), ausgenommen in denjenigen Teilen des Integrationsgebietes, in denen die Nenner $(\varrho - \nu_{\bar{k}k})^2$ bzw. $(\varrho - \nu_{k\bar{k}})^2$, klein sind. Hier können Beiträge entstehen, die groß gegen t^2 sind, und ist dies der Fall, so sind diese Beiträge der asymptotische Ausdruck für θ_k . Es wird sich tatsächlich zeigen, daß dem so ist, denn wir werden Beiträge von der Größenordnung t erhalten — diese gilt es also zu bestimmen.

Da $\nu_{\bar{k}k} = -\nu_{k\bar{k}} = \frac{W_{\bar{k}} - W_k}{h}$ ist, wird für $W_{\bar{k}} > W_k$ nur der Nenner des ersten Gliedes klein, für $W_{\bar{k}} < W_k$ nur derjenige des zweiten Gliedes — wir behalten also für $W_{\bar{k}} >$ bzw. $< W_k$ nur das erste bzw. zweite Glied. Da ferner von $\nu_{\bar{k}k}$ bzw. $\nu_{k\bar{k}}$ — es heiße kurz $\bar{\nu}_{k\bar{k}} = \frac{|W_{\bar{k}} - W_k|}{h}$ — weiter weg liegende ϱ nur t^2 -Beiträge zum Integral geben, können wir den

Integranden durch seinen Wert für $\varrho = \bar{\nu}_{k\bar{k}}$ ersetzen, d. i. $\frac{I w_{k\bar{k}}(\bar{\nu}_{k\bar{k}})}{\bar{\nu}_{k\bar{k}}^2}$ wobei $I = I(\bar{\nu}_{k\bar{k}}) + \frac{8\pi h}{c^3} \bar{\nu}_{k\bar{k}}^3$ bzw. $= I(\bar{\nu}_{k\bar{k}})$ ist. Also:

$$\theta_k = \frac{\mathcal{V} I w_{k\bar{k}}(\bar{\nu}_{k\bar{k}})}{4\pi^2 c^2 h^2 \bar{\nu}_{k\bar{k}}^2} \int_0^\infty \frac{1 - \cos 2\pi(\varrho - \bar{\nu}_{k\bar{k}})t}{(\varrho - \bar{\nu}_{k\bar{k}})^2} d\varrho.$$

Da es wiederum nur einen t^2 -Beitrag bedeutet, können wir \int_0^∞ durch $\int_{-\infty}^\infty$ ersetzen und dann die neue Variable $x = 2\pi(\varrho - \bar{\nu}_{k\bar{k}})t$ einführen. Wegen

$$\int_{-\infty}^\infty \frac{1 - \cos 2\pi(\varrho - \bar{\nu}_{k\bar{k}})t}{(\varrho - \bar{\nu}_{k\bar{k}})^2} d\varrho = 2\pi t \int_{-\infty}^\infty \frac{1 - \cos x}{x^2} dx = 152 = 2\pi^2 t$$

ist schließlich

$$\theta_k = \frac{\mathcal{V} I w_{k\bar{k}}(\bar{\nu}_{k\bar{k}})}{2 h^2 \bar{\nu}_{k\bar{k}}^2} t,$$

womit auch erwiesen ist, daß θ_k von der Größenordnung t ist.

Um $w_{k\bar{k}}(\bar{\nu}_{k\bar{k}})$ zu bestimmen, müssen wir für

$$\left| \sum_1^l \frac{e_r}{m_r} (P_r^x \bar{\mathfrak{A}}_{n,x} (Q_r^x, Q_r^y, Q_r^z) + \dots)_{k\bar{k}} \right|^2$$

einen $\bar{\mathfrak{A}}_n$ -freien Ausdruck finden. Diesen gewinnen wir, indem wir $\bar{\mathfrak{A}}_n$, in Hinblick auf seine raschen Schwankungen durch einen regellos orientierten Vektor konstanter Länge ersetzen — wegen der Konstanz, d. h. Unabhängigkeit von Q_r^x, Q_r^y, Q_r^z ist er also ein Zahlenvektor mal die Matrix $\mathbf{1}$ — und die konstante Länge γ_n ist aus der Normierung

$$\iiint_H [\bar{\mathfrak{A}}_n, \bar{\mathfrak{A}}_n] dx dy dz = 4\pi c^2$$

zu bestimmen. Also

$$\mathcal{V} \gamma_n^2 = 4\pi c^2, \quad \gamma_n^2 = \frac{4\pi c^2}{\mathcal{V}}.$$

Auf die x -Komponente $\bar{\mathfrak{A}}_{n,x}^2$ entfällt durchschnittlich $\frac{1}{3}$ von $[\bar{\mathfrak{A}}_n, \bar{\mathfrak{A}}_n] = \bar{\mathfrak{A}}_{n,x}^2 + \bar{\mathfrak{A}}_{n,y}^2 + \bar{\mathfrak{A}}_{n,z}^2 = \gamma_n^2$, also ist sie $\frac{1}{3} \gamma_n^2 = \frac{4\pi c^2}{3\mathcal{V}}$, ebenso $\bar{\mathfrak{A}}_{n,y}^2$ und $\bar{\mathfrak{A}}_{n,z}^2$. Infolgedessen wird

$$\begin{aligned} w_{k\bar{k}}(\varrho) &= \text{Mittel} \left| \sum_1^l \frac{e_r}{m_r} (P_r^x \bar{\mathfrak{A}}_{n,x} (Q_r^x, Q_r^y, Q_r^z) + \dots)_{k\bar{k}} \right|^2 \\ &\approx \frac{4\pi c^2}{3\mathcal{V}} \left(\left| \left(\sum_1^l \frac{e_r}{m_r} P_r^x \right)_{k\bar{k}} \right|^2 + \dots \right). \end{aligned}$$

Da H_0 , die Energie des für sich allein betrachteten Systems S , gleich kinetische Energie + potentielle Energie ist, also von der Form

$$H_0 = \sum_1^l \frac{1}{2 m_\nu} ((P_\nu^x)^2 + (P_\nu^y)^2 + (P_\nu^z)^2) + V(Q_1^x, Q_1^y, Q_1^z, \dots, Q_l^x, Q_l^y, Q_l^z),$$

ist, gilt ¹⁵³

$$H_0 Q_\nu^x - Q_\nu^x H_0 = \frac{h}{2\pi i} \frac{1}{m_\nu} P_\nu^x;$$

und da H_0 eine Diagonalmatrix mit den Diagonalelementen W_1, W_2, \dots ist [$(H_0)_{kj} = W_k \delta_{kj}$], folgt hieraus für die Matrizenelemente

$$\begin{aligned} (P_\nu^x)_{k\bar{k}} &= \frac{2\pi i m_\nu}{h} (H_0 Q_\nu^x - Q_\nu^x H_0)_{k\bar{k}} = \frac{2\pi i m_\nu}{h} (W_k - W_{\bar{k}}) (Q_\nu^x)_{k\bar{k}} \\ &= \pm i \cdot 2\pi m_\nu \bar{\nu}_{k\bar{k}} (Q_\nu^x)_{k\bar{k}}. \end{aligned}$$

Also:

$$w_{k\bar{k}}(Q) = \frac{16\pi^3 c^2}{3V\hbar^2} \bar{\nu}_{k\bar{k}}^2 (|\sum_1^l e_\nu (Q_\nu^x)_{k\bar{k}}|^2 + \dots).$$

Einsetzen in die θ_k -Formel ergibt:

$$\theta_k = \frac{8\pi^3}{3\hbar^2} (|\sum_1^l e_\nu (Q_\nu^x)_{k\bar{k}}|^2 + \dots) \cdot I t.$$

Dieses Resultat ist, wenn wir noch $w_{k\bar{k}} = |\sum_1^l e_\nu (Q_\nu^x)_{k\bar{k}}|^2 + \dots$ setzen, offenbar so zu interpretieren: Das Atom S im k -ten Zustande führt die folgenden Übergänge (Quantensprünge) aus

1. Es geht in höhere Zustände \bar{k} ($W_{\bar{k}} > W_k$) über, und zwar $\frac{8\pi^3}{3\hbar^2} w_{k\bar{k}} I \left(\frac{W_{\bar{k}} - W_k}{h}\right)$ -mal pro Sekunde — d. h. der Intensität des Strahlungsfeldes in der entsprechenden Bohrschen Frequenz, $\frac{W_{\bar{k}} - W_k}{h}$ proportional.

2. Es geht in tiefere Zustände \bar{k} ($W_{\bar{k}} < W_k$) über, und zwar $\frac{8\pi^3}{3\hbar^2} w_{k\bar{k}} I \left(\frac{W_k - W_{\bar{k}}}{h}\right)$ -mal pro Sekunde — d. h. der Intensität des Strahlungsfeldes in der entsprechenden Bohrschen Frequenz, $\frac{W_k - W_{\bar{k}}}{h}$, proportional.

3. Es geht außerdem in tiefere Zustände \bar{k} ($W_{\bar{k}} < W_k$) über, und zwar $\frac{64\pi^4}{3\hbar c^3} w_{k\bar{k}} \left(\frac{W_k - W_{\bar{k}}}{h}\right)^3$ -mal pro Sekunde — d. h. in völliger Unabhängigkeit vom vorhandenen Strahlungsfelde.

1. entspricht Absorptionsprozessen aus dem Strahlungsfelde; 2. Emissionsprozessen, die vom Strahlungsfeld veranlaßt werden; 3. aber spontanen Emissionsprozessen, die das Atom immer ausführen wird, solange es nicht in seinem tiefsten stationären Zustande (minimales W_k !) endgültige Ruhe gefunden hat.

Die drei Übergangsmechanismen 1—3 waren schon vor der Entdeckung der Quantenmechanik von EINSTEIN thermodynamisch auf-

gefunden worden¹⁵⁴, nur der Wert der „Übergangswahrscheinlichkeit“ $w_{k\bar{k}}$ fehlte. Der obige Wert

$$w_{k\bar{k}} = \left| \left(\sum_1^l e_\nu Q_\nu^x \right)_{k\bar{k}} \right|^2 + \left| \left(\sum_1^l e_\nu Q_\nu^y \right)_{k\bar{k}} \right|^2 + \left| \left(\sum_1^l e_\nu Q_\nu^z \right)_{k\bar{k}} \right|^2$$

ist, wie wir schon erwähnten, im ersten Interpretations-Ansatz HEISENBERGS enthalten. Wir haben ihn jetzt (nach DIRAC) auf Grund der allgemeinen Theorie begründet.

IV. Deduktiver Aufbau der Theorie.

1. Prinzipielle Begründung der statistischen Theorie.

Im Teil III. gelang es uns, alle Aussagen der Quantenmechanik auf die statistische Formel (sie hieß dort \mathbf{E}_2 .)

$$(\overline{\mathbf{E}}.) \quad \text{Erw}(\mathfrak{N}, \varphi) = (R\varphi, \varphi)$$

($\text{Erw}(\mathfrak{N}, \varphi)$ ist der Erwartungswert der Größe \mathfrak{N} im Zustande φ , R ist der Operator von \mathfrak{N}) zurückzuführen. Im folgenden soll gezeigt werden, wie diese Formel selbst auf Grund einiger allgemeiner qualitativer Annahmen hergeleitet werden kann, und gleichzeitig wird der ganze in III. durchgeführte Aufbau der Quantenmechanik auf sie noch einmal überprüft werden. Ehe wir aber dies tun, ist noch eine Bemerkung vonnöten.

Im Zustande φ hat die Größe \mathfrak{N} den Erwartungswert $\varrho = (R\varphi, \varphi)$, und als Streuung ε^2 den Erwartungswert der Größe $(\mathfrak{N} - \varrho)^2$, d. h. $((R - \varrho \cdot 1)^2 \varphi, \varphi) = \|R\varphi\|^2 - (R\varphi, \varphi)^2$ (vgl. Anm. 130; alles auf Grund von $\overline{\mathbf{E}}$. berechnet!), die im allgemeinen > 0 ist ($= 0$ wird sie nur für $R\varphi = \varrho \cdot \varphi$, vgl. III. 3.) — schon in einem einheitlichen Zustande φ besteht also, wie wir es mehrmals feststellten, nur eine Statistik. Aber der statistische Charakter kann noch dadurch verschärft werden, daß man gar nicht weiß, welcher Zustand eigentlich vorliegt — daß z. B. mehrere Zustände $\varphi_1, \varphi_2, \dots$ mit den bzw. Wahrscheinlichkeiten w_1, w_2, \dots ($w_1 \geq 0, w_2 \geq 0, \dots, w_1 + w_2 + \dots = 1$) in Frage kommen. Dann ist der Erwartungswert der Größe \mathfrak{N} , im Sinne der allgemeingültigen Regeln der Wahrscheinlichkeitsrechnung, $\varrho' = \sum^n w_n \cdot (R\varphi_n, \varphi_n)$.

Nun ist allgemein $(R\varphi, \varphi) = \text{Spur}(P_{[\varphi]} \cdot R)$. Denn wenn wir ein vollständiges normiertes Orthogonalsystem ψ_1, ψ_2, \dots so wählen, daß $\psi_1 = \varphi$ ist (also ψ_2, ψ_3, \dots orthogonal zu φ), so ist

$$P_{[\varphi]} \psi_n \begin{cases} = \varphi, & \text{für } n = 1 \\ = 0, & \text{sonst} \end{cases} \Big|,$$

also

$$\begin{aligned} \text{Spur}(P_{[\varphi]} \cdot R) &= \sum^m, n (P_{[\varphi]} \psi_n, \psi_m) (R\psi_m, \psi_n) \\ &= \sum^m (\varphi, \psi_m) (R\psi_m, \varphi) = (R\varphi, \varphi). \end{aligned}$$

Daher ist unser $\varrho' = \text{Spur} (\{ \sum^n w_n P_{[\varphi_n]} \} \cdot R)$. Der Operator

$$U = \sum^n w_n P_{[\varphi_n]}$$

ist wegen der Definitivität aller $P_{[\varphi_n]}$ und $w_n \geq 0$ definit, seine Spur ist wegen $\text{Spur } P_{[\varphi_n]} = 1$ gleich $\sum^n w_n = 1$ — und er charakterisiert das soeben beschriebene Gemisch von Zuständen in seinen statistischen Eigenschaften völlig:

$$\varrho' = \text{Spur} (U R).$$

Indem wir vermerken, daß wir neben den Zuständen auch diesen Gemischen unsere Aufmerksamkeit werden zuwenden müssen, gehen wir zur allgemeinen Untersuchung über.

Vergessen wir die ganze Quantenmechanik, und halten wir an folgendem fest. Gegeben ist ein System S ¹⁵⁵, welches für den Experimentator gekennzeichnet ist durch die Angabe aller an ihm effektiv meßbaren Größen, und ihrer funktionellen Verknüpfungen untereinander. Unter einer Größe ist eigentlich die Anweisung zu verstehen, wie sie zu messen ist — und wie ihr Wert aus den Zeigerstellungen der Meßinstrumente abzulesen bzw. zu berechnen ist. Wenn \mathfrak{M} eine Größe ist, und $f(x)$ irgendeine Funktion, so ist die Größe $f(\mathfrak{M})$ so definiert: um $f(\mathfrak{M})$ zu messen, messe man \mathfrak{M} , findet man dabei (für \mathfrak{M}) den Wert a , so hat $f(\mathfrak{M})$ den Wert $f(a)$. Wie man sieht, werden so alle Größen $f(\mathfrak{M})$ (\mathfrak{M} fest, $f(x)$ eine beliebige Funktion) auf einmal miteinander und mit \mathfrak{M} gemessen: ein erstes Beispiel gleichzeitig meßbarer Größen. Allgemein nennen wir zwei (oder mehrere) Größen $\mathfrak{M}, \mathfrak{C}$ gleichzeitig meßbar, wenn es eine Anordnung gibt, die beide gleichzeitig am selben System mißt — nur daß ihre bzw. Werte auf verschiedene Weisen aus den Ablesungen zu berechnen sind. (In der klassischen Mechanik sind bekanntlich alle Größen gleichzeitig meßbar, in der Quantenmechanik ist es, wie wir es in III. 3. sahen, nicht so.) Für solche Größen, und eine Zweivariablenfunktion $f(x, y)$ können wir auch die Größe $f(\mathfrak{M}, \mathfrak{C})$ definieren: sie wird gemessen, indem man $\mathfrak{M}, \mathfrak{C}$ gleichzeitig mißt, und wenn für diese die Werte a, b gefunden wurden, so ist der Wert von $f(\mathfrak{M}, \mathfrak{C})$ $f(a, b)$. Man vergegenwärtige sich aber, daß es vollkommen unsinnig ist, $f(\mathfrak{M}, \mathfrak{C})$ bilden zu wollen, wenn $\mathfrak{M}, \mathfrak{C}$ nicht gleichzeitig meßbar sind: es gibt ja keinen Weg, die dazugehörige Meßanordnung anzugeben.

Die Untersuchung der physikalischen Größen an einem einzigen Objekt S ist aber nicht das einzige, was wir tun können — besonders nicht, wenn Zweifel bezüglich der gleichzeitigen Meßbarkeit mehrerer Größen bestehen. Es ist in solchen Fällen gegeben, auch große statistische Gesamtheiten zu betrachten, die aus vielen Systemen S_1, \dots, S_N (d. h. N Exemplaren von S , N groß) bestehen¹⁵⁶. An einer solchen Gesamtheit $[S_1, \dots, S_N]$ mißt man natürlich nicht den „Wert“ einer Größe \mathfrak{M} , sondern ihre Wertverteilung: d. h. für jedes Intervall $a' < a \leq a''$

(a', a'' gegeben, $a' \leq a''$) die Anzahl derjenigen unter den S_1, \dots, S_N , für welche der Wert von \mathfrak{R} darin liegt — der N -te Teil davon ist die Wahrscheinlichkeitsfunktion $w(a', a'') = w(a'') - w(a')$ ¹⁵⁷. Der große Vorzug des Betrachtens solcher Gesamtheiten ist der, daß

1. Selbst wenn die Messung einer Größe \mathfrak{R} das gemessene System S stark verändern sollte (in der Quantenmechanik ist dies ja der Fall, und in III. 4. sahen wir, daß dies in der Physik der Elementarprozesse prinzipiell so sein muß, da der Meßeingriff von derselben Größenordnung ist wie das System bzw. seine beobachteten Teile), ändert dennoch die statistische Aufnahme der Wahrscheinlichkeitsverteilung von \mathfrak{R} in der Gesamtheit $[S_1, \dots, S_N]$ an dieser beliebig wenig, wenn N groß genug ist.

2. Selbst wenn zwei (oder mehr) Größen $\mathfrak{R}, \mathfrak{S}$ am Einzelsystem S nicht gleichzeitig meßbar sind, sind doch ihre Wahrscheinlichkeitsverteilungen in ein und derselben Gesamtheit $[S_1, \dots, S_N]$ gleichzeitig beliebig genau ermittelbar, wenn N groß genug ist.

Bei einer aus N Elementen bestehenden Gesamtheit genügt es nämlich, die auf die Wertverteilung der Größe \mathfrak{R} bezüglichen statistischen Erhebungen nicht an allen N Elementen S_1, \dots, S_N auszuführen, sondern an irgendeinem Teilsystem von $M (\leq N)$ Elementen, etwa $[S_1, \dots, S_M]$ — falls M, N beide groß sind, wobei M durchaus klein im Verhältnis zu N sein darf¹⁵⁸. Durch die Veränderungen bei der Messung wird dann überhaupt nur der $\frac{M}{N}$ -te Teil der Gesamtheit berührt, also ein beliebig kleiner, wenn $\frac{M}{N}$ klein genug gewählt wird — was für hinreichend großes N selbst bei großem M möglich ist, wie in 1. behauptet wurde. Um zwei (oder mehrere) Größen $\mathfrak{R}, \mathfrak{S}$ gleichzeitig zu messen, brauchen wir zwei Teilsysteme, etwa $[S_1, \dots, S_M]$ und $[S_{M+1}, \dots, S_{2M}]$ ($2M \leq N$), derart, daß das erste zur Aufnahme der Statistik von \mathfrak{R} verwendet wird, und das zweite zu derjenigen von \mathfrak{S} . Die beiden Messungen stören sich dann nicht, obwohl sie an derselben Gesamtheit $[S_1, \dots, S_N]$ erfolgen, und sie verändern diese sogar nur um einen beliebig kleinen Bruchteil, wenn $\frac{2M}{N}$ klein genug ist — was für hinreichend großes N selbst bei großem M möglich ist, wie in 2. behauptet wurde.

Man sieht: das Heranziehen statistischer Gesamtheiten, d. h. wahr-scheinlichkeitstheoretischer Methoden ist durch die Möglichkeit des Beeinflußtwerdens des Einzelsystems durch die Messung, und durch die evtl. nichtgleichzeitige Meßbarkeit mehrerer Größen geboten — eine allgemeine Theorie muß ja auf diese Umstände Rücksicht nehmen, da ihr Auftreten bei Elementarprozessen stets zu vermuten war¹⁵⁹, und heute durch genaue Diskussion der Verhältnisse unzweifelhaft geworden ist (vgl. III. 4.). Die statistischen Gesamtheiten beheben diese Schwierig-

keiten wieder, und machen dadurch eine objektive Beschreibung (die von Zufällen, sowie davon, ob man im gegebenen Zustande von zwei nicht gleichzeitig meßbaren Größen die eine oder die andere mißt, unabhängig ist) wieder möglich.

Bei solchen Gesamtheiten ist es nicht verwunderlich, wenn eine physikalische Größe \mathfrak{M} keinen scharfen Wert hat, d. h. wenn ihre Wertverteilung nicht aus einem einzigen Werte a_0 besteht¹⁶⁰, sondern mehrere Werte oder Wertintervalle möglich sind, und eine positive Streuung da ist¹⁶⁰. Immerhin sind zwei verschiedene Gründe für dieses Verhalten denkbar:

I. Die einzelnen Systeme S_1, \dots, S_N unserer Gesamtheit können in verschiedenen Zuständen sein, so daß die Gesamtheit $[S_1, \dots, S_N]$ durch deren relative Häufigkeiten definiert ist. Daß wir hier für die physikalischen Größen keine scharfen Werte herausbekommen, ist durch unsere Unwissenheit bedingt: wir wissen ja nicht, an welchem Zustande wir messen, also können wir auch nicht sagen, was herauskommen wird.

II. Alle einzelnen Systeme S_1, \dots, S_N sind im selben Zustande, aber die Naturgesetze sind nicht kausal. Dann ist nicht unsere Unwissenheit die Ursache der Streuungen, sondern die Natur selbst ist es, die sich über das „Prinzip vom hinreichenden Grunde“ hinweggesetzt hat.

Der Fall **I.** ist allgemein bekannt, wichtig und neu ist dagegen Fall **II.** Freilich wird man zunächst gegen die Möglichkeit seines Bestehens skeptisch sein, wir werden aber ein objektives Kriterium finden, welches über sein Eintreten oder Nichteintreten zu entscheiden erlaubt. Schwerwiegende Einwände scheinen zunächst gegen seine Denkbarkeit und Sinnvollheit erhoben werden zu können, wir glauben aber nicht, daß diese stichhaltig sind, und **II.** ist aus gewissen Schwierigkeiten (z. B. in der Quantenmechanik) der einzige Ausweg. Wir wenden uns darum der Diskussion der begrifflichen Schwierigkeiten von **II.** zu.

Gegen **II.** ist einzuwenden: die Natur kann das „Prinzip vom hinreichenden Grunde“, d. h. die Kausalität, überhaupt nicht verletzen, denn es handelt sich dabei mehr um eine Definition der Gleichheit. D. h.: der Satz, daß zwei gleiche Objekte S_1, S_2 — d. h. zwei Exemplare des Systems S , die im selben Zustande sind — sich bei allen denkbaren Eingriffen gleich verhalten werden, ist wahr, weil er nichtssagend ist. Denn verhielten sich S_1, S_2 beim selben Eingriff verschieden (z. B. gäben sie bei der Messung einer Größe \mathfrak{M} verschiedene Werte für diese), so würde man sie nicht als gleich bezeichnen; in einer Gesamtheit $[S_1, \dots, S_N]$, die in bezug auf eine Größe \mathfrak{M} streut, können also die einzelnen Systeme S_1, \dots, S_N per definitionem nicht alle im selben Zustande sein. (Die Nutzenanwendung auf die Quantenmechanik wäre: Da bei der Messung derselben Größe \mathfrak{M} an mehreren Systemen, die alle im Zustande mit der Wellenfunktion φ sind, verschiedene

Werte herauskommen — wenn φ nicht Eigenfunktion des Operators R von \mathfrak{N} ist ¹⁶¹ — so sind diese Systeme einander eben nicht „gleich“, d. h. die Beschreibung durch die Wellenfunktion ist nicht vollständig. Daher müßten noch andere Bestimmungsstücke, die in III. 2. erwähnten „verborgenen Parameter“ existieren. Wir werden bald sehen, daß dies nicht ohne weiteres angeht.) Bei einer großen statistischen Gesamtheit muß also, solange noch irgendeine Größe \mathfrak{N} in ihr streut, die Möglichkeit bestehen, sie in mehrere, verschieden konstituierte Teile (nach den verschiedenen Zuständen ihrer Elemente) zu zerlegen. Dies ist um so plausibler, als tatsächlich eine einfache Methode einer solchen Zerlegung zu existieren scheint: man kann sie nämlich nach den verschiedenen Werten zerlegen, die \mathfrak{N} in ihr angenommen hat. Eine wirklich einheitliche Gesamtheit sollte man erst erhalten, nachdem man diese Unterteilung oder Zerlegung in bezug auf alle Größen $\mathfrak{N}, \mathfrak{C}, \mathfrak{Z}, \dots$, die es gibt, durchgeführt hat. Am Ende würden dann die genannten Größen in keiner der Unterteilungsgesamtheiten mehr streuen.

Zunächst sind die in den letzten Sätzen enthaltenen Aussagen falsch, weil nicht beachtet wurde, daß die Messung das gemessene System verändert. Wenn man \mathfrak{N} (das der Einfachheit halber nur zweier Werte a_1, a_2 fähig sei) an allen Objekten S_1, \dots, S_N mißt, und etwa bei S'_1, \dots, S'_{N_1} a_1 und bei $S''_1, \dots, S''_{N-N_1}$ a_2 bekommt, so streut es nachher weder in $[S'_1, \dots, S'_{N_1}]$, noch in $[S''_1, \dots, S''_{N-N_1}]$ (es ist dort stets a_1 bzw. stets a_2). Jedoch ist dies nicht eine bloße Zerlegung von $[S_1, \dots, S_N]$ in die zwei genannten Teile, denn die Einzelsysteme wurden durch die \mathfrak{N} -Messung verändert. Zwar fanden wir nach I. eine Methode, die Werteverteilung von \mathfrak{N} so zu ermitteln, daß $[S_1, \dots, S_N]$ nur wenig geändert wurde (indem wir nur an S_1, \dots, S_M maßen; M groß, $\frac{M}{N}$ klein), jedoch führt dieses Verfahren zu keiner Zerlegung, da es von den meisten S_1, \dots, S_N (nämlich S_{M+1}, \dots, S_N) gar nicht feststellt, welchen Wert \mathfrak{N} in jeder einzelnen unter ihnen hat. Und jetzt erkennt man, daß die oben angegebene Methode zur Erzeugung ganz einheitlicher Gesamtheiten versagt. Denn nunmehr messe man eine zweite Größe \mathfrak{C} (die auch nur zweier Werte, b_1, b_2 , fähig sei) in $[S'_1, \dots, S'_{N_1}]$ und $[S''_1, \dots, S''_{N-N_1}]$. Es werde b_1 in S''_1, \dots, S''_{N_1} und S'_1, \dots, S'_{N_1} gefunden, und b_2 in $S''_1, \dots, S''_{N_1-N_1}$ und $S'_1, \dots, S'_{N_1-N_1}$. In $[S''_1, \dots, S''_{N_1}]$, $[S'_1, \dots, S'_{N_1-N_1}]$, $[S'_1, \dots, S'_{N_1-N_1}]$, $[S'_1, \dots, S'_{N_1-N_1}]$ streut dann \mathfrak{C} nicht mehr (sein Wert ist stets b_1 , bzw. stets b_2 , bzw. stets b_1 , bzw. stets b_2). Aber obwohl die zwei ersten Gesamtheiten Teile von $[S'_1, \dots, S'_{N_1}]$ sind, und die zwei letzten Teile von $[S''_1, \dots, S''_{N-N_1}]$, in denen \mathfrak{N} nicht streute, kann in einer jeden von ihnen \mathfrak{N} streuen — denn die \mathfrak{C} -Messung hat die Einzelsysteme (aus denen sie bestehen) verändert! D. h. man kommt nicht vorwärts, weil jeder Schritt das Resultat der vorhergehenden zerstört ¹⁶², und keine Häufung sukzessiver

Messungen vermag in diesen Wirrwarr kausale Ordnung zu bringen: weil man eben im Atomaren am Rande der physikalischen Welt ist, wo jede Messung ein Eingriff von derselben Größenordnung ist wie das gemessene Objekt, und es daher wesentlich beeinflusst — d. h. im wesentlichen wegen der Unbestimmtheitsrelationen.

Es gibt also u. U. keine Methode, die es immer ermöglicht, streuende Gesamtheiten (ohne Veränderung ihrer Elemente) weiter zu zerlegen, oder gar bis zu den überhaupt nicht mehr streuenden einheitlichen Gesamtheiten vorzudringen — die wir uns aus kausal determinierten, untereinander gleichen Einzelobjekten bestehend zu denken pflegen. Trotzdem könnte man es versuchen, die Fiktion aufrechtzuerhalten, daß jede streuende Gesamtheit in zwei (oder mehr) voneinander und von ihr verschiedene Teile zerlegt werden kann; und zwar ohne Veränderung ihrer Elemente, d. h. derart, daß das Vermischen der zwei Zerlegungsgesamtheiten wieder die ursprüngliche Gesamtheit ergibt. Wie man sieht, ist also aus dem Versuch, die Kausalität als Gleichheitsdefinition zu begründen, eine Tatsachenfrage geworden, die beantwortet werden kann und muß, und die vielleicht auch negativ beantwortet werden wird. Nämlich: ist es wirklich möglich, jede Gesamtheit $[S_1, \dots, S_N]$, in der es streuende Größen \mathfrak{N} gibt, durch Vermischen von zwei (oder mehr) voneinander und von ihr verschiedener Gesamtheiten darzustellen? (Mehr als zwei, etwa $n = 3, 4, \dots$, kann man auf zwei zurückführen, indem man die erste und das Gemisch der $n - 1$ übrigen betrachtet.)

Wenn $[S_1, \dots, S_N]$ etwa das Gemisch von $[S'_1, \dots, S'_P]$ und $[S''_1, \dots, S''_Q]$ wäre, so ließe sich für jede Größe \mathfrak{N} ihre Wahrscheinlichkeitsfunktion $w_{\mathfrak{N}}(a)$ (vgl. Anm. ¹⁵⁷) mit Hilfe der Wahrscheinlichkeitsfunktionen $w'_{\mathfrak{N}}(a), w''_{\mathfrak{N}}(a)$ der beiden letztgenannten Gesamtheiten so ausdrücken:

$$(M_{1.}) \quad w_{\mathfrak{N}}(a) = \alpha w'_{\mathfrak{N}}(a) + \beta w''_{\mathfrak{N}}(a), \quad \alpha > 0, \beta > 0, \alpha + \beta = 1.$$

Dabei ist $\alpha = \frac{P}{N}, \beta = \frac{Q}{N}$ ($N = P + Q$) von \mathfrak{N} unabhängig. Letzten Endes handelt es sich also um eine mathematische Frage: Wenn in einer Gesamtheit mit den Wahrscheinlichkeitsfunktionen $w_{\mathfrak{N}}(a)$ streuende Größen \mathfrak{N} existieren (welche Eigenschaft von $w_{\mathfrak{N}}(a)$ dies ist, steht in Anm. ¹⁶⁰), gibt es dann zwei andere Gesamtheiten mit den Wahrscheinlichkeitsfunktionen $w'_{\mathfrak{N}}(a)$ bzw. $w''_{\mathfrak{N}}(a)$, so daß für alle \mathfrak{N} $M_{1.}$ gilt? Dies läßt sich noch etwas anders formulieren, wenn man eine Gesamtheit nicht durch die Wahrscheinlichkeitsfunktionen $w_{\mathfrak{N}}(a)$ der Größen \mathfrak{N} , sondern durch deren Erwartungswerte

$$\text{Erw}(\mathfrak{N}) = \int_{-\infty}^{+\infty} a \, d w_{\mathfrak{N}}(a)$$

charakterisiert. Dann lautet unsere Frage so: Eine Gesamtheit ist

streuungsfrei, wenn in ihr für jedes \mathfrak{N}

$$\text{Erw}([\mathfrak{N} - \text{Erw}(\mathfrak{N})]^2) = \text{Erw}(\mathfrak{N}^2) - [\text{Erw}(\mathfrak{N})]^2$$

gleich Null ist (vgl. Anm. ¹⁶⁰), d. h.

$$(\text{Str}_1.) \quad \text{Erw}(\mathfrak{N}^2) = [\text{Erw}(\mathfrak{N})]^2.$$

Ist es, wenn dies nicht der Fall ist, immer möglich, zwei andere Gesamtheiten, mit $\text{Erw}'(\mathfrak{N})$, $\text{Erw}''(\mathfrak{N})$ zu finden

$$(\text{Erw}(\mathfrak{N}) \neq \text{Erw}'(\mathfrak{N}) \neq \text{Erw}''(\mathfrak{N})),$$

so daß stets

$$(\text{M}_2.) \quad \text{Erw}(\mathfrak{N}) = \alpha \text{Erw}'(\mathfrak{N}) + \beta \text{Erw}''(\mathfrak{N}), \quad \alpha > 0, \beta > 0, \alpha + \beta = 1$$

(α, β \mathfrak{N} -unabhängig) gilt? [Man beachte: Für eine gegebene Größe \mathfrak{N} ist die Zahl $\text{Erw}(\mathfrak{N})$ kein Ersatz für die Funktion $w_{\mathfrak{N}}(a)$; dagegen ist die Kenntnis aller $\text{Erw}(\mathfrak{N})$ derjenigen aller $w_{\mathfrak{N}}(a)$ gleichwertig. Denn

wenn $f_a(x)$ durch $f_a(x) \begin{cases} = 1, & \text{für } x \leq a, \\ = 0, & \text{für } x > a, \end{cases}$ definiert wird, so ist $w_{\mathfrak{N}}(a) = \text{Erw}(f_a(\mathfrak{N}))$.]

Um diese Frage mathematisch zu behandeln, ist es zweckmäßiger, nicht die Gesamtheiten $[\mathfrak{S}_1, \dots, \mathfrak{S}_N]$ zu betrachten, sondern die entsprechenden $\text{Erw}(\mathfrak{N})$. Zu jeder Gesamtheit gehört eine solche Funktion, die für alle physikalischen Größen \mathfrak{N} in \mathfrak{S} definiert ist und reelle Zahlen als Werte annimmt, und die umgekehrt die Gesamtheit in allen ihren statistischen Eigenschaften vollkommen charakterisiert. (Vgl. das vorhin über den Zusammenhang von $\text{Erw}(\mathfrak{N})$ und $w_{\mathfrak{N}}(a)$ Gesagte.) Wir müssen freilich noch herausfinden, welche Eigenschaften eine \mathfrak{N} -Funktion besitzen muß, damit sie $\text{Erw}(\mathfrak{N})$ einer geeigneten Gesamtheit ist. Sobald wir aber dies ausgeführt haben, können wir definieren:

$\alpha)$ Eine \mathfrak{N} -Funktion, die ein $\text{Erw}(\mathfrak{N})$ ist, heißt streuungslos, wenn sie die Bedingung Str_1 erfüllt.

$\beta)$ Eine \mathfrak{N} -Funktion, die ein $\text{Erw}(\mathfrak{N})$ ist, heißt einheitlich oder rein, wenn für sie M_2 .

$$\text{Erw}(\mathfrak{N}) \equiv \text{Erw}'(\mathfrak{N}) \equiv \text{Erw}''(\mathfrak{N})$$

nach sich zieht.

Daß jede streuungsfreie $\text{Erw}(\mathfrak{N})$ -Funktion rein ist, ist inhaltlich klar, und wir werden es bald beweisen. Unsere Frage lautet aber so: ist jede reine $\text{Erw}(\mathfrak{N})$ -Funktion streuungsfrei?

Es ist evident, daß jede $\text{Erw}(\mathfrak{N})$ -Funktion die folgenden Eigenschaften besitzen muß:

A. Wenn die Größe \mathfrak{N} identisch gleich 1 ist (d. h. wenn die „Meßvorschrift“ für \mathfrak{N} so lautet: man braucht gar nichts zu messen, denn \mathfrak{N} hat immer den Wert 1), so ist $\text{Erw}(\mathfrak{N}) = 1$.

B. Für jedes \mathfrak{N} und jede reelle Zahl a ist $\text{Erw}(a\mathfrak{N}) = a \text{Erw}(\mathfrak{N})$ ¹⁶³.

C. Wenn die Größe \mathfrak{M} ihrer Natur nach nie negativ ist, wenn sie z. B. Quadrat einer anderen Größe \mathfrak{C} ist¹⁶³, so ist auch $\text{Erw}(\mathfrak{M}) \geq 0$.

D. Wenn die Größen $\mathfrak{M}, \mathfrak{C}, \dots$ gleichzeitig meßbar sind, so ist $\text{Erw}(\mathfrak{M} + \mathfrak{C} + \dots) = \text{Erw}(\mathfrak{M}) + \text{Erw}(\mathfrak{C}) + \dots$ ¹⁶³. (Für nicht gleichzeitig meßbare $\mathfrak{M}, \mathfrak{C}, \dots$ ist $\mathfrak{M} + \mathfrak{C} + \dots$ undefiniert, vgl. w. o.)

All dies folgt ja unmittelbar aus den Definitionen der jeweils betrachteten Größen (d. h. ihrer Meßvorschriften), und der Definition des Erwartungswertes als arithmetisches Mittel aller Meßresultate an einer hinreichend großen statistischen Gesamtheit. Bei **D.** ist zu beachten, daß seine Richtigkeit auf demjenigen Satze der Wahrscheinlichkeitsrechnung beruht, demzufolge der Erwartungswert einer Summe stets die Summe der Erwartungswerte der einzelnen Addenden ist, unabhängig davon, ob zwischen diesen Wahrscheinlichkeitsabhängigkeiten bestehen oder nicht (im Gegensatze z. B. zum Produkt). Daß wir es nur für gleichzeitig meßbare $\mathfrak{M}, \mathfrak{C}, \dots$ formulierten, ist natürlich: sonst ist $\mathfrak{M} + \mathfrak{C} + \dots$ sinnlos.

In der Quantenmechanik gibt es aber noch eine andere, über das bisher Diskutierte hinausgehende Rechenoperation: nämlich das Addieren von zwei beliebigen, nicht notwendig gleichzeitig beobachtbaren Größen. Dieselbe beruht darauf, daß für zwei Hermitesche Operatoren R, S die Summe $R + S$ wieder ein Hermitescher Operator ist, auch dann, wenn R, S nicht vertauschbar sind, während z. B. das Produkt RS nur im Falle der Vertauschbarkeit wieder Hermitesch ausfällt (vgl. II. 5.). In jedem Zustande φ addieren sich die Erwartungswerte: $(R\varphi, \varphi) + (S\varphi, \varphi) = ((R + S)\varphi, \varphi)$ (vgl. **E**₂, III. 1.). Dasselbe gilt für mehrere Addenden. Diese Tatsache übernehmen wir nun in unseren allgemeinen (vorläufig noch gar nicht zur Quantenmechanik spezialisierten) Ansatz:

E. Sind $\mathfrak{M}, \mathfrak{C}, \dots$ beliebige Größen, so gibt es eine weitere Größe $\mathfrak{M} + \mathfrak{C} + \dots$ (die von der Wahl der $\text{Erw}(\mathfrak{M})$ -Funktion nicht abhängt), derart, daß $\text{Erw}(\mathfrak{M} + \mathfrak{C} + \dots) = \text{Erw}(\mathfrak{M}) + \text{Erw}(\mathfrak{C}) + \dots$ gilt.

Wenn $\mathfrak{M}, \mathfrak{C}, \dots$ gleichzeitig meßbar sind, muß dieses $\mathfrak{M} + \mathfrak{C} + \dots$ wegen **D.** die gewöhnliche Summe sein. Im allgemeinen ist es aber nur durch **E.** auf implizite Weise gekennzeichnet, und wir können die Meßvorschriften für $\mathfrak{M}, \mathfrak{C}, \dots$ kaum zu einer solchen von $\mathfrak{M} + \mathfrak{C} + \dots$ zusammensetzen¹⁶⁴.

Zu dem bisher Gesagten fügen wir noch hinzu: wir wollen nicht nur Erwartungswerte repräsentierende $\text{Erw}(\mathfrak{M})$ -Funktionen zulassen, sondern auch solche, die relativen Erwartungswerten entsprechen — d. h. wir lassen die normierende Bedingung **A.** fallen. Falls $\text{Erw}(1)$ (das wegen **C.** ≥ 0 ist) endlich und $\neq 0$ ausfällt, ist dies unwesentlich, denn für $\frac{\text{Erw}(\mathfrak{M})}{\text{Erw}(1)}$ ist dann alles beim alten. $\text{Erw}(1) = \infty$ entspricht aber einer wesentlich verschiedenen Möglichkeit, der zuliebe wir diese

Erweiterung vornahmen, und die am besten durch ein einfaches Beispiel veranschaulicht wird. Es gibt nämlich Fälle, wo es besser ist mit Relativwahrscheinlichkeiten an Stelle der richtigen zu operieren, insbesondere mit einer unendlichen Gesamtwahrscheinlichkeit [Erw (1) entspricht ja der Gesamtwahrscheinlichkeit]; ein solcher ist z. B. dieser: Das betrachtete System sei ein eindimensional bewegliches Partikel, und zwar sei seine statistische Verteilung derart, daß es auf einer unendlichen Geraden überall gleichwahrscheinlich liegt. Darin hat jedes endliche Intervall auf dieser Geraden die Wahrscheinlichkeit Null, die Gleichwahrscheinlichkeit aller Stellen wird aber nicht hierdurch ausgedrückt, sondern dadurch, daß zwei endliche Intervalle als Wahrscheinlichkeitsverhältnis den Quotienten ihrer Längen haben. Da $\frac{0}{0}$ sinnlos ist, kann dies nur dadurch erfaßt werden, daß wir ihre Längen als ihre Relativwahrscheinlichkeiten einführen — die Relativgesamtwahrscheinlichkeit wird dadurch freilich ∞ .

Unter Berücksichtigung des bisher Gesagten gewinnen wir die folgende, endgültige Form unserer Bedingungen (A' entspricht C , B' entspricht B , D , E):

A' . Wenn die Größe \mathfrak{N} ihrer Natur nach nie negativ ist, wenn sie z. B. das Quadrat einer anderen Größe \mathfrak{G} ist, so ist $\text{Erw}(\mathfrak{N}) \geq 0$.

B' . Sind $\mathfrak{N}, \mathfrak{G}, \dots$ beliebige Größen, und a, b, \dots reelle Zahlen, so ist $\text{Erw}(a\mathfrak{N} + b\mathfrak{G} + \dots) = a \text{Erw}(\mathfrak{N}) + b \text{Erw}(\mathfrak{G}) + \dots$.

Wir betonen noch:

1. Da wir relative Erwartungswerte betrachten, sind die Funktionen $\text{Erw}(\mathfrak{N})$ und $c \text{Erw}(\mathfrak{N})$ ($c > 0$ eine Konstante!) als nicht wesentlich verschieden anzusehen.

2. $\text{Erw}(\mathfrak{N}) \equiv 0$ (für alle \mathfrak{N}) liefert keine Aussagen, diese Funktion ist also auszuschließen.

3. Absolute, d. h. richtig normierte, Erwartungswerte liegen vor, wenn $\text{Erw}(1) = 1$ ist. $\text{Erw}(1)$ ist nach A' allenfalls ≥ 0 , solange es endlich und $\neq 0$ ist, führt **1.** mit $c = \frac{1}{\text{Erw}(1)}$ zur richtigen Normierung zurück. Für $\text{Erw}(1) = 0$ gilt, wie wir zeigen werden, **2.**, dieser Fall scheidet also aus; für $\text{Erw}(1) = \infty$ besteht eine wesentlich nichtnormierte (d. h. relative) Statistik.

Es bleibt noch übrig, auf unsere Definitionen α , β) zurückzukommen. M_2 kann, im Hinblick auf **1.**, durch die folgende einfachere Bedingung ersetzt werden:

$$M_3. \quad \text{Erw}(\mathfrak{N}) \equiv \text{Erw}'(\mathfrak{N}) + \text{Erw}''(\mathfrak{N}).$$

Und bei Str_1 ist zu beachten, daß die dortige Rechnung $\text{Erw}(1) = 1$ voraussetzte. Für $\text{Erw}(1) = \infty$ ist die Streuungslosigkeit gar nicht zu definieren, da sie $\text{Erw}((\mathfrak{N} - \varrho)^2) = 0$ besagt, wo ϱ der absolute Er-

wartungswert von \mathfrak{R} ist, d. h. $\frac{\text{Erw}(\mathfrak{R})}{\text{Erw}(1)}$, das hier u. U. $\frac{\infty}{\infty}$, also sinnlos ist¹⁶⁵. Also lauten α), β) nunmehr so:

α') Eine \mathfrak{R} -Funktion, die ein $\text{Erw}(\mathfrak{R})$ ist, heißt streuungslos, wenn $\text{Erw}(1) \neq 0$ und endlich ist, so daß wir nach 1. $\text{Erw}(1) = 1$ annehmen können, dann ist Str_1 charakteristisch.

β') Eine \mathfrak{R} -Funktion, die ein $\text{Erw}(\mathfrak{R})$ ist, heißt einheitlich oder rein, wenn für sie M_3 .

$$\text{Erw}'(\mathfrak{R}) = c' \text{Erw}(\mathfrak{R}), \quad \text{Erw}''(\mathfrak{R}) = c'' \text{Erw}(\mathfrak{R})$$

(c' , c'' Konstanten, natürlich $c' + c'' = 1$, und wegen A' und 1., 2. $c' > 0$, $c'' > 0$) zur Folge hat.

Auf Grund von A' ., B' ., und α'), β') sind wir nun in der Lage, über die Frage der Kausalität zwingend entscheiden zu können, sobald wir die physikalischen Größen $\mathfrak{R}, \mathfrak{S}, \dots$ in S , sowie die zwischen ihnen bestehenden funktionellen Verknüpfungen kennen. Dies soll im folgenden Paragraphen für die Verhältnisse der Quantenmechanik erfolgen.

Zum Abschluß dieses Paragraphen seien noch zwei Bemerkungen beigefügt.

Erstens eine, die den Fall $\text{Erw}(1) = 0$ betrifft. Dann folgt aus B' . $\text{Erw}(c) = 0$, also wenn eine Größe \mathfrak{R} stets $\geq c'$, $\leq c''$ ist, nach A' . $\text{Erw}(c'' - \mathfrak{R}) \geq 0$, $\text{Erw}(\mathfrak{R} - c') \geq 0$, also nach B' . $\text{Erw}(c') \leq \text{Erw}(\mathfrak{R}) \leq \text{Erw}(c'')$, d. h. $\text{Erw}(\mathfrak{R}) = 0$. Sei nun \mathfrak{R} beliebig, $f_1(x), f_2(x), \dots$ eine beschränkte Funktionenfolge mit

$$f_1(x) + f_2(x) + \dots = x$$

$$\text{(z. B. } f_1(x) = \frac{\sin x}{x}, f_n(x) = \frac{\sin nx}{nx} - \frac{\sin(n-1)x}{(n-1)x} \text{ für } n = 2, 3, \dots).$$

Dann ist $\text{Erw}(f_n(\mathfrak{R})) = 0$ für $n = 1, 2, \dots$, also nach B' ., auch $\text{Erw}(\mathfrak{R})$. Somit ist, der früher aufgestellten Behauptung gemäß, $\text{Erw}(1) = 0$ nach 2. auszuschließen.

Zweitens ist es auffallend, daß nach Str_1 . für die Streuungslosigkeit $\text{Erw}(\mathfrak{R}^2) = [\text{Erw}(\mathfrak{R})]^2$ charakteristisch ist — obwohl in diesem Falle, da hier $\text{Erw}(\mathfrak{R})$ einfach der Wert von \mathfrak{R} ist, und $\text{Erw}(f(\mathfrak{R}))$ der Wert von $f(\mathfrak{R})$, für jede Funktion $f(x)$

$$(\text{Str}_2.) \quad \text{Erw}(f(\mathfrak{R})) = f(\text{Erw}(\mathfrak{R}))$$

gelten muß. Str_1 . ist ein Spezialfall von Str_2 .: $f(x) = x^2$, wie kommt es, daß dieser ausreicht? Die Antwort lautet: wenn Str_2 . für $f(x) = x^2$ gilt, gilt es von selbst für alle $f(x)$. Man hätte sogar an Stelle von x^2 irgendeine andere stetige und konvexe Funktion von x [d. h. eine,

für die für alle $x \neq y$ $f\left(\frac{x+y}{2}\right) < \frac{f(x)+f(y)}{2}$ gilt] setzen können.

Wir gehen auf den Beweis nicht ein.

2. Beweis der statistischen Formeln.

Den physikalischen Größen eines quantenmechanischen Systems sind, wie wir wissen, die hypermaximalen Hermiteschen Operatoren eindeutig zugeordnet (vgl. z. B. die Diskussion in III. 5.), und es ist zweckmäßig anzunehmen, daß diese Zuordnung eine ein-eindeutige ist — d. h. daß wirklich jeder hypermaximale Hermitesche Operator einer physikalischen Größe entspricht. (In III. 3. machten wir hiervon gelegentlich auch Gebrauch.) Dabei gelten die folgenden Gesetzmäßigkeiten (vgl. F ., L . in III. 5. sowie das am Ende von IV. 1. Gesagte):

I. Wenn die Größe \mathfrak{R} den Operator R hat, so hat die Größe $f(\mathfrak{R})$ den Operator $f(R)$.

II. Wenn die Größen $\mathfrak{R}, \mathfrak{S}, \dots$ die Operatoren R, S, \dots haben, so hat die Größe $\mathfrak{R} + \mathfrak{S} + \dots$ den Operator $R + S + \dots$. (Die gleichzeitige Meßbarkeit von $\mathfrak{R}, \mathfrak{S}, \dots$ wird nicht vorausgesetzt, vgl. das hierüber a. a. O. Gesagte.)

A' ., B' ., α'), β') und **I.**, **II.** bilden den mathematischen Ausgangspunkt unserer Analyse.

Sei $\varphi_1, \varphi_2, \dots$ ein vollständiges normiertes Orthogonalsystem, an Stelle jedes Operators R betrachten wir die Matrix $a_{\mu\nu} = (R\varphi_\mu, \varphi_\nu)$. Wir bilden noch die Hermiteschen Operatoren mit den bzw. Matrizen

$$e_{\mu\nu}^{(n)} = \begin{cases} 1, & \text{für } \mu = \nu = n \\ 0, & \text{sonst} \end{cases},$$

$$f_{\mu\nu}^{(m,n)} = \begin{cases} 1, & \text{für } \mu = m, \nu = n \\ 1, & \text{für } \mu = n, \nu = m \\ 0, & \text{sonst} \end{cases}, \quad g_{\mu\nu}^{(m,n)} = \begin{cases} i, & \text{für } \mu = m, \nu = n \\ -i, & \text{für } \mu = n, \nu = m \\ 0, & \text{sonst} \end{cases};$$

diese Operatoren sind übrigens $P_{[\varphi_n]}$, $P_{\left[\frac{\varphi_m + \varphi_n}{\sqrt{2}}\right]}$ — $P_{\left[\frac{\varphi_m - \varphi_n}{\sqrt{2}}\right]}$, $P_{\left[\frac{\varphi_m + i\varphi_n}{\sqrt{2}}\right]}$ — $P_{\left[\frac{\varphi_m - i\varphi_n}{\sqrt{2}}\right]}$, die entsprechenden Größen seien $\mathfrak{U}^{(n)}$, $\mathfrak{B}^{(m,n)}$, $\mathfrak{B}^{(m,n)}$. Offenbar ist (wegen $a_{nm} = \bar{a}_{mn}$)

$$a_{\mu\nu} = \sum_n a_{nn} e_{\mu\nu}^{(n)} + \sum_{m < n} \operatorname{Re} a_{mn} f_{\mu\nu}^{(m,n)} + \sum_{m < n} \operatorname{Im} a_{mn} g_{\mu\nu}^{(m,n)},$$

also

$$\mathfrak{R} = \sum_n a_{nn} \mathfrak{U}^{(n)} + \sum_{m < n} \operatorname{Re} a_{mn} \mathfrak{B}^{(m,n)} + \sum_{m < n} \operatorname{Im} a_{mn} \mathfrak{B}^{(m,n)},$$

und wegen **II.** und **B'**.

$$\begin{aligned} \operatorname{Erw}(\mathfrak{R}) &= \sum_n a_{nn} \operatorname{Erw}(\mathfrak{U}^{(n)}) + \sum_{m < n} \operatorname{Re} a_{mn} \operatorname{Erw}(\mathfrak{B}^{(m,n)}) \\ &\quad + \sum_{m < n} \operatorname{Im} a_{mn} \operatorname{Erw}(\mathfrak{B}^{(m,n)}), \end{aligned}$$

also wenn wir

$$\left. \begin{aligned} u_{nn} &= \text{Erw}(\mathfrak{U}^{(n)}), \\ u_{mn} &= \frac{1}{2} \text{Erw}(\mathfrak{B}^{(mn)}) + \frac{i}{2} \text{Erw}(\mathfrak{B}^{(m,n)}), \\ u_{nm} &= \frac{1}{2} \text{Erw}(\mathfrak{B}^{(mn)}) - \frac{i}{2} \text{Erw}(\mathfrak{B}^{(m,n)}), \end{aligned} \right\} (m < n)$$

setzen,

$$\text{Erw}(\mathfrak{R}) = \sum_{m,n} u_{nm} a_{mn}.$$

Da $u_{nm} = \overline{u_{mn}}$ ist, können wir einen Hermiteschen Operator U durch $(U\varphi_m, \varphi_n) = u_{mn}$ definieren¹⁶⁶, und die rechte Seite ist Spur (UR) (vgl. II. 11.). Also lautet die endgültige Formel:

$$(\mathbf{Sp.}) \quad \text{Erw}(\mathfrak{R}) = \text{Spur}(UR),$$

U ist ein von R unabhängiger Hermitescher Operator¹⁶⁷, also durch die Gesamtheit selbst bestimmt.

Mit Hinblick auf II. erfüllt **Sp. B'** für jede Wahl von U , wir haben also nur noch festzustellen, welche Beschränkung **A'** für U bedeutet.

Wenn $\|\varphi\| = 1$, aber φ sonst beliebig ist, so gilt für die zu P_φ gehörige Größe \mathfrak{R} wegen $P_\varphi^2 = P_\varphi$ und I. $\mathfrak{R}^2 = \mathfrak{R}$, also nach **A'**. $\text{Erw}(\mathfrak{R}) \geq 0$. Somit ist $\text{Spur}(UP_{[\varphi]}) = (U\varphi, \varphi) \geq 0$. Wenn f beliebig ist, so ist für $f \neq 0$ $\varphi = \frac{\mathfrak{R}}{\|\mathfrak{R}\|} \cdot f$ wählbar, und dann $(U\varphi, \varphi) = \frac{1}{\|\mathfrak{R}\|^2} (Uf, f)$, also wieder $(Uf, f) \geq 0$; für $f = 0$ gilt dies ohnehin. Somit ist U definit. Die Definität von U , die somit aus **A'** folgt, ist aber für die Gültigkeit von **A'** auch hinreichend.

A' sagt aus, daß jeder $\text{Erw}(\mathfrak{E}^2) \geq 0$ sein soll, und nicht mehr: denn wenn \mathfrak{R} nur nichtnegativer Werte fähig ist, so ist für $f(x) = |x|$ $f(\mathfrak{R}) = \mathfrak{R}$, und da für $g(x) = \sqrt{|x|}$ identisch $(g(x))^2 = f(x)$ gilt, $(g(\mathfrak{R}))^2 = f(\mathfrak{R})$, also $\mathfrak{R} = \mathfrak{E}^2$ mit $\mathfrak{E} = g(\mathfrak{R})$ ¹⁶⁸. Wenn S der Operator von \mathfrak{E} ist, so soll also $\text{Spur}(US^2) \geq 0$ sein. Nun ist S^2 definit

$$((S^2f, f) = (Sf, Sf) \geq 0),$$

also handelt es sich, wenn wir statt U, S^2 A, B schreiben, um den Beweis dieses Satzes: sind A, B Hermitesch und definit, so ist $\text{Spur}(AB) \geq 0$. Dies haben wir aber in II. 11. unter Verwendung eines allgemeinen Satzes über definite Operatoren (vgl. Anm. ¹¹⁴) bewiesen¹⁶⁹.

Damit haben wir die Funktionen $\text{Erw}(\mathfrak{R})$ vollständig angegeben: sie entsprechen den definiten Hermiteschen Operatoren U , und der Zusammenhang wird durch **Sp.** angegeben. U soll der statistische Operator der betreffenden Gesamtheit heißen.

Die Bemerkungen **1., 2., 3.** aus IV. 1. sind nun leicht zu diskutieren. Es ergibt sich entsprechend:

1. Vom Standpunkte der relativen Wahrscheinlichkeiten und Erwartungswerte sind U und cU nicht wesentlich voneinander verschieden ($c > 0$ eine Konstante).

2. $U = 0$ liefert keinerlei Aussagen, und ist daher auszuschließen.

3. Absolute (d. h. richtig normierte) Wahrscheinlichkeiten und Erwartungswerte erhalten wir, wenn Spur $U = 1$ ist. Solange Spur U endlich ist, können wir U durch Multiplizieren mit $c = \frac{1}{\text{Spur } U}$ nach 1. normieren. (Wegen der Definitivität von U ist Spur $U \geq 0$, es ist aber sogar Spur $U > 0$, denn aus Spur $U = 0$ folgt, wie am Ende von IV. 1. allgemein gezeigt wurde, aber für unseren Fall auch aus II. 11. hervorgeht, $U = 0$, d. h. der nach 2. ausgeschlossene Fall.) Erst bei unendlicher Spur U haben wir wesentlich relative Wahrscheinlichkeiten und Erwartungswerte.

Schließlich haben wir α), β) aus IV. 1. zu untersuchen, d. h. unter den U die streuungsfreien und die einheitlichen aufzufinden.

Zunächst die streuungslosen. Wir haben dann U als richtig normiert anzunehmen (vgl. IV. 1.), und es müßte stets $\text{Erw}(\mathfrak{R}^2) = [\text{Erw}(\mathfrak{R})]^2$ sein, d. h. Spur $(UR^2) = [\text{Spur}(UR)]^2$. Für $R = P_{[\varphi]}$ ist $R^2 = R = P_{[\varphi]}$, Spur $(UP_{[\varphi]}) = (U\varphi, \varphi)$, also sollte $(U\varphi, \varphi) = (U\varphi, \varphi)^2$ sein, d. h. $(U\varphi, \varphi) = 0$ oder 1. Ist $\|\varphi'\| = 1$, $\|\varphi''\| = 1$, so können wir φ stetig variieren, so daß es mit φ' beginnt, am Ende φ'' ist, und stets $\|\varphi\| = 1$ gilt¹⁷⁰; dabei variiert auch $(U\varphi, \varphi)$ stetig, und da es nur 0 oder 1 sein kann, ist es konstant — also ist $(U\varphi', \varphi') = (U\varphi'', \varphi'')$. Somit ist $(U\varphi, \varphi)$ stets = 0 oder stets = 1, woraus man sofort $U = 0$ oder $U = 1$ folgert. $U = 0$ scheidet wegen 2. aus, $U = 1$ ist unnormierbar (Spur 1 = Dimensionszahl des Raumes = ∞), und wie man leicht auch direkt einsehen kann, nicht streuungsfrei. Somit gibt es keine streuungsfreien Gesamtheiten.

Gehen wir nun zu den einheitlichen über. Nach β) und S . ist U einheitlich, wenn aus

$$U = V + W$$

(V, W , wie U , definit und Hermitesch) $V = c'U, W = c''U$ folgt¹⁷¹. Wir behaupten: diese Eigenschaft kommt den $U = P_{[\varphi]}$ ($\|\varphi\| = 1$) zu, und nur diesen.

Habe zunächst U die genannte Eigenschaft. Wegen $U \neq 0$ gibt es ein f_0 mit $Uf_0 \neq 0$, daher ist $f_0 \neq 0$, und somit $(Uf_0, f_0) > 0$ (vgl. II. 5., Satz 19.). Wir bilden die zwei Hermiteschen Operatoren

$$Vf = \frac{(f, Uf_0)}{(Uf_0, f_0)} \cdot Uf_0, \quad Wf = Uf - \frac{(f, Uf_0)}{(Uf_0, f_0)} \cdot Uf_0.$$

dann ist

$$(Vf, f) = \frac{|(f, Uf_0)|^2}{(Uf_0, f_0)} \geq 0, \quad (Wf, f) = \frac{(Uf, f)(Uf_0, f_0) - |(f, Uf_0)|^2}{(Uf_0, f_0)} \geq 0$$

(vgl. II. 5., Satz 19.), d. h. V, W definit, ferner ist offenbar $U = V + W$.

Daher ist $V = c'U$, und wegen $Vf_0 = Uf_0 \neq 0$ ist $c' = 1$, d. h. $U = V$. Setzen wir nun $\varphi = \frac{1}{\|Uf_0\|} \cdot Uf_0$ ($\|\varphi\| = 1$), und $c = \frac{\|Uf_0\|^2}{(Uf_0, f_0)}$ ($c > 0$),

so ist $Uf = Vf = c(f, \varphi)\varphi = cP_{[\varphi]}f$, d. h. $U = cP_{[\varphi]}$, d. h. nach **1.** U im wesentlichen $P_{[\varphi]}$.

Sei jetzt umgekehrt $U = P_{[\varphi]}$ ($\|\varphi\| = 1$). Wenn $U = V + W$ ist, V, W definit, so folgern wir so. Aus $Uf = 0$ folgt

$$0 \leq (Vf, f) \leq (Vf, f) + (Wf, f) = (Uf, f) = 0, \quad (Vf, f) = 0,$$

also $Vf = 0$ (vgl. a. a. O.). Aus $(f, \varphi) = 0$ folgt aber $Uf = P_{[\varphi]}f = 0$, also auch $Vf = 0$; und daher für jedes g $(f, Vg) = (Vf, g) = 0$. D. h.: alles was zu φ orthogonal ist, ist es auch zu Vg , somit ist $Vg = c_g \cdot \varphi$ (c_g eine von g abhängige Zahl), wir benützen aber nur den Fall $g = \varphi$, d. h. $V\varphi = c' \cdot \varphi$. Jedes f hat die Form $(f, \varphi) \cdot \varphi + f'$, wo f' zu φ orthogonal ist, also ist

$$Vf = (f, \varphi) \cdot V\varphi + Vf' = (f, \varphi) \cdot c' \varphi = c' P_{[\varphi]}f = c' Uf.$$

Somit ist $V = c'U$, $W = U - V = (1 - c')U$, womit alles bewiesen ist.

Die einheitlichen Gesamtheiten entsprechen somit den $U = P_{[\varphi]}$, $\|\varphi\| = 1$, und zwar wird dann auch **Sp.** die Formel **E₂**. von III. 1.:

$$(E_2.) \quad \text{Erw}(\mathfrak{R}) = \text{Spur}(P_{[\varphi]}R) = (R\varphi, \varphi).$$

Man beachte, daß $\text{Erw}(1) = \text{Spur}(P_{[\varphi]}) = 1$ ist (weil $P_{[\varphi]}$ zum ein-dimensionalen $[\varphi]$ gehört, oder nach **E₂**), d. h. die vorliegende Form von U ist richtig normiert. Schließlich ermitteln wir noch, wann $P_{[\varphi]}$ und $P_{[\psi]}$ dieselbe Statistik haben, d. h. wann $P_{[\varphi]} = cP_{[\psi]}$ ist ($c > 0$ konstant, vgl. **1.**). Wegen $\text{Spur}(P_{[\varphi]}) = \text{Spur}(P_{[\psi]}) = 1$ ist dann $c = 1$, also $P_{[\varphi]} = P_{[\psi]}$, $[\varphi] = [\psi]$, also $\varphi = a\psi$, und aus $\|\varphi\| = \|\psi\| = 1$ folgt für die Konstante a $|a| = 1$; dies ist offenbar auch hinreichend.

Zusammenfassend können wir also sagen: Streuungslose Gesamtheiten gibt es nicht. Einheitliche gibt es, und zwar entsprechen sie den $U = P_{[\varphi]}$, $\|\varphi\| = 1$, und nur diesen. Für diese U geht **Sp.** in **E₂**. über; die Normierung ist richtig, und U ändert sich nicht, wenn φ durch ein $a\varphi$ (a konstant, $|a| = 1$) ersetzt wird, bei jeder anderen Änderung von φ ändert es sich aber wesentlich (vgl. **1.**). Die einheitlichen Gesamtheiten entsprechen also den Zuständen der Quantenmechanik, so wie diese früher gekennzeichnet wurden: durch ein φ des Hilbertschen Raumes, mit $\|\varphi\| = 1$, wobei ein konstanter Faktor vom Absolutwert 1 bedeutungslos ist (vgl. z. B. III. 2.), und statistische Aussagen durch **E₂**. gemacht werden¹⁷².

All das haben wir aus den rein qualitativen Bedingungen **A'**, **B'**, **a**), **β**), **I.**, **II.** hergeleitet.

Damit ist im Rahmen unserer Bedingungen die Entscheidung gefallen, und zwar gegen die Kausalität: denn alle Gesamtheiten streuen, auch die einheitlichen.

Es wäre noch die in III. 2. aufgeworfene Frage der „verborgenen Parameter“ zu diskutieren, d. h. die Frage, ob die Streuungen der

durch die Wellenfunktionen φ (d. h. durch E_2) gekennzeichneten einheitlichen Gesamtheiten nicht daher rühren, daß diese nicht die wahren Zustände sind, sondern nur Gemische mehrerer Zustände — während zur Kennzeichnung des wirklichen Zustandes neben der Angabe der Wellenfunktion φ noch weitere Angaben nötig wären (das sind die „verborgenen Parameter“), die zusammen alles kausal bestimmen, d. h. zu streuungsfreien Gesamtheiten führen. Die Statistik der einheitlichen Gesamtheit ($U = P_{[\varphi]}, \|\varphi\| = 1$) entstünde dann durch Mittelung über alle wirklichen Zustände, aus denen sie aufgebaut ist; d. h. durch Mittelung über jenen Wertbereich der „verborgenen Parameter“, der in jenen Zuständen verwirklicht ist. Dies ist aber aus zwei Gründen unmöglich: Erstens, weil dann die betreffende einheitliche Gesamtheit als Gemisch zweier verschiedener Gesamtheiten dargestellt werden könnte¹⁷³, entgegen ihrer Definition. Zweitens, weil die streuungsfreien Gesamtheiten, die den „wirklichen“ Zuständen entsprechen müßten (d. h. die aus lauter Systemen im selben „wirklichen“ Zustande bestehen), gar nicht existieren. Man beachte, daß wir hier gar nicht näher auf die Einzelheiten des Mechanismus der „verborgenen Parameter“ eingehen mußten: die sichergestellten Resultate der Quantenmechanik können mit ihrer Hilfe keinesfalls wiedergewonnen werden, ja es ist sogar ausgeschlossen, daß dieselben physikalischen Größen mit denselben Verknüpfungen vorhanden sind (d. i. daß **I.**, **II.** gelten), wenn neben der Wellenfunktion noch andere Bestimmungsstücke („verborgene Parameter“) existieren sollen.

Es würde nicht genügen, wenn außer den bekannten, in der Quantenmechanik durch Operatoren repräsentierten, physikalischen Größen noch weitere, bisher unentdeckte, existierten: denn schon bei den erstgenannten, bekannten Größen müßten die von der Quantenmechanik angenommenen Verknüpfungen (d. i. **I.**, **II.**) versagen. Es handelt sich also gar nicht, wie vielfach angenommen wird, um eine Interpretationsfrage der Quantenmechanik, vielmehr müßte dieselbe objektiv falsch sein, damit ein anderes Verhalten der Elementarprozesse als das statistische möglich wird.

Der folgende Umstand ist noch erwähnenswert: Die Unbestimmtheitsrelationen haben auf den ersten Blick eine gewisse Ähnlichkeit mit den Grundpostulaten der Relativitätstheorie. Dort wird nämlich behauptet: es ist prinzipiell unmöglich, die Gleichzeitigkeit zweier, in Punkten von der Entfernung r eintretender, Ereignisse, genauer als bis auf ein Zeitintervall von der Länge $\frac{r}{c}$ ($c =$ Lichtgeschwindigkeit) festzustellen; während die Unbestimmtheitsrelationen dies aussagen: es ist prinzipiell unmöglich, die Lage eines materiellen Punktes im Phasenraume genauer als bis auf ein Gebiet vom Volum $\left(\frac{h}{4\pi}\right)^3$ an-

zugeben¹⁷⁴. Trotzdem besteht ein fundamentaler Unterschied. Die Relativitätstheorie leugnet wohl die Möglichkeit einer objektiven genauen Gleichzeitigkeitsmessung, trotzdem aber ist es möglich, durch Einführung eines Galileischen Bezugssystems ein Koordinatensystem in die Welt zu legen, welches eine Gleichzeitigkeitsdefinition ermöglicht, die mit unseren normalen diesbezüglichen Begriffen in hinreichender Übereinstimmung ist. Ein objektiver Sinn wird dieser Gleichzeitigkeitsdefinition nur darum nicht zugebilligt, weil dieses Koordinatensystem auf unendlich viele verschiedene Weisen gewählt werden kann, wodurch unendlich viele verschiedene Gleichzeitigkeitsdefinitionen entstehen, die alle gleich gut sind. D. h.: hinter der Unmöglichkeit der Messung findet man eine unendliche Vieldeutigkeit für mögliche theoretische Definitionen. Anders in der Quantenmechanik: dort ist es überhaupt nicht möglich, ein System mit der Wellenfunktion φ durch Punkte des Phasenraumes zu beschreiben, auch dann nicht, wenn man neue (hypothetische, unbeobachtete) Koordinaten, die „verborgenen Parameter“, einführt — da dies zu streuungsfreien Gesamtheiten führen würde. D. h.: nicht nur die Messung ist unmöglich, sondern auch jede vernünftige (d. h. wenngleich, wie in der Relativitätstheorie, empirisch unbeweisbare, so doch wenigstens auch empirisch unwiderlegbare) theoretische Definition. Die prinzipielle Unmöglichkeit des Messens rührt also daher, daß es das eine Mal unendlich viele, das andere Mal überhaupt keine definitorische Festlegung der fraglichen Begriffe gibt, die der unmittelbaren Erfahrung (bzw. den allgemeinen Grundannahmen der Theorie) nicht widerspricht.

Zusammenfassend kann also die Lage der Kausalität in der heutigen Physik so gekennzeichnet werden: Im Makroskopischen gibt es keine Erfahrung, die sie stützt, und es kann auch keine geben, denn die scheinbare kausale Ordnung der Welt im großen (d. h. für mit freiem Auge wahrnehmbare Objekte) hat gewiß keine andere Ursache, als das „Gesetz der großen Zahlen“ — ganz unabhängig davon, ob die die Elementarprozesse regelnden (d. h. die wirklichen) Naturgesetze kausal sind oder nicht¹⁷⁵. Daß sich makroskopisch gleiche Objekte makroskopisch gleich verhalten, hat wenig mit der Kausalität zu tun: sie sind ja gar nicht gleich, da diejenigen Koordinaten, die die Zustände ihrer Atome genau festlegen, beinahe nie übereinstimmen, und die makroskopische Betrachtungsweise mittelt über diese Koordinaten (hier sind es „verborgene Parameter“) — jedoch ist deren Anzahl sehr groß (bei 1 g Materie ca. 10^{25}), und daher hat die Mittelung nach bekannten Sätzen der Wahrscheinlichkeitsrechnung eine weitgehende Verminderung aller Streuungen zur Folge. (Natürlich nur im allgemeinen, in besonderen Fällen — z. B. Brownsche Bewegung, instabile Zustände u. ä. — versagt diese scheinbare makroskopische Kausalität.) Erst im Atomaren, bei den Elementarprozessen selbst, könnte die Frage der

Kausalität wirklich nachgeprüft werden, hier spricht aber beim heutigen Stande unserer Kenntnisse alles dagegen: denn die einzige zur Zeit vorhandene formale Theorie, die unsere Erfahrungen in halbwegs befriedigender Weise ordnet und zusammenfaßt, das ist die Quantenmechanik, steht mit ihr in zwingendem logischen Widerspruch. Es wäre freilich eine Übertreibung, zu behaupten, daß die Kausalität damit abgetan ist: die Quantenmechanik ist in ihrer heutigen Form gewiß lückenhaft, und es mag sogar sein, daß sie falsch ist, wenngleich dies letztere angesichts ihrer verblüffenden Leistungsfähigkeit beim Verständnis allgemeiner und der Berechnung spezieller Probleme recht unwahrscheinlich ist. Trotzdem die Quantenmechanik mit der Erfahrung glänzend übereinstimmt, und uns die Einsicht in eine qualitativ neue Seite der Welt eröffnet hat, kann man doch niemals von einer Theorie sagen, sie sei durch die Erfahrung bewiesen, sondern nur, daß sie die beste bekannte Zusammenfassung derselben ist. Aber bei Beachtung aller dieser Kautelen dürfen wir doch sagen: es gibt gegenwärtig keinen Anlaß und keine Entschuldigung dafür, von der Kausalität in der Natur zu reden — denn keine Erfahrung stützt ihr Vorhandensein, da die makroskopischen dazu prinzipiell ungeeignet sind, und die einzige bekannte Theorie, die mit unseren Erfahrungen über die Elementarprozesse verträglich ist, die Quantenmechanik, widerspricht ihr.

Es handelt sich freilich um eine alteingewurzelte Betrachtungsweise aller Menschen, aber keineswegs um eine Denknöwendigkeit (das hat u. a. die Tatsache gezeigt, daß die statistische Theorie überhaupt aufgestellt werden konnte), und wer ohne vorgefaßte Meinungen an den Gegenstand herantritt, hat keinen Grund an ihr festzuhalten. Ist es unter solchen Umständen motiviert, ihr eine vernünftige physikalische Theorie zu opfern?

3. Folgerungen aus Experimenten.

Der letzte Paragraph hat uns gelehrt, daß die allgemeinste statistische Gesamtheit, die mit unseren qualitativen Grundannahmen verträglich ist, nach dem Gesetz **Sp.** durch einen definiten Operator U gekennzeichnet wird. Diejenigen besonderen Gesamtheiten, die wir als einheitliche bezeichnet hatten, waren durch $U = P_{[\varphi]} (||\varphi|| = 1)$ gekennzeichnet, da diese die wirklichen (nicht mehr weiter zerlegbaren) Zustände des Systems S sind, nennen wir sie auch Zustände (und zwar $U = P_{[\varphi]}$ den Zustand φ).

Wenn U ein reines Punktspektrum hat, etwa mit den Eigenwerten w_1, w_2, \dots und den Eigenfunktionen $\varphi_1, \varphi_2, \dots$ (die ein vollständiges normiertes Orthogonalsystem bilden), so ist (vgl. II. 8.)

$$U = \sum^n w_n P_{[\varphi_n]},$$

wegen der Definität von U sind alle $w_n \geq 0$ [es ist ja $U\varphi_n = w_n\varphi_n$, also $(U\varphi_n, \varphi_n) = w_n$, also dieses ≥ 0], und es ist $\sum^n w_n = \sum^n (U\varphi_n, \varphi_n) = \text{Spur } U$ (vgl. auch den Anfang von IV. 1.), d. h. $\sum^n w_n = 1$ wenn U richtig normiert ist. Nach dem am Anfang von IV. 1. Gesagten kann somit U als Gemisch der Zustände $\varphi_1, \varphi_2, \dots$ aufgefaßt werden, mit den bzw. relativen Gewichten w_1, w_2, \dots — wenn U richtig normiert ist, sind diese Gewichte sogar absolut richtig.

Ein richtig normiertes U , d. h. $\text{Spur } U = 1$, ist aber nach II. 11. (vgl. insbesondere Anm. ¹¹⁵) vollstetig, und hat darum ein reines Punktspektrum, dasselbe gilt natürlich auch, wenn $\text{Spur } U$ endlich ist. (Unendliches $\text{Spur } U$ kann als ein Grenzfall angesehen werden, worauf hier nicht näher eingegangen werde.) Im eigentlich interessanten Falle ist also die betrachtete Gesamtheit als ein Gemisch von Zuständen darstellbar, die wir übrigens paarweise orthogonal gewählt haben. Wir wollen darum die allgemeinen Gesamtheiten (im Gegensatz zu den einheitlichen, den Zuständen), Gemische nennen.

Wenn alle Eigenwerte von U einfach sind, d. h. die w_1, w_2, \dots voneinander verschieden, so sind, wie wir wissen, die $\varphi_1, \varphi_2, \dots$ bis auf konstante Faktoren vom Absolutwerte 1 eindeutig festgelegt, die entsprechenden Zustände (und die $P_{[\varphi_1]}, P_{[\varphi_2]}, \dots$) also vollkommen. Ebenso sind die Gewichte w_1, w_2, \dots eindeutig festgelegt — natürlich abgesehen von der Reihenfolge. In diesem Falle kann man also eindeutig angeben, aus welchen (paarweise orthogonalen) Zuständen das Gemisch U aufgebaut ist. Wesentlich anders ist es aber, wenn U auch mehrfache Eigenwerte („Entartungen“) hat. In II. 8. wurde genau diskutiert, wie die $\varphi_1, \varphi_2, \dots$ gewählt werden können: es geht auf unendlich viele, wesentlich verschiedene Weisen (während die w_1, w_2, \dots auch dann noch eindeutig festgelegt sind). Man muß die voneinander verschiedenen unter den w_1, w_2, \dots hinschreiben: w', w'', \dots , für jedes die abgeschlossene Linearmannigfaltigkeit seiner Eigenfunktionen (d. h. der Lösungen von $Uf = wf$) angeben, $\mathfrak{M}_{w'}, \mathfrak{M}_{w''}, \dots$, und dann so vorgehen: man wähle aus jedem $\mathfrak{M}_{w'}, \mathfrak{M}_{w''}, \dots$ ein dasselbe aufspannendes normiertes Orthogonalsystem χ'_1, χ'_2, \dots bzw. $\chi''_1, \chi''_2, \dots$, bzw. ... nach Belieben aus — die $\chi'_1, \chi'_2, \dots, \chi''_1, \chi''_2, \dots, \dots$ sind dann die $\varphi_1, \varphi_2, \dots$, die entsprechenden Eigenwerte $w', w'', \dots, w'', w''', \dots, \dots$ die w_1, w_2, \dots . Sobald ein \mathfrak{M}_w mehr als eine Dimension hat, d. h. ein mehrfacher Eigenwert existiert, sind die dazugehörigen χ_1, χ_2, \dots nicht mehr bis auf konstante Faktoren vom Absolutwerte 1 festgelegt (χ_1 z. B. kann jedes normierte Element von \mathfrak{M}_w sein) — d. h. ihre Zustände auch mehrdeutig!

Diese Erscheinung läßt sich auch so formulieren: wenn die Zustände χ_1, χ_2, \dots paarweise orthogonal sind (d. h. χ_1, χ_2, \dots ein normiertes Orthogonalsystem bilden, das sowohl endlich als auch unendlich sein darf), und wir sie derart mischen, daß allen dasselbe Ge-

wicht zukommt (etwa die relativen Gewichte $1:1:\dots$), so hängt das so entstehende Gemisch nur von der abgeschlossenen Linearmannigfaltigkeit \mathfrak{M} ab, die die χ_1, χ_2, \dots aufspannen. In der Tat ist

$$U = P_{[\chi_1]} + P_{[\chi_2]} + \dots = P_{\mathfrak{M}}.$$

Wenn die Zahl der χ_1, χ_2, \dots endlich ist, etwa $s: \chi_1, \dots, \chi_s$, so läßt sich dieses U auch als ein Gemisch aller normierten Elemente von \mathfrak{M} , d. h. aller Zustände aus \mathfrak{M} auffassen. Dies sind die

$$\chi = x_1 \chi_1 + \dots + x_s \chi_s, \quad |x_1|^2 + \dots + |x_s|^2 = 1.$$

Tatsächlich ist, wenn wir $x_1 = u_1 + i v_1, \dots, x_s = u_s + i v_s$ setzen, die $|x_1|^2 + \dots + |x_s|^2 = 1$ entsprechende $2s - 1$ -dimensionale Einheitskugeloberfläche $u_1^2 + v_1^2 + \dots + u_s^2 + v_s^2 = 1$ K nennen, und ihr Oberflächenelement $d\sigma$, für

$$U' = \iint_K \dots \iint P_{[\chi]} d\sigma,$$

$$\begin{aligned} (U' f, g) &= \iint_K \dots \iint (P_{[\chi]} f, g) d\sigma = \iint_K \dots \iint (f, \chi) \overline{(g, \chi)} d\sigma \\ &= \iint_K \dots \iint (f, \sum_1^s (u_\mu + i v_\mu) \chi_\mu) (g, \sum_1^s (u_\mu + i v_\mu) \chi_\mu) d\sigma \\ &= \iint_K \dots \iint \sum_1^s \sum_{\mu \neq \nu} (f, \chi_\mu) \overline{(g, \chi_\nu)} (u_\mu - i v_\mu) (u_\nu + i v_\nu) d\sigma \\ &= \sum_1^s \sum_{\mu, \nu} (f, \chi_\mu) \overline{(g, \chi_\nu)} \iint_K \dots \iint [(u_\mu u_\nu + v_\mu v_\nu) + i(u_\mu v_\nu - u_\nu v_\mu)] d\sigma; \end{aligned}$$

also, da alle $u_\mu v_\nu, u_\nu v_\mu$ -Integrale, sowie die $u_\mu u_\nu, v_\mu v_\nu$ -Integrale bei $\mu \neq \nu$, aus Symmetriegründen = 0 sind¹⁷⁶, und für $\mu = \nu$ die letzteren alle $= \frac{C}{2s} (C > 0)$ ¹⁷⁶,

$$\begin{aligned} (U' f, g) &= \frac{C}{s} \sum_1^s (f, \chi_\mu) \overline{(g, \chi_\mu)} = \frac{C}{s} \sum_1^s (P_{[\chi_\mu]} f, g) \\ &= \left(\left\{ \frac{C}{s} \sum_1^s P_{[\chi_\mu]} \right\} f, g \right). \end{aligned}$$

Somit ist

$$U' = \frac{C}{s} \sum_1^s P_{[\chi_\mu]} = \frac{C}{s} U,$$

d. h. U', U nicht wesentlich verschieden.

Diese Dinge sind für den Charakter der quantenmechanischen Statistik von großer Bedeutung, wir wiederholen sie darum:

1. Wenn ein Gemisch aus zueinander orthogonalen Zuständen mit genau gleichen Gewichten besteht, kann man nicht mehr feststellen, welche diese waren — oder auch: durch Mischen in genau gleichen

Verhältnissen kann man aus verschiedenen (zueinander orthogonalen) Komponenten dasselbe Gemisch erzeugen.

2. Das so gewonnene Gemisch ist, wenn es sich um endlich viele Komponenten handelt, mit einem Gemisch aller Zustände, welche Linearaggregate dieser Komponenten sind, identisch.

Das einfachste derartige Beispiel ist: mischt man φ, ψ (orthogonal!) 1:1, so entsteht dasselbe, wie wenn man z. B. $\frac{\varphi + \psi}{\sqrt{2}}, \frac{\varphi - \psi}{\sqrt{2}}$ 1:1 mischt oder auch alle $x\varphi + y\psi$ ($|x|^2 + |y|^2 = 1$). Mischt man zwei nichtorthogonale φ, ψ (das Verhältnis braucht gar nicht 1:1 sein), so kann man sie noch viel weniger am fertigen Gemisch wiedererkennen — denn dieses läßt sich ja sicher auch als Gemisch orthogonaler Zustände auffassen.

Ein weiteres Eingehen auf die Natur der Gemische verschieben wir bis zu den thermodynamischen Erörterungen in V. 2. ff. —

Die Formel **Sp.** in IV. 2. gab an, wie in einem Gemisch mit dem statistischen Operator U der Erwartungswert der Größe \mathfrak{N} mit dem Operator R zu berechnen ist: er ist $\text{Spur}(UR)$. Die Wahrscheinlichkeit dafür, daß der Wert a von R im Intervalle $a' < a \leq a''$ liegt (a', a'' gegeben, $a' \leq a''$), ist so zu ermitteln, wie in III. 1. bzw. III. 5.:

man bilde mit der Funktion $F(x) \begin{cases} = 1, & \text{für } a' < x \leq a'' \\ = 0, & \text{sonst} \end{cases}$ die

Größe $F(\mathfrak{N})$, ihr Erwartungswert ist die genannte Wahrscheinlichkeit. Nun hat $F(\mathfrak{N})$ (nach **I.** in IV. 2.) den Operator $F(R)$, und wenn $E(\lambda)$ die zu R gehörige Zerlegung der Einheit ist, so ist, wie wir mehrmals berechneten, $F(R) = E(a'') - E(a')$, und die gesuchte Wahrscheinlichkeit $w(a', a'') = \text{Spur } U(E(a'') - E(a'))$. Somit ist die Wahrscheinlichkeitsfunktion, die die Statistik von \mathfrak{N} beschreibt, $w(a) = \text{Spur } UE(a)$ (vgl. IV. 1., Anm. 175; für Zustände, d. h. $U = P_{[\varphi]}$ wird wieder $w(a) = \text{Spur } P_{[\varphi]}E(a) = (E(a)\varphi, \varphi)$). Natürlich sind diese Wahrscheinlichkeiten, wenn U nicht richtig normiert ist, nur relativ.

Die Frage, wann die Größe \mathfrak{N} mit dem Operator R im Gemisch mit dem statistischen Operator U den Wert λ^* mit Bestimmtheit annimmt, läßt sich ohne weiteres mit Hilfe von $w(a)$ beantworten: es muß für $a < \lambda^*$ $w(a) = 0$ sein, und für $a \geq \lambda^*$ $w(a) = 1$, bzw. wenn U nicht richtig normiert ist, nur = $\text{Erw}(1) = \text{Spur } U$. D. h. $\text{Spur } UE(a) = 0$ für $a < \lambda^*$, $\text{Spur } U(1 - E(a)) = 0$ für $a \geq \lambda^*$ 177. Nun hat für definite Operatoren A, B $\text{Spur}(AB) = 0$ $AB = 0$ zur Folge (vgl. II. 11.), also ist $UE(a) = 0$ für $a < \lambda^*$, und $UE(a) = U$ für $a \geq \lambda^*$, oder was dasselbe ist, da die Faktoren wegen des Hermiteschen Charakters des Produktes vertauschbar sein müssen: $E(a)U = 0$ bzw. $= U$. D. h.

für $f = Ug$ ist $E(a)f \begin{cases} = f, & \text{für } a \geq \lambda^* \\ = 0, & \text{für } a < \lambda^* \end{cases}$, nach der in II. 8. durch-

geführten Diskussion bedeutet dies $Rf = \lambda^*f$, d. h. identisch in g $RUg = \lambda^*Ug$. Somit lautet die endgültige Bedingung: $RU = \lambda^*U$. Oder wenn wir die durch alle Lösungen h von $Rh = \lambda^*h$ gebildete abgeschlossene Linearmannigfaltigkeit mit \mathfrak{M} bezeichnen: Uf liegt stets in \mathfrak{M} .

Dasselbe Resultat hätte übrigens auch aus dem Verschwinden der Streuung, d. h. des (evtl. relativen) Erwartungswertes von $(\mathfrak{M} - \lambda^*)^2$, gewonnen werden können. —

Wir haben in III. 3. die folgenden Fragen beantwortet ($\mathfrak{M}, \mathfrak{C}, \dots$ seien physikalische Größen, R, S, \dots ihre bzw. Operatoren):

1. Wann ist \mathfrak{M} absolut genau meßbar? Antwort: Wenn R ein reines Punktspektrum hat.

2. Wann sind $\mathfrak{M}, \mathfrak{C}$ gleichzeitig absolut genau meßbar? Antwort: Wenn R, S reine Punktspektren haben und vertauschbar sind.

3. Wann sind mehrere Größen $\mathfrak{M}, \mathfrak{C}, \dots$ gleichzeitig absolut genau meßbar? Antwort: Wenn R, S, \dots reine Punktspektren haben und alle vertauschbar sind.

4. Wann sind mehrere Größen $\mathfrak{M}, \mathfrak{C}, \dots$ gleichzeitig beliebig genau meßbar? Antwort: Wenn R, S, \dots alle vertauschbar sind.

Dabei benützten wir das folgende, aus dem Resultat des Compton-Simonsschen Versuches abstrahierte, Prinzip:

(*M.*) Wenn an einem System S die physikalische Größe \mathfrak{M} zweimal unmittelbar hintereinander gemessen wird, so erhält man beidemale denselben Wert. Dies ist der Fall, obwohl \mathfrak{M} im ursprünglichen Zustande von S eine Streuung haben, und die \mathfrak{M} -Messung außerdem den Zustand von S verändern kann.

Wir hatten die physikalische Bedeutung von *M.* in III. 3. ausführlich diskutiert. Weitere Voraussetzungen bei der Beantwortung von 1.—4. waren: Die statistische Formel E_2 von III. 3. für Zustände; die Annahme *F.* von III. 3.: wonach $F(\mathfrak{M})$ den Operator $F(R)$ hat, wenn \mathfrak{M} den Operator R hat; die Annahme, wonach $R + S$ den Operator $\mathfrak{M} + \mathfrak{C}$ hat, wenn die (gleichzeitig beobachtbaren) Größen $\mathfrak{M}, \mathfrak{C}$ die bzw. Operatoren R, S haben.

Da diese drei Annahmen wieder zu unserer Verfügung stehen (die erste folgt aus der Formel *Sp.* in IV. 2., die zwei anderen entsprechen *I., II.* in IV. 2.), und *M.* auch als zutreffend angenommen werden soll — weil wir es als für den begrifflichen Aufbau der Quantenmechanik unerläßlich erkannt haben — gelten die in III. 3. für 1.—4. gegebenen Beweise auch hier. Die angegebenen Antworten sind also wieder zutreffend.

In III. 5. untersuchten wir diejenigen physikalischen Größen, die nur zwei Werte annehmen: 0, 1. Sie entsprachen den Eigenschaften \mathfrak{C} eineindeutig, denn wenn \mathfrak{C} gegeben war, so konnte die Größe so definiert werden: sie wird gemessen, indem man entscheidet, ob \mathfrak{C} vor-

liegt, oder nicht, ihr Wert ist dann 1 bzw. 0; war umgekehrt die Größe gegeben, so war \mathfrak{E} diese Eigenschaft: die genannte Größe hat den Wert 1 (d. h. nicht 0). Aus dem dortigen \mathbf{F} . (d. i. \mathbf{I} . in IV. 2.) folgte, daß die entsprechenden Operatoren E gerade die Projektionsoperatoren und nur diese sind. Die Wahrscheinlichkeit dafür, daß \mathfrak{E} vorliegt, war dem Erwartungswerte der oben definierten Größe gleich. In III. 5. wurde sie nur für Zustände φ (d. h. $U = P_{[\varphi]}$, $\|\varphi\| = 1$) berechnet, wir können sie aber allgemein aus \mathbf{Sp} . bestimmen: sie ist $\text{Spur}(UE)$ (relativ!, absolut nur, wenn U richtig normiert, d. h. $\text{Spur } U = 1$ ist).

Da wir 1.—4. sichergestellt haben, sind die daraus hergeleiteten Aussagen $\alpha)$ — $\zeta)$ in III. 5. ebenfalls sichergestellt; allerdings ist zu bemerken, daß dort $\alpha)$ nur für Zustände Aufschluß erteilte, wir haben es aber soeben auf alle Gemische ausgedehnt:

$\alpha')$ Im Gemisch mit dem statistischen Operator U liegt die Eigenschaft \mathfrak{E} mit den Wahrscheinlichkeiten

$$\text{Spur}(UE) \quad \text{bzw.} \quad \text{Spur}(U(1 - E))$$

vor bzw. nicht vor (relativ!, absolut nur, wenn U richtig normiert, d. h. $\text{Spur } U = 1$ ist).

Wenn mehrere Größen $\mathfrak{N}_1, \dots, \mathfrak{N}_l$ untersucht werden, und zwar $\mathfrak{N}_1, \dots, \mathfrak{N}_l$ die bzw. Operatoren R_1, \dots, R_l haben, zu denen die bzw. Zerlegungen der Einheit $E_1(\lambda), \dots, E_l(\lambda)$ gehören; wenn ferner l Intervalle $I_1: \lambda'_1 < \lambda \leq \lambda''_1, \dots, I_l: \lambda'_l < \lambda \leq \lambda''_l$ gegeben sind, und $E_1(I_1) = E_1(\lambda''_1) - E_1(\lambda'_1), \dots, E_l(I_l) = E_l(\lambda''_l) - E_l(\lambda'_l)$ gesetzt wird; dann gehören zu den Eigenschaften „ \mathfrak{N}_1 liegt in I_1 “, \dots , „ \mathfrak{N}_l liegt in I_l “ die bzw. Projektionsoperatoren $E_1(I_1), \dots, E_l(I_l)$ (vgl. $\zeta)$). Dafür, daß diese alle gleichzeitig entscheidbar seien, ist die Vertauschbarkeit der $E_1(I_1), \dots, E_l(I_l)$ charakteristisch (vgl. $\gamma)$), und der Projektionsoperator für ihr gleichzeitiges Bestehen ist $E = E_1(I_1) \cdots E_l(I_l)$ (vgl. $\epsilon)$). Die Wahrscheinlichkeit hierfür ist also $\text{Spur}(UE)$ (vgl. $\alpha')$).

Schlagen wir nun den umgekehrten Weg ein: Nehmen wir an, daß wir den Zustand eines Systems \mathbf{S} nicht kennen, dagegen gewisse Messungen an \mathbf{S} vornahmen, und deren Resultate wissen. In der Wirklichkeit verhält es sich ja immer so, denn nur aus Meßresultaten können wir über den Zustand von \mathbf{S} etwas erfahren. Genau genommen sind die Zustände nur eine theoretische Konstruktion, tatsächlich vorhanden sind nur die Meßresultate, und die Aufgabe der Physik ist, Verknüpfungen zwischen vergangenen und zukünftigen Meßresultaten zu ermitteln. Allerdings geschieht dies immer durch die Einführung des Hilfsbegriffes „Zustand“, aber die physikalische Theorie muß dann lehren, wie man einerseits aus den vergangenen Meßresultaten auf den gegenwärtigen Zustand schließt, und andererseits aus dem gegenwärtigen Zustände auf die zukünftigen Meßergebnisse. Wir haben uns bisher nur

mit der zweiten Frage beschäftigt, und müssen uns nunmehr der ersten zuwenden.

Falls die vergangenen Messungen nicht ausreichen, um den gegenwärtigen Zustand eindeutig festzulegen, so kann man aus ihnen u. U. entnehmen, mit welchen Wahrscheinlichkeiten die einzelnen Zustände vorliegen (dies gilt in kausalen Theorien, z. B. in der klassischen Mechanik, ebenso wie in der Quantenmechanik). Die eigentliche Aufgabe ist also diese: zu gegebenen Meßresultaten ein Gemisch zu finden, dessen Statistik dieselbe ist wie diejenige, die man für ein System \mathbf{S} erwarten wird, von dem man nur weiß, daß die genannten Messungen an ihm durchgeführt wurden, und daß sie die genannten Resultate ergaben. Allerdings müssen wir etwas genauer angeben, was es bedeutet, daß man über \mathbf{S} „nur dieses weiß“, und nicht mehr — und wie dies zu einer Statistik führen soll.

Der Zusammenhang mit der Statistik muß jedenfalls dieser sein: wenn für viele Systeme $\mathbf{S}'_1, \dots, \mathbf{S}'_M$ (lauter Exemplare von \mathbf{S} !) diese Messungen die genannten Resultate ergaben, so ist diese Gesamtheit $[\mathbf{S}'_1, \dots, \mathbf{S}'_M]$ mit dem w. o. den Meßresultaten zugeordneten Gemisch in allen statistischen Eigenschaften übereinstimmend. Daß die genannten Meßresultate für alle $\mathbf{S}'_1, \dots, \mathbf{S}'_M$ gleich ausfielen, kann man sich nach M . dadurch verursacht denken, daß ursprünglich eine große Gesamtheit $[\mathbf{S}_1, \dots, \mathbf{S}_N]$ gegeben war, an der die genannten Messungen ausgeführt wurden, und dann diejenigen Elemente, bei denen die gewünschten Resultate herauskamen, zu einer neuen Gesamtheit zusammengefaßt wurden — diese ist dann $[\mathbf{S}'_1, \dots, \mathbf{S}'_M]$. Freilich hängt jetzt alles davon ab, wie $[\mathbf{S}_1, \dots, \mathbf{S}_N]$ gewählt wird. Diese Ausgangsgesamtheit gibt sozusagen die a-priori-Wahrscheinlichkeiten der einzelnen Zustände des Systems \mathbf{S} an. Die ganze Sachlage ist natürlich aus der allgemeinen Wahrscheinlichkeitstheorie her wohlbekannt: um aus Meßresultaten auf Zustände, d. h. aus Folgen auf Ursachen schließen zu können, d. h. um a posteriori-Wahrscheinlichkeiten berechnen zu können, muß man die a priori-Wahrscheinlichkeiten kennen. Im allgemeinen sind diese auf vielerlei Weise wählbar, und demgemäß unser Problem auch nicht eindeutig zu beantworten, jedoch werden wir sehen, daß unter den besonderen Verhältnissen der Quantenmechanik eine gewisse Bestimmung der Ausgangsgesamtheit $[\mathbf{S}_1, \dots, \mathbf{S}_N]$ (d. h. der a-priori-Wahrscheinlichkeiten) ganz besonders ausgezeichnet ist.

Anders liegen die Verhältnisse, wenn man hinreichend viele Meßresultate zur Verfügung hat, um den Zustand von \mathbf{S} vollkommen zu bestimmen: dann muß die Antwort auf jede Frage eindeutig lauten. Wir werden alsbald sehen, wie dieser Umstand zur Geltung kommt.

Schließlich erwähnen wir noch dieses: Anstatt zu sagen, daß mehrere Meßresultate, die \mathbf{S} betreffen, bekannt sind, können wir auch sagen, daß \mathbf{S} in bezug auf eine gewisse Eigenschaft \mathcal{C} geprüft und deren Vor-

handensein festgestellt wurde. Aus $\alpha)$ — $\zeta)$ wissen wir ja, wie diese Dinge zusammenhängen: wenn z. B. die gleichzeitig feststellbaren Meßresultate vorliegen, wonach die Werte der Größen $\mathfrak{M}_1, \dots, \mathfrak{M}_i$ in den bzw. Intervallen I_1, \dots, I_i liegen, so ist (mit den früher verwendeten Symbolen) der Projektionsoperator von \mathfrak{C} $E = E_1(I_1) \cdots E_i(I_i)$.

Die Kenntnisse über \mathfrak{S} kommen also immer auf das Vorliegen einer gewissen Eigenschaft \mathfrak{C} heraus, die formal durch Angabe des Projektionsoperators E gekennzeichnet wird. Gesucht wird der statistische Operator der gleichwertigen Gesamtheit $[\mathfrak{S}'_1, \dots, \mathfrak{S}'_M]$, U ; sowie der statistische Operator der allgemeinen Ausgangsgesamtheit $[\mathfrak{S}_1, \dots, \mathfrak{S}_N]$, U_0 . Welche sind die mathematischen Zusammenhänge zwischen E, U, U_0 ?

Wegen \mathfrak{M} . ist auch in $[\mathfrak{S}'_1, \dots, \mathfrak{S}'_M]$ \mathfrak{C} bestimmt vorhanden, d. h. die zu \mathfrak{C} gehörige Größe hat den Wert 1. Dies bedeutet, wie wir am Anfang dieses Paragraphen sahen, $EU = U$, d. h. Uf liegt immer in \mathfrak{M} , wobei \mathfrak{M} die Menge aller f mit $Ef = f$ ist, d. h. die zu E gehörige abgeschlossene Linearmannigfaltigkeit.

Statt $EU = U$ können wir auch $UE = U, U(1 - E) = 0$ schreiben, d. h. $Ug = 0$ für alle $g = (1 - E)f$, d. i. für alle g der zu $1 - E$ gehörigen abgeschlossenen Linearmannigfaltigkeit, d. h. für alle g aus $\mathfrak{R} - \mathfrak{M}$. Also: Uf ist für alle f von $\mathfrak{R} - \mathfrak{M}$ gleich 0, und für die f von \mathfrak{M} liegt es auch in \mathfrak{M} . Mehr kann auf diese Weise über U nicht ausgesagt werden.

Dies bestimmt U dann und nur dann (im wesentlichen, d. h. bis auf einen konstanten Faktor), wenn \mathfrak{M} 0- oder 1-dimensional ist. In der Tat: für $\mathfrak{M} = [0]$ ergibt es $U = 0$, was nach III. 2., Bemerkung 1., unmöglich ist; für $\mathfrak{M} = [\varphi]$ ($\varphi \neq 0$, daher darf $\|\varphi\| = 1$ angenommen werden) ist $U\varphi = c\varphi$, also für alle f von \mathfrak{M} (da diese gleich $a\varphi$ sind) $Uf = cf$, also allgemein $Uf = UEf = cEf, U = cE = cP_{[\varphi]}$, und da $c > 0$ ist (denn U ist definit und $\neq 0$), ist U im wesentlichen $= E = P_{[\varphi]}$; für ≥ 2 -dimensionales \mathfrak{M} können wir zwei φ, ψ aus \mathfrak{M} normiert orthogonal wählen, dann sind $P_{[\varphi]}, P_{[\psi]}$ zwei wesentlich verschiedene U , die unsere Bedingung erfüllen. Also: $E = 0$ ist unmöglich, für $E = P_{[\varphi]} (\|\varphi\| = 1)$ ist $U = E = P_{[\varphi]}$, sonst ist U mehrdeutig.

Daß für $E = 0$ überhaupt kein U gefunden werden kann, wäre schlimm, wenn ein \mathfrak{S} eine solche Eigenschaft \mathfrak{C} besitzen könnte. Jedoch ist dies nach $\eta)$ ausgeschlossen: \mathfrak{C} ist nie vorhanden, seine Wahrscheinlichkeit ist immer 0. Eindimensionales \mathfrak{M} , d. h. ein $E = P_{[\varphi]} (\|\varphi\| = 1)$ legt U eindeutig fest, und zwar als Zustand φ — also ist dies diejenige Messung, die den Zustand von \mathfrak{S} vollkommen festlegt, wenn sie positiv ausfällt, und zwar als φ ¹⁷⁸. Alle anderen Messungen sind unvollkommen, sie reichen zur Festlegung des Zustandes nicht aus.

Im allgemeinen Falle gehen wir folgendermaßen vor. Wenn wir die zu \mathfrak{C} gehörige Größe auch \mathfrak{C} nennen, so entsteht U dadurch, daß an

der zu U_0 gehörigen Gesamtheit ($[S_1, \dots, S_N]$) \mathfrak{C} gemessen wird, und alle Elemente, bei denen der Wert 1 herauskommt, zur Gesamtheit von U ($[S'_1, \dots, S'_M]$) zusammengefaßt werden. Die Messung von \mathfrak{C} kann nun auf viele verschiedene Weisen erfolgen, z. B. indem eine andere Größe \mathfrak{R} gemessen wird, von der \mathfrak{C} eine bekannte Funktion ist: $\mathfrak{C} = F(\mathfrak{R})$. Wenn z. B. $\varphi_1, \varphi_2, \dots$ ein normiertes Orthogonalsystem ist, das \mathfrak{M} aufspannt, und ψ_1, ψ_2, \dots ein entsprechendes für $\mathfrak{R} - \mathfrak{M}$, so spannt $\varphi_1, \varphi_2, \dots, \psi_1, \psi_2, \dots$ $\mathfrak{M} + (\mathfrak{R} - \mathfrak{M}) = \mathfrak{R}$ auf, d. h. es ist vollständig. Seien $\lambda_1, \lambda_2, \dots, \mu_1, \mu_2, \dots$ voneinander verschiedene reelle Zahlen, und der Operator R durch

$$R(\sum_n x_n \varphi_n + \sum_n x_n \psi_n) = \sum_n \lambda_n x_n \varphi_n + \sum_n \mu_n y_n \psi_n$$

definiert. R hat offenbar das reine Punktspektrum $\lambda_1, \lambda_2, \dots, \mu_1, \mu_2, \dots$ mit den bzw. Eigenfunktionen $\varphi_1, \varphi_2, \dots, \psi_1, \psi_2, \dots$, und zwar sind alle Eigenwerte einfach. Ist $F(x)$ irgendeine Funktion mit

$$F(\lambda_n) = 1, \quad F(\mu_n) = 0,$$

so hat $F(R)$ für $\varphi_1, \varphi_2, \dots$ den Eigenwert 1, also auch für jedes f von \mathfrak{M} , und für ψ_1, ψ_2, \dots den Eigenwert 0, also auch für jedes f von $\mathfrak{R} - \mathfrak{M}$ — somit ist $E = F(R)$. Gehört R zu \mathfrak{R} , so ist demnach $\mathfrak{C} = F(\mathfrak{R})$. Die \mathfrak{C} -Messung kann also als \mathfrak{R} -Messung ausgelegt werden.

In diesem Falle können wir berechnen, wie U_0, U zusammenhängen. Nach der \mathfrak{R} -Messung ist jedes System in einem der Zustände $\varphi_1, \varphi_2, \dots, \psi_1, \psi_2, \dots$, und zwar je nach dem, ob bzw. der Wert $\lambda_1, \lambda_2, \dots, \mu_1, \mu_2, \dots$ gefunden wurde. Die Wahrscheinlichkeiten hierfür sind bzw.

$$\text{Spur}(U_0 P_{[\varphi_1]}) = (U_0 \varphi_1, \varphi_1), \text{ Spur}(U_0 P_{[\varphi_2]}) = (U_0 \varphi_2, \varphi_2), \dots,$$

$$\text{Spur}(U_0 P_{[\psi_1]}) = (U_0 \psi_1, \psi_1), \text{ Spur}(U_0 P_{[\psi_2]}) = (U_0 \psi_2, \psi_2), \dots$$

(vgl. die Betrachtungen von III. 3., deren Gültigkeit wir gesichert haben). D. h. es gehen diese Bruchteile der U_0 -Gesamtheit in die Gesamtheiten $P_{[\varphi_1]}, P_{[\varphi_2]}, \dots, P_{[\psi_1]}, P_{[\psi_2]}, \dots$ über. Da $\mathfrak{C} = 1$ $\mathfrak{R} = \lambda_1, \lambda_2, \dots$ entspricht, entsteht die U -Gesamtheit durch Zusammenfassung der ersten Gruppe. Somit ist:

$$U = \sum_n (U_0 \varphi_n, \varphi_n) P_{[\varphi_n]}.$$

Nun ist jedes $P_{[\varphi_n]}$ mit R vertauschbar¹⁷⁹, daher muß es auch U sein. D. h.: wenn U nicht mit jedem auf die oben beschriebene Weise entstandenen R vertauschbar ist, so scheiden gewisse Meßverfahren (nämlich die auf den entsprechenden \mathfrak{R} beruhenden) für seine Erzeugung aus U_0 aus. Wir wissen dann mehr über U , als daß es durch eine \mathfrak{C} -Messung entstanden ist. Da aber U gerade diesen Zustand unserer Kenntnisse repräsentieren soll, versuchen wir an dieser Bedingung festzuhalten: wenn es solche U gibt, für die kein Meßverfahren von \mathfrak{C} ausgeschlossen werden braucht, so geben wir diesen den Vorzug. Untersuchen wir also, ob es solche U gibt, und welche es sind!

U müßte, wie wir sahen, mit allen auf die genannte Weise erzeugten R vertauschbar sein. Daraus folgt $RU\varphi_n = UR\varphi_n = U(\lambda_n\varphi_n) = \lambda_n U\varphi_n$, d. h. $U\varphi_n$ Eigenfunktion von R vom Eigenwerte λ_n — also $U\varphi_n = a_n\varphi_n$. Insbesondere $U\varphi_1 = a_1\varphi_1$. Wenn irgendein φ aus \mathfrak{M} mit $\|\varphi\| = 1$ gegeben ist, so können wir $\varphi_1, \varphi_2, \dots, \psi_1, \psi_2, \dots$ so wählen, daß $\varphi_1 = \varphi$ wird, daher ist jedes solche φ Eigenfunktion von U . Dabei gehören alle solchen φ zum selben Eigenwert: denn gehörten φ, ψ zu verschiedenen, so müßten sie orthogonal sein, sodann ist $\frac{\varphi + \psi}{\sqrt{2}}$ auch Eigenfunktion, und wegen

$$\left(\frac{\varphi + \psi}{\sqrt{2}}, \varphi\right) = \frac{(\varphi, \varphi)}{\sqrt{2}} = \frac{1}{\sqrt{2}}, \quad \left(\frac{\varphi + \psi}{\sqrt{2}}, \psi\right) = \frac{(\psi, \psi)}{\sqrt{2}} = \frac{1}{\sqrt{2}}$$

zu keinem der beiden orthogonal — also zum gleichen Eigenwert wie beide gehörig, was unmöglich ist, da diese zu verschiedenen gehören sollten. Somit ist $U\varphi = a\varphi$ mit konstantem a , man kann offenbar $\|\varphi\| = 1$ fallen lassen, so daß für alle f von \mathfrak{M} $Uf = af$ ist. Also ist stets $UEg = aEg$, d. h. $UE = aE$, da aber $U = UE$ ist, $U = aE$. U, E sind beide definit und $\neq 0$, also ist $a > 0$, daher können wir, ohne es wesentlich zu ändern, $U = E$ setzen.

Dieses U löst aber tatsächlich die gestellte Aufgabe für jedes R , d. h. jedes System $\varphi_1, \varphi_2, \dots, \psi_1, \psi_2, \dots$, wenn U_0 geeignet gewählt wird. Für $U_0 = 1$ ist nämlich

$$\sum^n (U_0\varphi_n, \varphi_n) P_{[\varphi_n]} = \sum^n (\varphi_n, \varphi_n) P_{[\varphi_n]} = \sum^n P_{[\varphi_n]} = P_{\mathfrak{M}} = E = U.$$

Damit ist $U = E$, im Sinne des oben skizzierten Programmes, begründet. Auch U_0 läßt sich bestimmen, falls wir es als universell, d. h. von E und R unabhängig annehmen. $U_0 = 1$ leistet dann das Gewünschte und nur dieses. Es ist nämlich:

$$\begin{aligned} (U\varphi_m, \varphi_m) &= (E\varphi_m, \varphi_m) = (\varphi_m, \varphi_m) = 1, \\ (U\varphi_m, \varphi_m) &= \sum^n (U_0\varphi_n, \varphi_n) (P_{[\varphi_n]}\varphi_m, \varphi_m) = \sum^n (U_0\varphi_n, \varphi_n) |(\varphi_n, \varphi_m)|^2 \\ &= (U_0\varphi_m, \varphi_m), \end{aligned}$$

also: $(U_0\varphi_m, \varphi_m) = 1$. Da jedes φ aus \mathfrak{M} mit $\|\varphi\| = 1$ zum φ_1 gemacht werden kann, ist $(U_0\varphi, \varphi) = 1$, und hieraus folgt für alle f von \mathfrak{M} $(U_0f, f) = (f, f)$. Da \mathfrak{M} beliebig ist, gilt dies für alle f überhaupt, somit ist $U_0 = 1$.

Wenn zwei, nicht notwendig gleichzeitig feststellbare, Eigenschaften $\mathfrak{E}, \mathfrak{F}$ gegeben sind, so ist nach obigem die Wahrscheinlichkeit dafür, daß ein System \mathcal{S} , an dem soeben das Vorhandensein der Eigenschaft \mathfrak{E} festgestellt wurde, bei unmittelbar nachfolgender Prüfung auch die Eigenschaft \mathfrak{F} besitzt, $\text{Spur}(EF) = \sum(EF)$ (E, F sind die Operatoren von $\mathfrak{E}, \mathfrak{F}$; die erste Formel gilt, weil $U = E$ ist, die zweite wegen $E^2 = E, F^2 = F$ nach II. 11.). Übrigens sind diese Wahrschein-

lichkeiten relativ, wobei man \mathfrak{E} als fest und \mathfrak{F} als variabel zu denken hat; falls $\text{Spur}(E) = \sum(E) = \text{Dimensionszahl von } \mathfrak{M}$ endlich ist, kann man sie durch Division mit dieser Zahl normieren.

Statt $\mathfrak{E}, \mathfrak{F}$ können wir auch physikalische Größen betrachten: Seien $\mathfrak{N}_1, \dots, \mathfrak{N}_j$ gleichzeitig meßbare Größen, ebenso $\mathfrak{S}_1, \dots, \mathfrak{S}_l$, ihre bzw. Operatoren seien $R_1, \dots, R_j, S_1, \dots, S_l$, deren bzw. Zerlegungen der Einheit $E_1(\lambda), \dots, E_j(\lambda), F_1(\lambda), \dots, F_l(\lambda)$. $I_1: \lambda'_1 < \lambda \leq \lambda''_1, \dots, I_j: \lambda'_j < \lambda \leq \lambda''_j, J_1: \mu'_1 < \lambda \leq \mu''_1, \dots, J_l: \mu'_l < \lambda \leq \mu''_l$ seien Intervalle, $E_1(I_1) = E_1(\lambda''_1) - E_1(\lambda'_1), \dots, E_j(I_j) = E_j(\lambda''_j) - E_j(\lambda'_j), F_1(J_1) = F_1(\mu''_1) - F_1(\mu'_1), \dots, F_l(J_l) = F_l(\mu''_l) - F_l(\mu'_l)$. Die Frage lautet: $\mathfrak{N}_1, \dots, \mathfrak{N}_j$ wurden an \mathfrak{S} gemessen, ihre Werte lagen bzw. in I_1, \dots, I_j , wie wahrscheinlich ist es, daß die Werte $\mathfrak{S}_1, \dots, \mathfrak{S}_l$ bei einer unmittelbar nachfolgenden Messung bzw. in J_1, \dots, J_l liegen werden? Offenbar ist $E = E_1(I_1) \cdots E_j(I_j), F = F_1(J_1) \cdots F_l(J_l)$ zu setzen (vgl. ϵ, ζ), und die gesuchte Wahrscheinlichkeit ist dann

$$\begin{aligned} \text{Spur}(E_1(I_1) \cdots E_j(I_j) \cdot F_1(J_1) \cdots F_l(J_l)) \\ = \sum(E_1(I_1) \cdots E_j(I_j) \cdot F_1(J_1) \cdots F_l(J_l)). \end{aligned}$$

Zum Schluß sei noch einmal auf die Bedeutung der allgemeinen Ausgangsgesamtheit $U_0 = 1$ hingewiesen. Wir gewannen U aus ihr, indem wir sie bei der \mathfrak{N} -Messung in zwei Teile zerlegten, hätten wir sie bei der \mathfrak{N} -Messung nicht zerlegt, d. h. an allen ihren Elementen \mathfrak{N} gemessen, und dann wieder alle zu einer Gesamtheit vereinigt, so wäre wieder $U_0 = 1$ herausgekommen. Dies kann man leicht direkt nachrechnen, oder es dadurch beweisen, daß man $E = 1$ wählt: dann fallen die μ_1, μ_2, \dots und ψ_1, ψ_2, \dots fort, und die $\lambda_1, \lambda_2, \dots$ und $\varphi_1, \varphi_2, \dots$ bilden ein vollständiges System. Also: obwohl die \mathfrak{N} -Messung die einzelnen Elemente u. U. verändert, müssen sich alle diese Änderungen genau kompensieren, denn die ganze Gesamtheit ändert sich nicht. Übrigens ist diese Eigenschaft für $U_0 = 1$ charakteristisch. Denn wenn für alle vollständigen normierten Orthogonalsysteme $\varphi_1, \varphi_2, \dots$

$$U_0 = \sum_1^{\infty} (U_0 \varphi_n, \varphi_n) P_{[\varphi_n]}$$

ist, so ist U_0 mit $P_{[\varphi_1]}$ vertauschbar, da es jedes $P_{[\varphi_n]}$ ist — d. h. U_0 mit jedem $P_{[\varphi]}, \|\varphi\| = 1$. Also ist

$$U_0 \varphi = U_0 P_{[\varphi]} \varphi = P_{[\varphi]} U_0 \varphi = (U_0 \varphi, \varphi) \cdot \varphi,$$

d. h. φ Eigenfunktion von U_0 . Hieraus folgt $U_0 = 1$ genau so, wie früher aus der entsprechenden Beziehung (mit \mathfrak{M}, E an Stelle von $\mathfrak{R}, 1$) $U = E$ gefolgert wurde.

In $U_0 = 1$ sind also alle möglichen Zustände in höchstmöglichem Gleichgewicht, kein Meßeingriff vermag daran zu ändern. Für jedes

vollständige normierte Orthogonalsystem $\varphi_1, \varphi_2, \dots$ ist

$$U_0 = 1 = \sum_1^{\infty} P_{[\varphi_n]},$$

d. h. das Gemisch 1 : 1 : \dots aller Zustände $\varphi_1, \varphi_2, \dots$. Daraus erkennt man, daß $U_0 = 1$ der in der älteren Quantentheorie üblichen thermodynamischen Annahme von der „a-priori-Gleichwahrscheinlichkeit aller einfachen Quantenbahnen“ entspricht. Auch in unseren thermodynamischen Betrachtungen, denen die nächsten Paragraphen gewidmet sind, wird es eine wichtige Rolle spielen.

V. Allgemeine Betrachtungen.

1. Messung und Reversibilität.

Was mit einem Gemisch mit dem statistischen Operator U geschieht, wenn eine Größe \mathfrak{N} mit dem Operator R in ihm gemessen wird (d. h. an jedem Element dieser Gesamtheit, derart, daß nachher die durch die Messung hindurchgegangenen Einzelsysteme wieder alle zu einer Gesamtheit zusammengefaßt werden), können wir voraussagen — soweit diese Frage überhaupt eine eindeutige Antwort zuläßt.

Erstens habe R ein reines und einfaches Punktspektrum, $\varphi_1, \varphi_2, \dots$ sei das vollständige normierte Orthogonalsystem aus Eigenfunktionen, $\lambda_1, \lambda_2, \dots$ die entsprechenden Eigenwerte (nach Annahme alle voneinander verschieden). Nach der Messung ist die Lage diese: im Bruchteil ($U\varphi_m, \varphi_m$) der ursprünglichen Gesamtheit hat \mathfrak{N} den Wert λ_n ($n = 1, 2, \dots$), dieser Bruchteil bildet also eine Gesamtheit, in der \mathfrak{N} bestimmt den Wert λ_n hat ($\mathbf{M.}$ in IV. 3.), es ist also im Zustande φ_n , mit dem (richtig normierten!) statistischen Operator $P_{[\varphi_n]}$. Durch die Zusammenfassung kommt also ein Gemisch mit dem statistischen Operator

$$U' = \sum_1^{\infty} (U\varphi_n, \varphi_n) P_{[\varphi_n]}$$

zustande.

Zweitens habe R zwar ein reines Punktspektrum, die Bedeutung von $\varphi_1, \varphi_2, \dots$ und $\lambda_1, \lambda_2, \dots$ sei also wie vorhin, aber kein einfaches — d. h. unter den λ_n seien gleiche. Dann ist der Meßprozeß von \mathfrak{N} nicht eindeutig definiert (so war es z. B. beim \mathfrak{C} in IV. 3.). In der Tat: seien μ_1, μ_2, \dots lauter verschiedene reelle Zahlen, und S der $\varphi_1, \varphi_2, \dots$ und μ_1, μ_2, \dots entsprechende Operator, \mathfrak{C} die dazugehörige Größe; ist $F(x)$ eine Funktion mit

$$F(\lambda_n) = \mu_n \quad (n = 1, 2, \dots),$$

so ist $F(S) = R$, also $F(\mathfrak{C}) = \mathfrak{N}$ — also die \mathfrak{C} -Messung auch als \mathfrak{N} -Messung anzusehen. Diese verwandelt nun U in das oben angegebene U' ,

und dieses ist wohl von den (ganz willkürlichen) μ_1, μ_2, \dots unabhängig, nicht aber von den $\varphi_1, \varphi_2, \dots$ — obwohl diese wegen der Mehrfachheit der Eigenwerte von R nicht eindeutig bestimmt sind. In IV. 2. gaben wir, an II. 8. anschließend, an, was über die $\varphi_1, \varphi_2, \dots$ ausgesagt werden kann: seien $\lambda', \lambda'', \dots$ die verschiedenen unter den $\lambda_1, \lambda_2, \dots$, $\mathfrak{M}_{\lambda'}, \mathfrak{M}_{\lambda''}, \dots$ die Mengen der f mit $Rf = \lambda'f$, bzw. $Rf = \lambda''f$, bzw. \dots , sind dann χ'_1, χ'_2, \dots , bzw. $\chi''_1, \chi''_2, \dots$, bzw. \dots beliebige normierte Orthogonalsysteme, die $\mathfrak{M}_{\lambda'}$, bzw. $\mathfrak{M}_{\lambda''}$, bzw. \dots aufspannen, so ist $\chi'_1, \chi'_2, \dots, \chi''_1, \chi''_2, \dots, \dots$ das allgemeinste $\varphi_1, \varphi_2, \dots$ -System. Als U' kommt also, je nach der Wahl von \mathfrak{C} , d. h. je nach der eigentlichen Meßanordnung, jedes

$$U' = \sum^n (U \chi'_n, \chi'_n) P_{[\chi'_n]} + \sum^n (U \chi''_n, \chi''_n) P_{[\chi''_n]} + \dots$$

in Frage. Und dieses ist nur in besonderen Fällen eindeutig.

Wir bestimmen noch diesen besonderen Fall. Dann muß jeder einzelne Addend eindeutig sein. D. h. für jeden Eigenwert λ , falls \mathfrak{M}_λ die Menge der f mit $Rf = \lambda f$ ist, $\sum^n (U \chi_n, \chi_n) P_{[\chi_n]}$ für jedes \mathfrak{M}_λ aufspannende normierte Orthogonalsystem dasselbe. Nennen wir diese Summe V , so zeigt die wörtliche Wiederholung der Betrachtungen in IV. 3. (wobei die dortigen U_0, U, \mathfrak{M} durch $U, V, \mathfrak{M}_\lambda$ zu ersetzen sind), daß $V = c_\lambda P_{\mathfrak{M}}$ (c_λ konstant, > 0) sein muß, und dies der Gültigkeit von $(Uf, f) = c_\lambda (f, f)$ für alle f von \mathfrak{M}_λ gleichkommt. Da diese f dasselbe sind wie die $P_{\mathfrak{M}_\lambda g}$ für alle g , fordern wir: $(UP_{\mathfrak{M}_\lambda g}, P_{\mathfrak{M}_\lambda g}) = c_\lambda (P_{\mathfrak{M}_\lambda g}, P_{\mathfrak{M}_\lambda g})$, d. h. $(P_{\mathfrak{M}_\lambda} U P_{\mathfrak{M}_\lambda} g, g) = c_\lambda (P_{\mathfrak{M}_\lambda} g, g)$, d. h.

$$P_{\mathfrak{M}_\lambda} U P_{\mathfrak{M}_\lambda} = c_\lambda P_{\mathfrak{M}_\lambda}$$

für alle Eigenwerte λ von R . Ist aber diese, U offenbar stark einengende Bedingung nicht erfüllt, so können verschiedene Meßanordnungen für \mathfrak{M} U tatsächlich in verschiedene U' verwandeln. (Wir werden immerhin in V. 4. auf thermodynamischer Grundlage noch etwas über das Resultat der \mathfrak{M} -Messung im allgemeinen aussagen können.)

Drittens habe R kein reines Punktspektrum. Dann ist es nach III. 3. (oder IV. 3., Kriterium 1.) gar nicht absolut genau meßbar, und \mathfrak{M} -Messungen beschränkter Genauigkeit sind, wie wir a. a. O. diskutierten, Messungen von Größen mit reinem Punktspektrum gleichwertig.

Eine andere Art von Eingriffen in materielle Systeme wird, im Gegensatz zu den diskontinuierlich, unkausal und augenblicklich wirkenden Experimenten oder Messungen, durch die zeitabhängige Schrödingersche Differentialgleichung gegeben: diese beschreibt, wie sich das System im Laufe der Zeit stetig und kausal ändert, wenn seine Gesamtenergie bekannt ist. Für Zustände φ lautet sie, wenn H der Energieoperator ist:

$$(Z_1.) \quad \frac{\partial}{\partial t} \varphi_t = -\frac{2\pi i}{h} H \varphi_t.$$

Für den statistischen Operator des Zustandes φ_t , $U_t = P_{[\varphi_t]}$, bedeutet dies:

$$\begin{aligned} \left(\frac{\partial}{\partial t} U_t\right) f &= \frac{\partial}{\partial t} (U_t f) = \frac{\partial}{\partial t} ((f, \varphi_t) \cdot \varphi_t) = \left(f, \frac{\partial}{\partial t} \varphi_t\right) \cdot \varphi_t + (f, \varphi_t) \cdot \frac{\partial}{\partial t} \varphi_t \\ &= - \left(f, \frac{2\pi i}{\hbar} H \varphi_t\right) \cdot \varphi_t - (f, \varphi_t) \cdot \frac{2\pi i}{\hbar} H \varphi_t \\ &= \frac{2\pi i}{\hbar} ((Hf, \varphi_t) \cdot \varphi_t - (f, \varphi_t) \cdot H \varphi_t) = \frac{2\pi i}{\hbar} (U_t H - H U_t) f. \\ \mathbf{(Z_2)} \quad \frac{\partial}{\partial t} U_t &= \frac{2\pi i}{\hbar} (U_t H - H U_t). \end{aligned}$$

Wenn nun U_t nicht ein Zustand ist, sondern ein Gemisch mehrerer Zustände, etwa $P_{[\varphi_1^{(1)}]}, P_{[\varphi_1^{(2)}]}, \dots$ mit den bzw. Gewichten w_1, w_2, \dots , so muß es sich so ändern, wie es aus den Änderungen der $P_{[\varphi_1^{(1)}]}, P_{[\varphi_1^{(2)}]}, \dots$ folgt — durch Addition der entsprechenden Gleichungen $\mathbf{Z_2}$. erkennt man, daß $\mathbf{Z_2}$. auch für diese U_t gilt. Da nun alle U solche Gemische sind, oder Grenzfälle solcher (z. B. ist jedes U mit endlicher Spur U ein solches Gemisch), können wir die Allgemeingültigkeit von $\mathbf{Z_2}$. in Anspruch nehmen.

In $\mathbf{Z_2}$. darf übrigens, ebenso wie in der Schrödingerschen Differentialgleichung $\mathbf{Z_1}$., H auch von t abhängen — aber wenn das nicht der Fall ist, so können wir die expliziten Lösungen angeben. Und zwar für $\mathbf{Z_1}$., wie wir schon wissen,

$$\mathbf{(Z'_1)} \quad \varphi_t = e^{-\frac{2\pi i}{\hbar} t \cdot H} \varphi_0,$$

und für $\mathbf{Z_2}$.

$$\mathbf{(Z'_2)} \quad U_t = e^{-\frac{2\pi i}{\hbar} t \cdot H} U_0 e^{\frac{2\pi i}{\hbar} t H}.$$

(Man verifiziert leicht, daß dies Lösungen sind, sowie daß sie auseinander gefolgert werden können. Daß es nur eine Lösung bei gegebenen Anfangswerten φ_0 bzw. U_0 gibt, ist klar: die Differentialgleichungen $\mathbf{Z_1}$., $\mathbf{Z_2}$. sind ja von erstem Grade in t).

Wir haben also zwei grundverschiedene Arten von Eingriffen, die an einem System \mathbf{S} oder an einer Gesamtheit $[\mathbf{S_1}, \dots, \mathbf{S_N}]$ vorgenommen werden können. Erstens die willkürlichen Veränderungen durch Messungen, die durch die Formel

$$\mathbf{(1)} \quad U \rightarrow U' = \sum_1^{\infty} (U \varphi_n, \varphi_n) \cdot P_{[\varphi_n]}$$

($\varphi_1, \varphi_2, \dots$ ein vollständiges normiertes Orthogonalsystem, vgl. w. o.) wiedergegeben werden. Zweitens die automatischen Veränderungen durch den Zeitablauf, die durch die Formel

$$\mathbf{(2)} \quad U \rightarrow U_t = e^{-\frac{2\pi i}{\hbar} t H} U e^{\frac{2\pi i}{\hbar} t H}$$

(H der Energieoperator, t die Zeit; H ist von t unabhängig) wiedergegeben werden. Hängt H von t ab, so zerlege man das betrachtete Zeitintervall in kleine Zeitintervalle, in denen sich H nicht — oder nur sehr wenig — ändert, und wende **2.** auf diese einzeln an: die Superposition ergibt das Endresultat.

Mit diesen zwei Arten des Eingriffes, ihrer Natur und ihrem Verhältnis zueinander, müssen wir uns nunmehr genau auseinandersetzen.

Erstens ist es auffallend, daß in **2.** die Zeitabhängigkeit von H zugelassen ist (in der dort beschriebenen Weise), so daß man eigentlich glauben sollte, daß bereits **2.** genügt, um den durch eine Messung bewirkten Eingriff zu beschreiben: ein physikalischer Eingriff kann ja nichts anderes sein als die zeitweise Einschaltung gewisser energetischer Kopplungen ins betrachtete System, d. h. die Einführung einer geeigneten (vom Beobachter vorgeschriebenen) Zeitabhängigkeit von H . Warum brauchen wir dann den besonderen Vorgang **1.** für die Messung? Der Grund ist dieser: Bei der Messung können wir das System S nicht für sich allein betrachten, wir müssen vielmehr, um seine Wechselwirkung mit der Meßvorrichtung M rechnerisch verfolgen zu können, das System $S + M$ untersuchen. Die Theorie der Messung ist ja eine $S + M$ betreffende Aussage, soll sie doch angeben, wie der Zustand von S mit gewissen Eigenschaften des Zustandes von M (nämlich den Stellungen gewisser Zeiger, da der Beobachter diese abliest) zusammenhängt. Es ist übrigens ziemlich willkürlich, ob man nicht auch den Beobachter zu M dazurechnet, und an Stelle des Zusammenhanges zwischen dem S -Zustande und den Zeigerstellungen in M nicht lieber denjenigen mit den chemischen Veränderungen in seinem Auge oder gar in seinem Gehirne (d. h. dem, was er „gesehen“ oder „apperzipiert“ hat) setzt. Wir werden dies in VI. 1. noch genauer untersuchen. Jedenfalls kommt also die Anwendung von **2.** nur für $S + M$ in Frage, allerdings müssen wir zeigen, daß diese für S dasselbe ergibt wie die direkte Anwendung von **1.** auf S . Erst wenn dies geglückt ist, haben wir eine einheitliche Betrachtungsweise der physikalischen Welt auf quantenmechanischer Grundlage gewonnen. Wir verschieben die Diskussion dieser Frage bis VI. 3.

Zweitens ist bei **1.** zu bemerken, daß wir wiederholt darauf hinweisen, daß eine Messung im Sinne von **1.** augenblicklich sein muß, d. h. in einer so kurzen Zeit durchgeführt, daß die durch **2.** bedingte Änderung von U noch nicht bemerkbar wird. (Wollte man dies dadurch richtigstellen, daß man nach **2.** das geänderte U_t berechnet, so würde man doch nichts gewinnen: denn um irgendein U_t zu verwenden, muß man t , den Augenblick der Messung, genau kennen — d. h. die Zeitdauer der Messung müßte doch kurz sein.) Dies ist nun prinzipiell bedenklich, denn es ist wohlbekannt, daß es eine Größe

gibt, die in der klassischen Mechanik im Verhältnis der Kanonisch-konjugierten zur Zeit steht: die Energie¹⁸⁰. Daher ist zu erwarten, daß für das kanonisch-konjugierte Paar Zeit-Energie ähnliche Unbestimmtheitsrelationen gelten wie für das Paar cartesische Koordinate-Impuls¹⁸¹. Auch die spezielle Relativitätstheorie zeigt, daß eine weitgehende Analogie bestehen muß: bilden doch die 3 räumlichen Koordinaten mit der Zeit ebenso einen „Vierervektor“ wie die 3 räumlichen Impulse mit der Energie. Eine solche Unbestimmtheitsrelation würde bedeuten, daß es nicht gelingen kann, eine sehr genaue Energiemessung in sehr kurzer Zeit durchzuführen — und zwar sollte man für den Meßfehler ε und die Zeitdauer τ eine Beziehung von der Form

$$\varepsilon \tau \sim h$$

erwarten. Eine, der in III. 4. für p, q durchgeführten ähnliche, physikalische Diskussion führt tatsächlich zu diesem Resultat¹⁸¹. Ohne auf Einzelheiten einzugehen, sei hier bloß der Fall eines Lichtquants angeführt: seine Energieunsicherheit ε ist wegen der Bohrschen Frequenzbeziehung der h -fachen Frequenzunsicherheit, $h \Delta \nu$, gleich; $\Delta \nu$ aber, wie wir in Anm. ¹³⁷ diskutierten, bestenfalls seine reziproke Zeitdauer, $\frac{1}{\tau}$, also $\varepsilon \gtrsim \frac{h}{\tau}$ — und die Messung muß sich, um die Monochromasie des Lichtquants im ganzen Zeitintervalle τ festzustellen, über dieses ganze Zeitintervall erstrecken. Der Fall des Lichtquants ist aber charakteristisch, da die atomaren Energieniveaus in der Regel aus der Frequenz der entsprechenden Spektrallinien bestimmt werden. Da sich nun die Energie so verhält, ist auch bei anderen Größen \mathfrak{N} ein Zusammenhang zwischen der Genauigkeit und der Dauer der Messung möglich. Wie ist dann unsere Annahme augenblicklicher Messungen zu rechtfertigen?

Vor allem ist zuzugeben, daß dieser Einwand eine wesentliche Schwäche, ja die Hauptschwäche, der Quantenmechanik trifft: ihren unrelativistischen, die Zeit t vor den 3 räumlichen Koordinaten x, y, z auszeichnenden, und einen objektiven Gleichzeitigkeitsbegriff voraussetzenden Charakter. In der Tat: während sonst alle anderen Größen (insbesondere die durch die Lorentztransformation mit t aufs engste verknüpften x, y, z) durch Operatoren repräsentiert werden, entspricht der Zeit, wie in der klassischen Mechanik, ein gewöhnlicher Zahlenparameter t . Oder: ein aus 2 Teilchen bestehendes System hat eine Wellenfunktion, die von ihren $2 \times 3 = 6$ räumlichen Koordinaten abhängt, und nur von einer Zeit t , obwohl wegen der Lorentztransformation 2 Zeiten erwünscht wären. Mit diesem unrelativistischen Charakter der Quantenmechanik mag es also zusammenhängen, daß wir die naturgesetzliche Mindestdauer der Messungen ignorieren konnten — dies ist eine Erklärung, aber keine erfreuliche!

Ein genaueres Eingehen auf die Frage zeigt indessen, daß die Situation doch nicht so schlimm ist. Denn was wir in Wahrheit brauchen, ist gar nicht, daß t klein sei, sondern nur, daß es bei der Berechnung der Wahrscheinlichkeiten $(U\varphi_n, \varphi_n)$ — und also bei der Bildung von

$U' = \sum_1^{\infty} (U\varphi_n, \varphi_n) P_{[\varphi_n]}$ — nicht viel ausmacht, ob wir von U selbst

ausgegangen sind oder von einem $U_t = e^{-\frac{2\pi i}{\hbar} t H} U e^{\frac{2\pi i}{\hbar} t H}$. Dies können wir nun wegen

$$(U_t \varphi_n, \varphi_n) = (e^{-\frac{2\pi i}{\hbar} t H} U e^{\frac{2\pi i}{\hbar} t H} \varphi_n, \varphi_n) = (U e^{\frac{2\pi i}{\hbar} t H} \varphi_n, e^{\frac{2\pi i}{\hbar} t H} \varphi_n),$$

z. B. dadurch erreichen, daß wir H durch geeignete Störungsenergien so verändern, daß sich $e^{\frac{2\pi i}{\hbar} t H} \varphi_n$ von φ_n nur um einen konstanten Faktor vom Absolutwert 1 unterscheidet. D. h. der Zustand φ_n soll unter dem Einfluß von \mathcal{Z} . wesentlich konstant sein, d. h. ein stationärer Zustand; oder auch $H\varphi_n$ gleich einer reellen Konstante mal φ_n , d. h. φ_n Eigenfunktion von H . Auf den ersten Blick mag eine solche Veränderung des Energieoperators H , die die Eigenfunktionen von R stationär, also zu Eigenfunktionen von H macht (d. h. R, H vertauschbar), als unplausibel erscheinen. In Wahrheit ist sie es aber nicht, und man kann sich sogar klarmachen, daß die typischen Meßanordnungen gerade diese Beeinflussung von H bezwecken.

In der Tat endet jede Messung damit, daß ein Lichtquant oder ein Massenpunkt mit einer gewissen Energie in einer gewissen Richtung fortfliegt, und durch diese seine Kennzeichen, d. h. durch seine Impulse, das Meßresultat angibt; oder daß ein Massenpunkt (z. B. ein Zeiger auf einer Skala) zur Ruhe kommt, und seine cartesischen Koordinaten das Meßresultat angeben. Beim Lichtquant ist also, in der Terminologie von III. 6., die Angabe dessen, welches $M_n = 1$ ist (die übrigen sind $= 0$), d. h. die Angabe aller M_1, M_2, \dots -Werte der zu messenden Größe gleichwertig; beim fortfliegenden Massenpunkt die Angabe seiner 3 Impulskomponenten P^x, P^y, P^z ; beim ruhenden Massenpunkt die Angabe seiner 3 cartesischen Koordinaten x, y, z , oder, wie wir ihre Operatoren nannten, Q^x, Q^y, Q^z . Nun ist aber die Messung nur dann wirklich vollzogen, wenn Lichtquant bzw. Massenpunkt wirklich „fort“-geflogen sind, d. h. das Licht keiner Absorptionsgefahr bzw. der Massenpunkt keiner Ablenkung durch potentielle Energien ausgesetzt ist, bzw. wenn der ruhende Massenpunkt wirklich ruht, wozu eine große Masse erforderlich ist¹⁸². (Letzteres schon wegen der Unbestimmtheitsrelation, da die Geschwindigkeit nahe 0 sein muß, also ihre Streuung klein, obwohl ihr Produkt mit der Masse, der Impuls, wegen der kleinen Koordinatenstreuung stark streut. Tatsächlich sind die Zeiger makroskopische Objekte, d. h. enorm.) Nun ist der Energieoperator H , soweit

er das Lichtquant angeht, nach III. 6.

$$\sum_1^{\infty} h \varrho_n \cdot M_n + \sum_1^{\infty} \sum_1^{\infty} w_{kj}^n \left(\sqrt{M_n + 1} \cdot \binom{k \rightarrow j}{M_n \rightarrow M_n + 1} + \sqrt{M_n} \cdot \binom{k \rightarrow j}{M_n \rightarrow M_n - 1} \right);$$

bei den beiden Massenpunktbeispielen dagegen

$$\frac{(P^x)^2 + (P^y)^2 + (P^z)^2}{2m} + V(Q^x, Q^y, Q^z)$$

(m die Masse, V die potentielle Energie). Unsere Kriterien besagen: die w_{kj}^n sollen verschwinden, bzw. V soll konstant sein, bzw. m soll sehr groß sein. Dies bewirkt aber gerade, daß die M_n , bzw. P^x, P^y, P^z , bzw. Q^x, Q^y, Q^z mit dem oben angegebenen H vertauschbar werden.

Zum Abschluß dieser Diskussion sei noch erwähnt, daß das Stationärmachen der eigentlich interessierenden Zustände (hier der $\varphi_1, \varphi_2, \dots$) in der theoretischen Physik auch sonst eine Rolle spielt. Die bei physikalisch-chemischen „Gedankenexperimenten“ oft unvermeidliche Annahme über die Möglichkeit des Unterbrechens chemischer Reaktionen (des „Vergiftens“) ist von dieser Natur¹⁸³.

Die beiden Eingriffe **1.** und **2.** sind voneinander grundsätzlich verschieden. Daß beide der Form nach eindeutig, d. h. kausal sind, ist unwesentlich: denn da wir die statistischen Eigenschaften von Gemischen betrachten, ist es nicht überraschend, daß jede Änderung, auch wenn sie statistisch ist, eine kausale Änderung der Wahrscheinlichkeiten und Erwartungswerte bewirkt. Aus diesem Grunde führt man ja statistische Gesamtheiten und Wahrscheinlichkeiten ein! Wichtig ist dagegen, daß **2.** die in U bestehende statistische Unsicherheit nicht erhöht, wohl aber **1.** Zustände in Zustände über

$$\left(P_{[\varphi]} \text{ in } P_{\left[e^{-\frac{2\pi i}{h} t H} \varphi \right]} \right),$$

während **1.** Zustände sehr wohl in Gemische verwandeln kann. In diesem Sinne ist also die Entwicklung eines Zustandes nach **1.** statistisch, aber nach **2.** kausal.

Ferner ist **2.** bei festem H und t einfach eine unitäre Transformation aller U : $U_t = A U A^{-1}$, $A = e^{-\frac{2\pi i}{h} t H}$ unitär. D. h. $Uf = g$ bedeutet $U_t(Af) = Ag$, so daß U_t aus U durch die unitäre Transformation A des Hilbertschen Raumes hervorgeht, also durch einen Isomorphismus, der alle unsere geometrischen Grundbegriffe invariant läßt (vgl. die in I. 4. auseinandergesetzten Prinzipien). Daher ist es reversibel: es genügt A durch A^{-1} zu ersetzen — und dies ist möglich, da A, A^{-1} bei der weitgehenden Willkür in der Wahl von H, t als ganz beliebige unitäre Operatoren angesehen werden können. Ebenso wie die klassische

Mechanik gibt also **2.** eine der wesentlichsten und auffallendsten Eigenschaften der wirklichen Welt nicht wieder: nämlich ihre Irreversibilität, den fundamentalen Unterschied der Zeitrichtungen „Zukunft“ und „Vergangenheit“.

Prinzipiell anders verhält sich **1.**: der Übergang

$$U \rightarrow U' = \sum_1^{\infty} (U \varphi_n, \varphi_n) P_{[\varphi_n]}$$

ist nicht ohne weiteres umzukehren. Wir werden bald sehen, daß er überhaupt irreversibel ist: in dem Sinne, daß es im allgemeinen nicht einmal gelingt, von einem gegebenen U' durch wiederholtes Anwenden irgendwelcher Prozesse **1.**, **2.** jemals zu seinem U zurückzukommen!

Damit sind wir an demjenigen Punkt angelangt, an dem es motiviert ist, die thermodynamische Betrachtungsweise heranzuziehen, denn sie allein ermöglicht es, den Unterschied von **1.** und **2.**, in den Reversibilitätsfragen offenbar hineinspielen, richtig zu verstehen.

2. Thermodynamische Betrachtungen.

Wir werden die Thermodynamik der quantenmechanischen Gesamtheiten nach zwei verschiedenen Gesichtspunkten untersuchen. Zuerst setzen wir die Gültigkeit der beiden Hauptsätze der Thermodynamik voraus, d. h. die Unmöglichkeit des Perpetuum mobile erster und zweiter Art (Energiesatz und Entropiesatz)¹⁸⁴, und berechnen daraus die Entropie für jede Gesamtheit. Hierbei werden die normalen Mittel der phänomenologischen Thermodynamik angewandt, die Quantenmechanik spielt nur insoweit eine Rolle, als sich unsere thermodynamischen Betrachtungen auf solche Objekte beziehen, deren Verhalten durch die Gesetze der Quantenmechanik geregelt wird (unsere Gesamtheiten sowie ihre statistischen Operatoren U) — die Richtigkeit der beiden Hauptsätze wird aber vorausgesetzt und nicht bewiesen. Nachher werden wir die Gültigkeit der Hauptsätze in der Quantenmechanik beweisen, und zwar kommt, da der Energiesatz ohnehin gilt, nur der Entropiesatz in Frage. D. h. wir werden zeigen, daß die Eingriffe **1.**, **2.** die nach der ersten Methode berechnete Entropie niemals verringern. Diese Reihenfolge mag etwas unnatürlich erscheinen, sie ist aber dadurch begründet, daß wir erst durch die phänomenologisch-thermodynamische Diskussion diejenige Übersicht über das Problem gewinnen, die für die Überlegungen der zweiten Art erforderlich ist.

Wir beginnen also mit der phänomenologischen Betrachtung, die uns übrigens auch ein bekanntes Paradoxon der klassischen Thermodynamik aufzulösen gestatten wird. Gleich hier sei darauf verwiesen, daß der abenteuerliche Charakter unserer „Gedankenexperimente“, d. h. ihre praktische Undurchführbarkeit, ihrer Beweiskraft keinen Ab-

bruch tut: im Sinne der phänomenologischen Thermodynamik ist jeder denkbare Prozeß beweiskräftig, wenn er die Hauptsätze nicht verletzt.

Das Ziel ist, die Entropie einer Gesamtheit $[\mathbf{S}_1, \dots, \mathbf{S}_N]$ mit dem statistischen Operator U zu bestimmen, wobei U als richtig normiert vorausgesetzt werde, d. h. Spur $U = 1$. In der Ausdrucksweise der klassischen statistischen Mechanik haben wir hier mit einer Gibbsschen Gesamtheit zu tun: d. h. Statistik und Thermodynamik beziehen sich nicht auf die (wechselwirkenden) Bestandteile eines einzigen, sehr komplizierten, mechanischen Systems mit vielen (nur mangelhaft bekannten) Freiheitsgraden¹⁸⁵ — sondern auf eine Gesamtheit von sehr vielen mechanischen Systemen, deren jedes schon für sich allein eine unübersehbar hohe Zahl von Freiheitsgraden haben kann (aber nicht muß), und die vollkommen voneinander getrennt und wechselwirkungslos zu denken sind¹⁸⁶. Infolge der völligen Getrenntheit der Systeme $\mathbf{S}_1, \dots, \mathbf{S}_N$, und der Tatsache, daß wir auf sie die rein abzählenden Methoden der Wahrscheinlichkeitsrechnung anwenden wollen, ist es unzweifelhaft, daß die gewöhnliche Wahrscheinlichkeitsrechnung zu verwenden ist — und daß die davon abweichenden Zählweisen von BOSE-EINSTEIN und FERMI-DIRAC, die bei gewissen Gesamtheiten ununterscheidbarer und wechselwirkender Individuen (nämlich bei Lichtquanten bzw. Elektronen und Protonen, vgl. III. 6., insbesondere Anm. ¹⁴⁷) am Platze sind, hier nicht in Frage kommen.

Die von EINSTEIN eingeführte Methode zur thermodynamischen Behandlung solcher Gesamtheiten $[\mathbf{S}_1, \dots, \mathbf{S}_N]$ ist die folgende¹⁸⁷: Man sperrt jedes System $\mathbf{S}_1, \dots, \mathbf{S}_N$ in je einen Kasten $\mathbf{K}_1, \dots, \mathbf{K}_N$ ein, dessen Wände gegen alle Wirkungsübertragungen undurchlässig sind — was wegen der Wechselwirkungslosigkeit dieser Systeme zulässig ist. Ferner soll jeder Kasten eine sehr große Masse haben, damit die evtl. Zustands- (und damit Energie-, also Massen-) Änderungen der $\mathbf{S}_1, \dots, \mathbf{S}_N$ ihre Massen nur wenig beeinflussen. Auch werden ihre Geschwindigkeiten dadurch in den auszuführenden Gedankenexperimenten so klein sein, daß wir unrelativistisch rechnen dürfen. Diese Kästen $\mathbf{K}_1, \dots, \mathbf{K}_N$ bringen wir ihrerseits in einem sehr großen Kasten $\bar{\mathbf{K}}$ unter (d. h. das Volum \mathcal{V} von $\bar{\mathbf{K}}$ soll viel größer sein als die Summe der Volumina der $\mathbf{K}_1, \dots, \mathbf{K}_N$), der Einfachheit halber sollen in $\bar{\mathbf{K}}$ keine Kraftfelder bestehen (insbesondere soll es also fern von allen Gravitationsfeldern sein und so groß, daß die Massen der $\mathbf{K}_1, \dots, \mathbf{K}_N$ keine Wirkung haben). Die $\mathbf{K}_1, \dots, \mathbf{K}_N$ (welche bzw. $\mathbf{S}_1, \dots, \mathbf{S}_N$ enthalten) können wir daher als Moleküle eines Gases ansehen, das in den großen Kasten $\bar{\mathbf{K}}$ eingeschlossen ist. Wenn wir nun $\bar{\mathbf{K}}$ mit einem sehr großen Wärmereservoir von der Temperatur \mathbf{T} in Kontakt bringen, so werden die Wände von $\bar{\mathbf{K}}$ ebenfalls diese Temperatur annehmen, und ihre (wirklichen) Moleküle in die entsprechende Brownsche Bewegung geraten. Daher

werden sie den nächstliegenden $\mathbf{K}_1, \dots, \mathbf{K}_N$ Impulse übergeben, wodurch diese in Bewegung geraten, und auch den übrigen $\mathbf{K}_1, \dots, \mathbf{K}_N$ Impulse übergeben. Bald werden alle $\mathbf{K}_1, \dots, \mathbf{K}_N$ in Bewegung sein, an den Wänden von $\bar{\mathbf{K}}$ Impulse mit den Wandmolekülen und durch Zusammenstöße untereinander (im Inneren von $\bar{\mathbf{K}}$) Impulse miteinander austauschen. Der stationäre Gleichgewichtszustand dieser Bewegungen wird erst erreicht sein, wenn die $\mathbf{K}_1, \dots, \mathbf{K}_N$ jene Geschwindigkeitsverteilung angenommen haben, die mit der Brownschen Bewegung der Wandmoleküle (von der Temperatur \mathbf{T}) im Gleichgewicht ist — d. h. die Maxwellsche Geschwindigkeitsverteilung eines Gases von der Temperatur \mathbf{T} , als dessen „Moleküle“ die $\mathbf{K}_1, \dots, \mathbf{K}_N$ anzusehen sind¹⁸⁸. Wir können also sagen: das $[\mathbf{S}_1, \dots, \mathbf{S}_N]$ -Gas hat die Temperatur \mathbf{T} angenommen. Der Kürze halber wollen wir übrigens im folgenden die Gesamtheit $[\mathbf{S}_1, \dots, \mathbf{S}_N]$ mit dem statistischen Operator U die U -Gesamtheit nennen, und das $[\mathbf{S}_1, \dots, \mathbf{S}_N]$ -Gas das U -Gas.

Der Grund, daß wir uns mit einem solchen Gase beschäftigen, ist der, daß wir die Entropiedifferenz der U -Gesamtheit und der V -Gesamtheit (U, V definite Operatoren, mit der Spur 1, die entsprechenden Gesamtheiten seien $[\mathbf{S}_1, \dots, \mathbf{S}_N]$ bzw. $[\mathbf{S}'_1, \dots, \mathbf{S}'_N]$) nach Definition dadurch bestimmen müssen, daß wir die erstere reversibel in die letztere verwandeln¹⁸⁹, und dies gelingt am besten auf dem Umweg über das U - bzw. V -Gas. Wir behaupten nämlich: der Entropieunterschied von U - und V -Gesamtheit ist genau derselbe wie derjenige von U - und V -Gas — wenn beide bei derselben Temperatur \mathbf{T} betrachtet werden, die aber sonst beliebig sein darf. Wenn \mathbf{T} sehr nahe 0 ist, so ist dies offenbar beliebig genau der Fall: denn der Unterschied zwischen U -Gesamtheit und dem U -Gas von der Temperatur 0 verschwindet, weil die $\mathbf{K}_1, \dots, \mathbf{K}_N$ des letzteren gar keine Eigenbewegung haben, und die Anwesenheit der ruhenden Kästen $\mathbf{K}_1, \dots, \mathbf{K}_N, \bar{\mathbf{K}}$ thermodynamisch unwesentlich ist (entsprechend für V). Daher sind wir am Ziele, wenn wir zeigen, daß sich bei einer gegebenen Änderung von \mathbf{T} die Entropie des U -Gases um ebensoviel ändert wie diejenige des V -Gases. Die Entropieänderung eines Gases, wenn es von \mathbf{T}_1 auf \mathbf{T}_2 erwärmt wird, hängt nur von seiner calorischen Zustandsgleichung, genauer von seinen spezifischen Wärmen ab¹⁹⁰ — natürlich darf hierbei die Idealität des Gases nicht angenommen werden, falls, wie in unserem Falle, \mathbf{T}_1 nahe 0 gewählt werden muß¹⁹¹. Dagegen ist es sicher, daß beide Gase (U und V) dieselbe Zustandsgleichung und dieselben spezifischen Wärmen haben: denn gaskinetisch dominieren die Kästen $\mathbf{K}_1, \dots, \mathbf{K}_N$ und verdecken die Systeme $\mathbf{S}_1, \dots, \mathbf{S}_N$ bzw. $\mathbf{S}'_1, \dots, \mathbf{S}'_N$, die in sie eingeschlossen sind, vollkommen. Bei diesem Erwärmungsprozeß wird also der Unterschied von U und V nicht bemerkbar, und die beiden Entropieunterschiede stimmen, wie behauptet, überein. Im folgenden

werden wir daher nur noch die U - bzw. V -Gase miteinander vergleichen, und wir werden die Temperatur T so hoch wählen, daß diese als ideale Gase angesehen werden können¹⁹². Dadurch beherrschen wir ihr gasinetisches Verhalten vollkommen, und wir können uns der eigentlichen Aufgabe zuwenden: das U -Gas reversibel ins V -Gas überzuführen. Hierbei werden wir, im Gegensatz zu den bisher verwendeten Prozessen, auch auf die im Inneren der K_1, \dots, K_N befindlichen S_1, \dots, S_N einwirken müssen — d. h. wir werden die Kästen K_1, \dots, K_N „öffnen“ müssen.

Zunächst zeigen wir, daß alle Zustände, $U = P_{[\varphi]}$, dieselbe Entropie haben, d. h. daß die reversible Überführung der $P_{[\varphi]}$ -Gesamtheit in die $P_{[\psi]}$ -Gesamtheit ohne Verbrauch oder Entwicklung von Wärmeenergie gelingt (mechanische Energie muß natürlich verbraucht oder erzeugt werden, wenn der Erwartungswert der Energie in $P_{[\varphi]}$ ein anderer ist als in $P_{[\psi]}$), vgl. Anm. ¹⁸⁵. Und zwar werden wir hierzu die soeben betrachteten Gase nicht einmal heranziehen müssen: diese Überführung gelingt auch bei der Temperatur 0, d. h. mit den Gesamtheiten selbst. Es sei noch erwähnt, daß wir, sobald dies bewiesen ist, die Entropien der U -Gesamtheiten so normieren können und werden, daß alle Zustände die Entropie 0 haben.

Übrigens braucht die oben beschriebene Umwandlung von $P_{[\varphi]}$ in $P_{[\psi]}$ gar nicht reversibel zu sein: denn wenn sie es nicht ist, so muß der Entropieunterschied \geq sein als der in Anm. ¹⁸⁵ angegebene Ausdrück (vgl. a. a. O. Anm. ¹⁸⁵), also ≥ 0 ; Vertauschen von $P_{[\varphi]}$, $P_{[\psi]}$ ergibt ebenso, daß er ≤ 0 ist — daher ist er doch = 0.

Das einfachste Verfahren wäre, die zeitabhängige Schrödingersche Differentialgleichung, d. h. unseren Prozeß 2. heranzuziehen, wozu ein Energieoperator H und ein Zahlenwert von t gefunden werden müßten, so daß der unitäre Operator $e^{-\frac{2\pi i}{h}tH}$ φ in ψ überführt. Dann würde in t Sekunden $P_{[\varphi]}$ von selbst in $P_{[\psi]}$ übergehen, der Prozeß ist sogar reversibel, und von Wärme ist dabei keine Rede gewesen (vgl. V. 1.). Wir ziehen es aber vor, Annahmen über die möglichen Formen von Energieoperatoren H zu vermeiden, und den Prozeß 1., d. h. messungsähnliche Eingriffe, allein zu verwenden. Das Einfachste, woran man denken könnte, wäre, an der Gesamtheit $P_{[\varphi]}$ eine Größe \mathfrak{N} zu messen, deren Operator R ein reines Punktspektrum mit lauter einfachen Eigenwerten $\lambda_1, \lambda_2, \dots$ hat, wobei ψ unter ihren Eigenfunktionen ψ_1, ψ_2, \dots vorkommen möge: etwa $\psi_1 = \psi$. Denn da der Zustand φ durch diese Messung in ein Gemisch der Zustände ψ_1, ψ_2, \dots entsteht, kommt dabei u. a. auch ψ zustande. Indessen ist dies unzweckmäßig, denn $\psi_1 = \psi$ entsteht nur mit der Wahrscheinlichkeit $|(\varphi, \psi)|^2$, während der Anteil $1 - |(\varphi, \psi)|^2$ in andere Zustände übergeht, und dies ist für zueinander orthogonale φ, ψ sogar alles. Dennoch führt ein verwandtes

Verfahren ans Ziel: wir werden durch sukzessives Ausführen einer großen Zahl verschiedener Messungen $P_{[\varphi]}$ in eine solche Gesamtheit verwandeln, die sich beliebig wenig von $P_{[\psi]}$ unterscheidet. Daß alle diese Operationen irreversibel sind (oder wenigstens sein können) ist, wie wir w. o. diskutierten, unwesentlich.

Wir nehmen φ, ψ orthogonal an, da wir sonst ein zu beiden orthogonales χ ($||\chi|| = 1$) wählen, und von φ zu χ , dann von χ zu ψ übergehen könnten. Sei nun $k = 1, 2, \dots$ eine Zahl k , über die noch verfügt werden soll, wir setzen $\psi^{(\nu)} = \cos \frac{\pi \nu}{2k} \cdot \varphi + \sin \frac{\pi \nu}{2k} \cdot \psi$ ($\nu = 0, 1, \dots, k$), es ist offenbar $\psi^{(0)} = \varphi, \psi^{(k)} = \psi$, und stets $||\psi^{(\nu)}|| = 1$. Jedes $\psi^{(\nu)}$ ($\nu = 1, \dots, k$) erweitern wir zu einem vollständigen normierten Orthogonalsystem $\psi_1^{(\nu)}, \psi_2^{(\nu)}, \dots$ mit $\psi_1^{(\nu)} = \psi^{(\nu)}$; $R^{(\nu)}$ sei ein Operator mit einem reinen Punktspektrum und lauter verschiedenen Eigenwerten, etwa $\lambda_1^{(\nu)}, \lambda_2^{(\nu)}, \dots$, dessen Eigenfunktionen die $\psi_1^{(\nu)}, \psi_2^{(\nu)}, \dots$ sind, $\mathfrak{N}^{(\nu)}$ die entsprechende Größe. Wir bemerken noch, daß $(\psi^{(\nu-1)}, \psi^{(\nu)}) = \cos \frac{\pi(\nu-1)}{2k} \cos \frac{\pi \nu}{2k} + \sin \frac{\pi(\nu-1)}{2k} \sin \frac{\pi \nu}{2k} = \cos \left(\frac{\pi \nu}{2k} - \frac{\pi(\nu-1)}{2k} \right) = \cos \frac{\pi}{2k}$ ist.

Nun messen wir an der Gesamtheit mit $U^{(0)} = P_{[\varphi^{(0)}]} = P_{[\varphi]}$ die Größe $\mathfrak{N}^{(1)}$, wodurch etwa $U^{(1)}$ entstehe, sodann an $U^{(1)}$ die Größe $\mathfrak{N}^{(2)}$, wodurch etwa $U^{(2)}$ entstehe, ..., schließlich an $U^{(k-1)}$ die Größe $\mathfrak{N}^{(k)}$, wodurch etwa $U^{(k)}$ entstehe. Daß $U^{(k)}$ für hinreichend großes k beliebig nahe bei $P_{[\psi^{(k)}]} = P_{[\psi]}$ liegt, kann man sich anschaulich so klar machen: Wenn wir $\mathfrak{N}^{(\nu)}$ an $\psi^{(\nu-1)}$ messen, geht der Bruchteil $|\langle \psi^{(\nu-1)}, \psi^{(\nu)} \rangle|^2 = \left(\cos \frac{\pi}{2k} \right)^2$ in $\psi^{(\nu)}$ über, bei der sukzessiven Messung von $\mathfrak{N}^{(1)}, \mathfrak{N}^{(2)}, \dots, \mathfrak{N}^{(k)}$ wird also aus $\psi^{(0)} = \varphi$ über $\psi^{(1)}, \psi^{(2)}, \dots, \psi^{(k-1)}$ in $\psi = \psi^{(k)}$ mindestens der Bruchteil $\left(\cos \frac{\pi}{2k} \right)^{2k}$ übergehen. Und da für $k \rightarrow \infty$ $\left(\cos \frac{\pi}{2k} \right)^{2k} \rightarrow 1$, entsteht so fast nur ψ , wenn k groß genug ist. Der exakte Beweis verläuft so: Da der Prozeß $\mathbf{1}$. die Spur nicht ändert, ist wegen $\text{Spur } U^{(0)} = \text{Spur } P_{[\varphi]} = 1$ $\text{Spur } U^{(1)} = \text{Spur } U^{(2)} = \dots = \text{Spur } U^{(j)} = 1$. Andererseits ist

$$\begin{aligned} (U^{(\nu)} f, f) &= \sum_n (U^{(\nu-1)} \psi_n^{(\nu)}, \psi_n^{(\nu)}) (P_{[\psi_n^{(\nu)}]} f, f) \\ &= \sum_n (U^{(\nu-1)} \psi_n^{(\nu)}, \psi_n^{(\nu)}) |\langle \psi_n^{(\nu)}, f \rangle|^2, \end{aligned}$$

also für $\nu = 1, \dots, k-1$, $f = \psi_1^{(\nu+1)} = \psi^{(\nu+1)}$ bzw. $\nu = k$, $f = \psi_1^{(k)} = \psi^{(k)} = \psi$

$$\begin{aligned} (U^{(\nu)} \psi^{(\nu+1)}, \psi^{(\nu+1)}) &\geq (U^{(\nu-1)} \psi^{(\nu)}, \psi^{(\nu)}) |\langle \psi^{(\nu)}, \psi^{(\nu+1)} \rangle|^2 \\ &= \left(\cos \frac{\pi}{2k} \right)^2 \cdot (U^{(\nu-1)} \psi^{(\nu)}, \psi^{(\nu)}), \end{aligned}$$

$$(U^{(k)} \psi^{(k)}, \psi^{(k)}) = (U^{(k-1)} \psi^{(k)}, \psi^{(k)}).$$

Zusammen mit

$$(U^{(0)} \psi^{(1)}, \psi^{(1)}) = (P_{[\psi^{(0)}]} \psi^{(1)}, \psi^{(1)}) = |(\psi^{(0)}, \psi^{(1)})|^2 = \left(\cos \frac{\pi}{2k} \right)^2$$

ergibt das

$$(U^{(j)} \psi, \psi) \geq \left(\cos \frac{\pi}{2k} \right)^{2k}.$$

Wegen $\text{Spur } U^{(k)} = 1$ und $\left(\cos \frac{\pi}{2k} \right)^{2k} \rightarrow 1$ für $k \rightarrow \infty$ können wir das in II. 11. gewonnene Resultat anwenden: $U^{(k)}$ konvergiert gegen $P_{[\psi]}$. Damit ist das Ziel erreicht.

Das Nächste, was wir diskutieren müssen, ist die Frage, wieweit wir uns eines Haupthilfsmittels der phänomenologisch-thermodynamischen „Gedankenexperimente“ auch bei quantenmechanischen Systemen bedienen dürfen: nämlich der sog. semipermeablen Wände.

In der phänomenologischen Thermodynamik gilt der Satz: wenn I und II zwei verschiedene Zustände desselben Systems S sind, so ist es zulässig, die Existenz einer solchen Wand anzunehmen, die für I vollkommen, und für II überhaupt nicht durchlässig ist¹⁹³ — dies ist sozusagen die thermodynamische Definition der Verschiedenheit, also auch der Gleichheit, von zwei Zuständen. Wie weit ist nun eine solche Annahme in der Quantenmechanik zulässig?

Wir zeigen zunächst: wenn $\varphi_1, \varphi_2, \dots, \psi_1, \psi_2, \dots$ ein normiertes Orthogonalsystem ist, so gibt es eine semipermeable Wand, die Systeme S in jedem der Zustände $\varphi_1, \varphi_2, \dots$ ungehindert durchläßt, und in jedem der Zustände ψ_1, ψ_2, \dots ungeändert reflektiert. Systeme, die in anderen Zuständen sind, können dagegen bei der Kollision mit der Wand sogar geändert werden.

Das System $\varphi_1, \varphi_2, \dots, \psi_1, \psi_2, \dots$ kann als vollständig angenommen werden, da es andernfalls durch weitere χ_1, χ_2, \dots zu einem vollständigen ergänzt werden könnte, die man dann etwa den $\varphi_1, \varphi_2, \dots$ zu zählt. Nun wählen wir einen Operator R mit einem reinen Punktspektrum und lauter einfachen Eigenwerten, $\lambda_1, \lambda_2, \dots, \mu_1, \mu_2, \dots$, deren Eigenfunktionen bzw. die $\varphi_1, \varphi_2, \dots, \psi_1, \psi_2, \dots$ sein mögen — und zwar seien die $\lambda_n < 0$ und die $\mu_n > 0$. Zu R gehöre die Größe \mathfrak{N} . In die Wand bauen wir viele Fenster ein, deren jedes wie folgt eingerichtet wird: Jedes Molekül K_1, \dots, K_N unseres Gases (wir betrachten jetzt wieder U -Gase, bei Temperaturen $T > 0$) wird dort festgehalten, geöffnet, am in ihm enthaltenen System S_1 bzw. ... bzw. S_N die Größe \mathfrak{N} gemessen, sodann der Kasten wieder zugemacht, und je nachdem, ob der gemessene Wert von $\mathfrak{N} < 0$ oder > 0 war, der Kasten mitsamt dem Inhalt bei unverändertem Impuls durch das Fenster hindurchgelassen bzw. reflektiert. Daß diese Vorrichtung den gewünschten Zweck erfüllt, ist klar — es bleibt nur zu diskutieren, welche Veränderungen in ihr nach solchen Kollisionen zurückbleiben, und in-

wieweit sie mit dem sog. „Maxwellschen Dämon“ der Thermodynamik verwandt ist oder nicht¹⁹⁴.

Zum ersten ist zu sagen: da die \mathfrak{R} -Messung u. U. den Zustand von \mathbf{S} , also evtl. auch seinen Energie-Erwartungswert, ändert, muß diese Differenz an mechanischer Energie im Sinne des ersten Hauptsatzes durch die Meßverrichtung aufgebracht bzw. aufgenommen werden. (Z. B. indem eine Feder eingebaut ist, die entspannt bzw. gespannt wird oder etwas Ähnliches.) Da es sich um einen rein automatisch funktionierenden Meßmechanismus handelt, und da nur mechanische (nicht Wärme-) Energien umgesetzt werden, treten hier gewiß keine Entropieänderungen auf, und das ist für uns jetzt allein wichtig. (Ist \mathbf{S} in einem der Zustände $\varphi_1, \varphi_2, \dots, \psi_1, \psi_2, \dots$, so ändert die \mathfrak{R} -Messung \mathbf{S} überhaupt nicht, und es bleiben darum im Meßapparat gar keine kompensierenden Veränderungen zurück.)

Der zweite Punkt ist bedenklicher, unsere Vorrichtung ist dem „Maxwellschen Dämon“, d. h. einer semipermeablen Wand, die von rechts kommende Moleküle durchläßt, und von links kommende reflektiert, ziemlich ähnlich. Schiebt man eine solche Wand in die Mitte eines Gas enthaltenden Behälters ein, so befindet sich alsbald alles Gas auf der linken Seite — d. h. das Volum wird ohne Entropieverbrauch halbiert. Dies bedeutet eine unkompenzierte Entropieabnahme des Gases, also kann eine solche Wand nach dem zweiten Hauptsatz nicht existieren. Immerhin unterscheidet sich unsere semipermeable Wand von dieser, thermodynamisch unzulässigen, ganz wesentlich: denn bei ihr wird nur auf innere Eigenschaften der „Moleküle“ $\mathbf{K}_1, \dots, \mathbf{K}_N$ Bezug genommen (d. i. der Zustand des darin eingeschlossenen \mathbf{S}_1 bzw. \dots bzw. \mathbf{S}_N), und nicht auf äußere (ob es von rechts oder links kommt, u. ä.). Hierauf kommt es aber gerade an. Eine eingehende Analyse dieser Frage ist auf Grund der Untersuchungen von L. SZILÁRD möglich, die die Natur der semipermeablen Wände, des „Maxwellschen Dämons“, und allgemein die Rolle der „Eingriffe intelligenter Wesen in thermodynamische Systeme“ klarstellen — wir können hier auf diese Dinge nicht näher eingehen, um so mehr als der Leser eine ausführliche Darstellung derselben a. a. O. Anm. ¹⁹⁴ findet.

Die obigen Ausführungen zeigen insbesondere, daß zwei Zustände φ, ψ des Systems \mathbf{S} durch semipermeable Wände bestimmt getrennt werden können, wenn sie orthogonal sind. Wir wollen nun die Umkehrung beweisen: sind φ, ψ nicht orthogonal, so widerspricht die Annahme einer solchen semipermeablen Wand dem zweiten Hauptsatz. D. h. die notwendige und hinreichende Bedingung für die Trennbarkeit durch semipermeable Wände ist $(\varphi, \psi) = 0$, und nicht wie in der klassischen Theorie $\varphi \neq \psi$ (wir schreiben φ, ψ statt der w. o. benützten I, II). Damit klärt sich eine alte Paradoxie der klassischen Form der Thermodynamik, nämlich die unangenehme Diskontinuität beim Operieren mit

semipermeablen Wänden: beliebig wenig verschiedene Zustände sind immer noch 100prozentig trennbar, und absolut gleiche sind es überhaupt nicht! Jetzt haben wir einen stetigen Übergang: denn 100prozentige Trennbarkeit ist nur bei $(\varphi, \psi) = 0$ da, und bei wachsendem (φ, ψ) wird sie immer schlechter. Aber erst bei maximalem (φ, ψ) , nämlich bei $|(\varphi, \psi)| = 1$ (es ist ja $\|\varphi\| = \|\psi\| = 1$, also folgt aus $|(\varphi, \psi)| = 1$ $\varphi = c\psi$, c konstant, $|c| = 1$) sind die Zustände φ, ψ identisch, d. h. die Trennung vollkommen unmöglich.

Um die angekündigte Betrachtung durchzuführen, müssen wir das Schlußresultat dieses Paragraphen, den Wert der Entropie der U -Gesamtheit, vorwegnehmen. Natürlich werden wir dieses Ergebnis bei dessen Herleitung nicht verwenden.

Nehmen wir also an, daß es eine φ und ψ trennende semipermeable Wand gibt, es soll $(\varphi, \psi) = 0$ hergeleitet werden. Wir betrachten ein

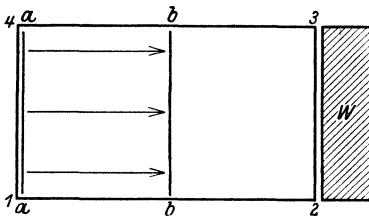


Abb. 3.

$\frac{1}{2}(P_{[\varphi]} + P_{[\psi]})$ -Gas (d. h. von $\frac{N}{2}$ Systemen im Zustande φ und $\frac{N}{2}$ Systemen im Zustande ψ , die Spur dieses Operators ist 1), und wählen \mathcal{V} (d. h. \bar{K}) und \mathbf{T} so, daß es ideal ist. \bar{K} habe den in Abb. 3 angedeuteten Längsquerschnitt $1\ 2\ 3\ 4\ 1$, wir schieben an einem Ende, $a\ a$, die genannte semipermeable Wand ein, und schieben sie dann bis zur Mitte, $b\ b$, vor — dabei soll durch Kontakt mit einem großen Wärmereservoir W von der Temperatur \mathbf{T} am anderen Ende, $2\ 3$, die Temperatur des Gases festgehalten werden. Bei diesem Prozeß geschieht mit den φ -Molekülen nichts, die ψ -Moleküle dagegen werden in die rechte Hälfte von \bar{K} (zwischen $b\ b$ und $2\ 3$) abgedrängt. D. h.: das $\frac{1}{2}(P_{[\varphi]} + P_{[\psi]})$ -Gas ist ein 1:1-Gemisch eines $P_{[\varphi]}$ - und eines $P_{[\psi]}$ -Gases — mit dem ersteren geschieht nichts, das letztere aber wird isotherm aufs halbe Volumen komprimiert. Aus der Zustandsgleichung des idealen Gases folgt, daß bei diesem Prozeß die mechanische Arbeit $\frac{N}{2}\kappa\mathbf{T}\ln 2$ geleistet wird ($\frac{N}{2}$ ist die Zahl der Moleküle des $P_{[\psi]}$ -Gases, $\kappa =$ Boltzmannsche Konstante)¹⁹⁵, und da sich die Energie des Gases (wegen der Isothermie) nicht ändert¹⁹⁶, wird diese Energiemenge vom Wärmereservoir W übernommen. Die Entropiezunahme des Reservoirs ist als $\frac{Q}{\mathbf{T}} = N\kappa \cdot \frac{1}{2} \ln 2$ (vgl. Anm. ¹⁸⁶).

Nach diesem Prozeß ist links von $b\ b$ die Hälfte des ursprünglichen $P_{[\varphi]}$ -Gases vorhanden, d. h. $\frac{N}{4}$ Moleküle; rechts von $b\ b$ dagegen die

Hälfte des ursprünglichen $P_{[\varphi]}$ -Gases, d. h. $\frac{N}{4}$ Moleküle, und das ganze $P_{[\psi]}$ -Gas, d. h. $\frac{N}{2}$ Moleküle — also insgesamt $\frac{3N}{4}$ Moleküle eines $\frac{1}{3}P_{[\varphi]} + \frac{2}{3}P_{[\psi]}$ -Gases. Wir komprimieren bzw. expandieren diese Gase auf die Volumina $\frac{V}{4}$ bzw. $\frac{3V}{4}$, die mechanische Arbeit wird dabei wieder dem Wärmereservoir W abgenommen bzw. zugeführt, sie beträgt $\frac{N}{4} \kappa T \ln 2$ bzw. $\frac{3N}{4} \kappa T \ln \frac{3}{2}$ (vgl. Anm. ¹⁹¹), die Entropiezunahme des Reservoirs ist also $N\kappa \cdot \frac{1}{4} \ln 2$ bzw. $-N\kappa \cdot \frac{3}{4} \ln \frac{3}{2}$. Zusammen:

$$N\kappa \cdot \left(\frac{1}{2} \ln 2 + \frac{1}{4} \ln 2 - \frac{3}{4} \ln \frac{3}{2} \right) = N\kappa \cdot \frac{3}{4} \ln \frac{1}{3}.$$

Zum Schluß haben wir ein $P_{[\varphi]}$ - bzw. ein $\frac{1}{3}P_{[\varphi]} + \frac{2}{3}P_{[\psi]}$ -Gas von $\frac{N}{4}$ bzw. $\frac{3N}{4}$ Molekülen, im Volum $\frac{\mathcal{V}}{4}$ bzw. $\frac{3\mathcal{V}}{4}$. Ursprünglich war ein $\frac{1}{2}P_{[\varphi]} + \frac{1}{2}P_{[\psi]}$ -Gas von N Molekülen im Volum \mathcal{V} da, d. h. wenn wir wollen, zwei $\frac{1}{2}P_{[\varphi]} + \frac{1}{2}P_{[\psi]}$ -Gase, von $\frac{N}{4}$ bzw. $\frac{3N}{4}$ Molekülen, im Volum $\frac{\mathcal{V}}{4}$ bzw. $\frac{3\mathcal{V}}{4}$. Die durch den ganzen Prozeß bewirkte Änderung ist also diese: $\frac{N}{4}$ Moleküle im Volum $\frac{\mathcal{V}}{4}$ gingen aus einem $\frac{1}{2}P_{[\varphi]} + \frac{1}{2}P_{[\psi]}$ -Gas in ein $P_{[\varphi]}$ -Gas über, $\frac{3N}{4}$ Moleküle im Volum $\frac{3\mathcal{V}}{4}$ gingen aus einem $\frac{1}{2}P_{[\varphi]} + \frac{1}{2}P_{[\psi]}$ -Gas in ein $\frac{1}{3}P_{[\varphi]} + \frac{2}{3}P_{[\psi]}$ -Gas über, die Entropie von W nahm um $N\kappa \cdot \frac{3}{4} \ln \frac{1}{3}$ zu. Da der Prozeß reversibel war, muß die gesamte Entropiezunahme 0 sein, d. h. die zwei Gas-Entropieänderungen müssen die von W gerade kompensieren. Wir müssen darum noch die Gas-Entropieänderungen kennen.

Wie wir sehen werden, hat ein U -Gas von M Molekülen die Entropie— $M\kappa \cdot \text{Spur}(U \ln U)$, wenn diejenige des $P_{[x]}$ -Gases von gleichem Volum und gleicher Temperatur als 0 gerechnet wird (vgl. w. o.). Wenn also U ein reines Punktspektrum hat, mit den Eigenwerten w_1, w_2, \dots , so ist dies $-M\kappa \cdot \sum_1^{\infty} w_n \ln w_n$ (dabei ist für $x = 0$ $x \ln x$ gleich 0 zu setzen). $P_{[\varphi]}, \frac{1}{2}P_{[\varphi]} + \frac{1}{2}P_{[\psi]}, \frac{1}{3}P_{[\varphi]} + \frac{2}{3}P_{[\psi]}$ haben nun, wie man leicht berechnet, die Eigenwerte $1, 0$ bzw. $\frac{1+\alpha}{2}, \frac{1-\alpha}{2}, 0$ bzw. $\frac{3 + \sqrt{1+8\alpha^2}}{6}, \frac{3 - \sqrt{1+8\alpha^2}}{6}, 0$ ($\alpha = |(\varphi, \psi)|$, also $\geq 0, \leq 1$), wobei die 0 stets unendlich vielfach ist, die übrigen aber einfach¹⁹⁷. Daher hat die Entropie der Gase um

$$-\frac{N}{4} \kappa \cdot 0 - \frac{3N}{4} \kappa \cdot \left(\frac{3 + \sqrt{1+8\alpha^2}}{6} \ln \frac{3 + \sqrt{1+8\alpha^2}}{6} + \frac{3 - \sqrt{1+8\alpha^2}}{6} \ln \frac{3 - \sqrt{1+8\alpha^2}}{6} \right) \\ + N\kappa \cdot \left(\frac{1+\alpha}{2} \ln \frac{1+\alpha}{2} + \frac{1-\alpha}{2} \ln \frac{1-\alpha}{2} \right)$$

zugenommen. Dies soll, um den Entropiezuwachs $N\kappa \cdot \frac{3}{4} \ln \frac{4}{3}$ von W vermehrt, 0 ergeben. Dividieren wir durch $\frac{N\kappa}{4}$, so entsteht:

$$-\frac{3 + \sqrt{1 + 8\alpha^2}}{2} \ln \frac{3 + \sqrt{1 + 8\alpha^2}}{6} - \frac{3 - \sqrt{1 + 8\alpha^2}}{2} \ln \frac{3 - \sqrt{1 + 8\alpha^2}}{6} + 2(1 + \alpha) \ln \frac{1 + \alpha}{2} + 2(1 - \alpha) \ln \frac{1 - \alpha}{2} + 3 \ln \frac{4}{3} = 0,$$

dabei ist $0 \leq \alpha \leq 1$.

Nun erkennt man leicht, daß die linke Seite bei von 0 bis 1 wachsendem α ständig zunimmt¹⁹⁸, und zwar von 0 bis $3 \ln \frac{4}{3}$, daher muß $\alpha = 0$ sein (für $\alpha \neq 0$ wäre der inverse Prozeß zum beschriebenen, entgegen dem zweiten Hauptsatz, Entropie-vermindernd!). Damit ist $(\varphi, \psi) = 0$ bewiesen. —

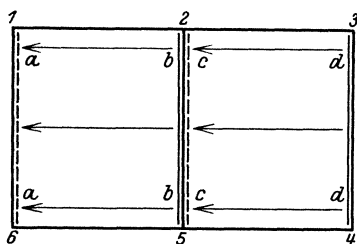


Abb. 4.

Nach diesen Vorbereitungen gehen wir daran, die Entropie eines U -Gases aus N -Molekülen im Volum \mathcal{V} und bei der Temperatur T zu bestimmen — d.h. genauer seinen Entropieüberschuß gegenüber einem $P_{[\varphi]}$ -Gase unter den gleichen Bedingungen. Dies ist dann, nach unseren früheren Bemerkungen und im Sinne der wie oben gegebenen

Normierung, die Entropie einer U -Gesamtheit aus N Einzelsystemen. Spur U sei, wie w. o. gesagt wurde, gleich 1.

Dann hat U , wie wir wissen, ein reines Punktspektrum w_1, w_2, \dots , mit $w_1 \geq 0, w_2 \geq 0, \dots, w_1 + w_2 + \dots = 1$, die entsprechenden Eigenfunktionen seien $\varphi_1, \varphi_2, \dots$, dann ist $U = \sum_1^{\infty} w_n P_{[\varphi_n]}$ (vgl. IV. 3.).

Somit ist unser U -Gas ein Gemisch von $P_{[\varphi_1]}$, $P_{[\varphi_2]}$, ...-Gasen, aus $w_1 N$, bzw. $w_2 N$, bzw. ... Molekülen bestehend, alle im selben Volum \mathcal{V} . T, \mathcal{V} seien wieder derart, daß alle diese Gase ideal sind, und \overline{K} von rechteckigem Querschnitt. Nun werden die folgenden reversiblen Eingriffe vorgenommen, um die φ_1 -, bzw. φ_2 -, bzw. ...-Moleküle voneinander zu trennen (vgl. Abb. 4). Wir bauen an \overline{K} (2 3 4 5 2) einen zweiten, ebenso großen, rechteckigen Kasten \overline{K}' an (1 2 5 6 1), und ersetzen die gemeinsame Wand 2 5 durch zwei dicht aneinander liegende Wände: Die eine (2 5) sei fest, semipermeabel, und zwar für φ_1 durchlässig, für $\varphi_2, \varphi_3, \dots$ aber reflektierend; die andere (bb) beweglich, aber eine gewöhnliche, absolut undurchlässige Wand. Ferner schieben wir bei dd , dicht an 3 4 anliegend, eine weitere semipermeable Wand ein, die für $\varphi_2, \varphi_3, \dots$ durchlässig ist und φ_1 reflektiert. Sodann schieben wir bb und dd , ihre gegenseitige Entfernung festhaltend, bis aa bzw. cc (d. h. dicht an 1 6 bzw. 2 5). Hierdurch werden die

φ_2 , φ_3 , ...-Moleküle gar nicht beeinflusst, die φ_1 dagegen gezwungen, sich stets zwischen den bewegten Wänden bb , dd aufzuhalten — da deren Entfernung konstant ist, brauchen wir keine Arbeit (gegen den Gasdruck) zu leisten, eine Wärmeentwicklung findet darum auch nicht statt. Zum Schluß ersetzen wir die Wände 25 , cc durch eine feste, absolut undurchlässige Wand 25 , und entfernen aa , womit die Kästen \overline{K} , \overline{K}' wiederhergestellt sind. Nur daß sich jetzt alle φ_1 -Moleküle in \overline{K}' befinden, wir haben also diese reversibel und ohne jede Arbeitsleistung, Wärmeentwicklung oder Temperaturänderung aus \overline{K} in den ebenso großen Kasten \overline{K}' „abgezapft“¹⁹⁹.

Ebenso „zapfen“ wir die φ_2 , φ_3 , ...-Moleküle in gleiche Kästen \overline{K}'' , \overline{K}''' , ... ab — und haben so zum Schluß $P_{[\varphi_1]}$, $P_{[\varphi_2]}$, ...-Gase, bestehend aus w_1N , bzw. w_2N , bzw. ... Molekülen, jedes im Volum \mathcal{V} . Nun komprimieren wir sie isotherm auf die Volumina $w_1\mathcal{V}$, bzw. $w_2\mathcal{V}$, bzw. ..., dazu müssen wir, als Kompensation, aus einem großen Wärmereservoir (von der Temperatur T , damit der Prozeß reversibel sei) die Wärmemengen $w_1N\kappa \cdot T \ln w_1$, bzw. $w_2N\kappa \cdot T \ln w_2$, bzw. ... zuführen (diese Wärmemengen sind alle $< 0!$), da die mechanischen Kompressionsarbeiten an den einzelnen Gasen gleich minus dieselben sind (vgl. Anm. ¹⁹¹). Der Entropiezuwachs beträgt also bei diesen Prozessen $\sum_1^n w_n N \kappa \cdot \ln w_n$. Schließlich führen wir die $P_{[\varphi_1]}$, $P_{[\varphi_2]}$, ...-Gase alle in ein $P_{[\varphi]}$ -Gas (φ ein beliebig gewählter Zustand) über. Wir haben also jetzt lauter $P_{[\varphi]}$ -Gase, aus w_1N , bzw. w_2N , bzw. ... Molekülen, in den Volumina $w_1\mathcal{V}$, bzw. $w_2\mathcal{V}$, bzw. Da sie alle identisch und von gleicher Dichte ($N:\mathcal{V}$) sind, können wir sie vermischen, und auch das ist reversibel — so entsteht ein $P_{[\varphi]}$ -Gas aus N Molekülen im Volum \mathcal{V} (wegen $\sum_1^n w_n = 1$).

Somit haben wir den gewünschten reversiblen Übergang ausgeführt. Die Entropie nahm dabei um $N\kappa \sum_1^n w_n \ln w_n$ zu, und da sie im Schlußzustand (nach unserer Normierung) 0 ist, war sie im Anfangszustand $-N\kappa \sum_1^n w_n \ln w_n$.

Da U die Eigenfunktionen $\varphi_1, \varphi_2, \dots$ mit den Eigenwerten w_1, w_2, \dots hat, hat $U \ln U$ dieselben Eigenfunktionen, aber die Eigenwerte $w_1 \ln w_1, w_2 \ln w_2, \dots$. Somit ist $\text{Spur}(U \ln U) = \sum_1^n w_n \ln w_n$. Man beachte: wir haben $w_n \geq 0, \leq 1$, also $w_n \ln w_n \leq 0$, und zwar $= 0$ nur für $w_n = 0, 1$ — daß für $w_n = 0$ $w_n \ln w_n = 0$ zu nehmen ist, folgt daraus, daß in unseren Betrachtungen die verschwindenden w_n nicht zu berücksichtigen sind, übrigens ergeben Stetigkeitserwägungen dasselbe.

Die Entropie einer aus N Einzelsystemen bestehenden U -Gesamtheit haben wir damit zu $-N \kappa \text{ Spur}(U \ln U)$ bestimmt. Das vorhin über die $w_n \ln w_n$ Gesagte zeigt, daß sie stets ≥ 0 ist, damit sie $= 0$ wird, müssen alle $w_n = 0, 1$ sein. Wegen $\text{Spur } U = 1$ ist dann genau ein $w_n = 1$, die anderen $= 0$, also $U = P_{[\varphi_n]}$. D. h.: die $U = P_{[\varphi]}$, d. i. die Zustände haben eine Entropie $= 0$, alle anderen Gemische haben Entropien > 0 .

3. Reversibilitäts- und Gleichgewichtsfragen.

Wir können jetzt die in V. 1. behauptete Irreversibilität des Meßprozesses beweisen. Wenn z. B. U ein Zustand ist, $U = P_{[\varphi]}$, so geht es durch die Messung einer Größe \mathfrak{H} , deren Operator R die Eigenfunktionen $\varphi_1, \varphi_2, \dots$ hat, in die Gesamtheit

$$U' = \sum_1^{\infty} (P_{[\varphi]} \varphi_n, \varphi_n) \cdot P_{[\varphi_n]} = \sum_1^{\infty} |(\varphi, \varphi_n)|^2 P_{[\varphi_n]}$$

über, und wenn U' kein Zustand ist, so fand eine Entropiezunahme statt (U -s Entropie war 0 , die von U' ist > 0), so daß der Prozeß irreversibel ist. Damit aber U' ein Zustand sei, also ein $P_{[\varphi_n]}$, da die φ_n seine Eigenfunktionen sind, müssen alle $|(\varphi, \varphi_n)|^2 = 0$ sein, bis auf eins (das dann $= 1$ ist), d. h. φ zu allen $\varphi_n, n \neq \bar{n}$, orthogonal — aber dann ist $\varphi = c \varphi_{\bar{n}}$, dabei $|c| = 1$, also $P_{[\varphi]} = P_{[\varphi_{\bar{n}}]}$, $U = U'$. Also: jede Messung an einem Zustande ist irreversibel, außer wenn die Eigenfunktion der gemessenen Größe (d. h. diese Größe im gegebenen Zustande) einen scharfen Wert hat, in welchem Falle die Messung den Zustand gar nicht ändert. Wie man sieht, ist das unkausale Verhalten demnach auch mit gewissen thermodynamischen Begleiterscheinungen in eindeutiger Weise verknüpft.

Nun soll weitergehend in voller Allgemeinheit diskutiert werden, wann der Prozeß $1.$, $U \rightarrow U' = \sum_1^{\infty} (U \varphi_n, \varphi_n) \cdot P_{[\varphi_n]}$ die Entropie erhöht.

U hat die Entropie $-N \kappa \text{ Spur}(U \ln U)$, wenn w_1, w_2, \dots seine Eigenwerte und ψ_1, ψ_2, \dots seine Eigenfunktionen sind, so ist dies gleich $-N \kappa \sum_1^{\infty} w_n \ln w_n = -N \kappa \sum_1^{\infty} (U \psi_n, \psi_n) \ln (U \psi_n, \psi_n)$. U' hat die Eigenwerte $(U \varphi_1, \varphi_1), (U \varphi_2, \varphi_2), \dots$, also ist seine Entropie $-N \kappa \sum_1^{\infty} (U \varphi_n, \varphi_n) \ln (U \varphi_n, \varphi_n)$. Somit ist die Entropie von $U \gtrless$ als diejenige von U' , je nachdem ob

$$* \quad \sum_1^{\infty} (U \psi_n, \psi_n) \ln (U \psi_n, \psi_n) \lesseqgtr \sum_1^{\infty} (U \varphi_n, \varphi_n) \ln (U \varphi_n, \varphi_n)$$

ist.

Wir zeigen zunächst, daß in * allenfalls \geq gilt, d. h. daß der Prozeß $U \rightarrow U'$ nicht Entropie-vermindernd ist — dies ist zwar thermo-

dynamisch klar, jedoch ist es für unsere späteren Zwecke von Bedeutung, auch einen rein mathematischen Beweis dieser Tatsache zu besitzen. Und zwar gehen wir so vor, daß U , und mit ihm $\varphi_1, \varphi_2, \dots$, festgehalten werden, die $\varphi_1, \varphi_2, \dots$ aber alle vollständigen normierten Orthogonalsysteme durchlaufen.

Zunächst dürfen wir uns aus Stetigkeitsgründen auf solche Systeme $\varphi_1, \varphi_2, \dots$ beschränken, bei denen nur endlich viele φ_n von den entsprechenden ψ_n verschieden sind. Sei also z. B. für $n > M$ stets $\varphi_n = \psi_n$. Dann sind die $\varphi_n, n \leq M$, Linearaggregate der $\psi_n, n \leq M$, und umgekehrt — also

$$\psi_m = \sum_1^M x_{mn} \varphi_n \quad (m = 1, \dots, M),$$

und die M -dimensionale Matrix $\{x_{mn}\}$ ist offenbar unitär. Es ist $(U\varphi_m, \varphi_m) = w_m$ und, wie man leicht berechnet, $(U\psi_m, \psi_m) = \sum_1^N w_n |x_{mn}|^2$ ($w = 1, \dots, M$), so daß

$$\sum_1^M w_m \ln w_m \geq \sum_1^M \left(\sum_1^M w_n |x_{mn}|^2 \right) \ln \left(\sum_1^M w_n |x_{mn}|^2 \right)$$

zu beweisen ist. Da die rechte Seite eine stetige Funktion der M^2 beschränkten Variablen x_{mn} ist, hat sie ein Maximum, und nimmt es auch an ($\{x_{mn}\}$ unitär!); da die linke Seite ihr Wert für $x_{mn} \begin{cases} = 1 & \text{für } m = n \\ = 0 & \text{für } m \neq n \end{cases}$ ist, ist zu zeigen: das genannte Maximum liegt bei diesem x_{mn} -System.

Sei also x_{mn}^0 ($m, n = 1, \dots, M$) ein Wertsystem, für welches das Maximum angenommen wird. Multiplizieren wir die Matrix $\{x_{mn}^0\}$ mit der unitären Matrix

$$\begin{pmatrix} \alpha & \beta & 0 & \vdots & 0 \\ -\bar{\beta} & \bar{\alpha} & 0 & \vdots & 0 \\ 0 & 0 & 1 & \vdots & 0 \\ \cdot & \cdot & \cdot & \ddots & \cdot \\ 0 & 0 & 0 & \vdots & 1 \end{pmatrix}, \quad |\alpha|^2 + |\beta|^2 = 1,$$

so entsteht eine unitäre Matrix $\{x'_{mn}\}$, also wieder ein zugelassenes x_{mn} -System. Und zwar sei $\alpha = \sqrt{1 - \varepsilon^2}, \beta = \theta \varepsilon$ (ε reell, $|\theta| = 1$), ε wird klein sein, und wir wollen im folgenden alle Rechnungen nur in bezug auf $1, \varepsilon, \varepsilon^2$ -Glieder genau ausführen, $\varepsilon^3, \varepsilon^4, \dots$ dagegen vernachlässigen. Dann wird $\alpha \approx 1 - \frac{1}{2}\varepsilon^2$, und in der neuen Matrix $\{x'_{mn}\}$

$$\begin{aligned} x'_{1n} &\approx (1 - \frac{1}{2}\varepsilon^2) x_{1n}^0 + \theta \varepsilon x_{2n}^0, \\ x'_{2n} &\approx -\bar{\theta} \varepsilon x_{1n}^0 + (1 - \frac{1}{2}\varepsilon^2) x_{2n}^0, \\ x'_{mn} &= x_{mn}^0 \quad (m \geq 3), \end{aligned}$$

also weiter

$$\begin{aligned} \sum_1^M w_n |x'_{1n}|^2 &\approx \sum_1^M w_n |x_{1n}^0|^2 + \sum_1^M 2 w_n \Re(\bar{\theta} x_{1n}^0 \bar{x}_{2n}^0) \cdot \varepsilon \\ &\quad + \sum_1^M w_n (-|x_{1n}^0|^2 + |x_{2n}^0|^2) \cdot \varepsilon^2, \\ \sum_1^M w_n |x'_{2n}|^2 &\approx \sum_1^M w_n |x_{2n}^0|^2 - \sum_1^M 2 w_n \Re(\bar{\theta} x_{1n}^0 \bar{x}_{2n}^0) \cdot \varepsilon \\ &\quad - \sum_1^M w_n (-|x_{1n}^0|^2 + |x_{2n}^0|^2) \cdot \varepsilon^2, \\ \sum_1^M w_n |x'_{mn}|^2 &= \sum_1^M w_n |x_{mn}^0|^2 \quad (m \geq 3). \end{aligned}$$

Setzen wir diese Ausdrücke in $f(x) = x \ln x$ ein, wobei

$$f'(x) = \ln x + 1, \quad f''(x) = \frac{1}{x}$$

zu beachten ist, und addieren dann alle, so wird

$$\begin{aligned} \sum_1^M m \left(\sum_1^M w_n |x'_{mn}|^2 \right) \ln \left(\sum_1^M w_n |x'_{mn}|^2 \right) &\approx \sum_1^M m \left(\sum_1^M w_n |x_{mn}^0|^2 \right) \ln \left(\sum_1^M w_n |x_{mn}^0|^2 \right) \\ &+ \left(\ln \left(\sum_1^M w_n |x_{1n}^0|^2 \right) - \ln \left(\sum_1^M w_n |x_{2n}^0|^2 \right) \right) \cdot \sum_1^M 2 w_n \Re(\bar{\theta} x_{1n}^0 \bar{x}_{2n}^0) \cdot \varepsilon \\ &+ \left[- \left(\ln \left(\sum_1^M w_n |x_{1n}^0|^2 \right) - \ln \left(\sum_1^M w_n |x_{2n}^0|^2 \right) \right) \left(\sum_1^M w_n |x_{1n}^0|^2 - \sum_1^M w_n |x_{2n}^0|^2 \right) \right. \\ &\quad \left. + \frac{1}{2} \left(\frac{1}{\sum_1^M w_n |x_{1n}^0|^2} + \frac{1}{\sum_1^M w_n |x_{2n}^0|^2} \right) \left(\sum_1^M 2 w_n \Re(\bar{\theta} x_{1n}^0 \bar{x}_{2n}^0) \right)^2 \right] \cdot \varepsilon^2. \end{aligned}$$

Damit das erste Glied rechts das Maximum sei, muß der ε -Koeffizient = 0 und der ε^2 -Koeffizient ≤ 0 sein. Der erstere hat zwei Faktoren,

$\ln \left(\sum_1^M w_n |x_{1n}^0|^2 \right) - \ln \left(\sum_1^M w_n |x_{2n}^0|^2 \right)$ und $\sum_1^M 2 w_n \Re(\bar{\theta} x_{1n}^0 \bar{x}_{2n}^0)$. Ist der

erstere = 0, so ist im ε^2 -Koeffizienten das erste Glied = 0 (dieses ist stets ≤ 0), so daß das zweite Glied, das offenbar stets ≥ 0 ist, verschwinden muß, damit der ganze Koeffizient ≤ 0 sei. Das bedeutet

$\sum_1^M 2 w_n \Re(\bar{\theta} x_{1n}^0 \bar{x}_{2n}^0) = 0$. Also ist der zweite Faktor des ε -Koeffizienten

jedenfalls = 0, was auch $2\Re(\bar{\theta} \sum_1^M w_n x_{1n}^0 \bar{x}_{2n}^0) = 0$ geschrieben werden

kann. Da dies bei geeignetem θ in den Absolutwert der \sum_1^M übergeht,

muß diese verschwinden: $\sum_1^M w_n x_{1n}^0 \bar{x}_{2n}^0 = 0$.

Da wir an Stelle von 1, 2 irgend zwei verschiedene $k, j = 1, \dots, M$ setzen können, ergibt sich:

$$\sum_1^M w_n x_{kn}^0 \bar{x}_{jn}^0 = 0 \quad \text{für } k \neq j.$$

D. h.: die unitäre Koordinatentransformation mit der Matrix $\{x_{mn}^0\}$ bringt die Diagonalmatrix mit den Diagonalelementen w_1, \dots, w_n wieder auf die Diagonalform. Da die Diagonalelemente die Multiplikatoren (oder Eigenwerte) der Matrix sind, ändern sie sich bei einer Koordinatentransformation nicht, sie können höchstens permutiert werden. Vor der Transformation waren es die w_m ($m = 1, \dots, M$), nachher sind es die $\sum_1^M w_n |x_{mn}^0|^2$ ($m = 1, \dots, N$). Die Summen $\sum_1^M w_n \ln w_n$, $\sum_1^M (\sum_1^M w_n |x_{mn}^0|^2) \ln (\sum_1^M w_n |x_{mn}^0|^2)$ haben also denselben Wert, d. h. auch bei x_{mn} $\left\{ \begin{array}{l} = 1 \quad \text{für } m = n \\ = 0 \quad \text{für } m \neq n \end{array} \right\}$ liegt ein Maximum, wie behauptet wurde.

Stellen wir nun fest, wann in * das =-Zeichen gilt. Wenn es gilt, so nimmt

$$\sum_1^{\infty} (U \chi_n, \chi_n) \ln (U \chi_n, \chi_n)$$

seinen Maximalwert nicht nur für $\chi_n = \varphi_n$ ($n = 1, 2, \dots$) an, sondern auch für $\chi_n = \psi_n$ ($n = 1, 2, \dots$). (χ_1, χ_2, \dots durchlaufe alle vollständigen normierten Orthogonalsysteme.) Dies gilt insbesondere, wenn nur die M ersten ψ_n unitär untereinander transformiert werden (d. h. $\chi_n = \psi_n$ für $n > M$). Sei $u_{mn} = (U \psi_m, \psi_n)$ ($m, n = 1, \dots, M$), v_1, \dots, v_N die Eigenwerte der endlichen (ebenfalls Hermiteschen und definiten) Matrix $\{u_{mn}\}$, und $\{\alpha_{mn}\}$ ($m, n = 1, \dots, M$) die $\{u_{mn}\}$ auf die Diagonalform transformierende Matrix. Die ψ_1, \dots, ψ_M führe sie in $\omega_1, \dots, \omega_M$ über, $\psi_m = \sum_1^M \alpha_{mn} \omega_n$ ($m = 1, \dots, M$), dann ist

$$U \omega_n = v_n \omega_n, \text{ also } (U \omega_m, \omega_n) = \left\{ \begin{array}{l} = v_n, \quad \text{für } m = n \\ = 0, \quad \text{für } m \neq n \end{array} \right\}.$$

Für $\xi_m = \sum_1^M x_{mn} \omega_n$ ($m = 1, \dots, M$, $\{x_{mn}\}$ sei auch unitär) ist also $(U \xi_k, \xi_j) = \sum_1^M v_n x_{kn} \bar{x}_{jn}$. Wegen der Annahme über die ψ_1, \dots, ψ_N nimmt daher $\sum_1^M (\sum_1^M v_n |x_{mn}|^2) \ln (\sum_1^M v_n |x_{mn}|^2)$ sein Maximum für $x_{mn} = \alpha_{mn}$ an. Nach dem vorhin Bewiesenen folgt hieraus $\sum_1^M v_n \alpha_{kn} \bar{\alpha}_{jn} = 0$ für $k \neq j$, d. h. $(U \psi_k, \psi_j) = 0$ für $k \neq j$, $k, j = 1, \dots, M$.

Dies muß für alle M gelten, also ist $U\psi_k$ zu allen ψ_j , $k \neq j$, orthogonal — also gleich $w'_k\psi_k$ (w'_k eine Konstante). Somit sind die ψ_1, ψ_2, \dots Eigenfunktionen von U , die zugehörigen Eigenwerte sind w'_1, w'_2, \dots (also eine Permutation der w_1, w_2, \dots). Unter diesen Umständen ist aber

$$U' = \sum_1^{\infty} (U\psi_n, \psi_n) \cdot P_{[\psi_n]} = \sum_1^{\infty} w'_n \cdot P_{[\psi_n]} = U.$$

Wir haben also gefunden:

Der Prozeß **1.**, $U \rightarrow U' = \sum_1^{\infty} (U\psi_n, \psi_n) \cdot P_{[\psi_n]}$ (ψ_1, ψ_2, \dots sind die Eigenfunktionen des Operators R der gemessenen Größe \mathfrak{M}), vermindert die Entropie nie, er erhöht sie sogar immer, ausgenommen, wenn alle ψ_1, ψ_2, \dots Eigenfunktionen von U sind, dann ist nämlich $U = U'$.

Im genannten Falle ist übrigens U mit R vertauschbar, und auch dies ist für sein Eintreten charakteristisch (weil es der Existenz des gemeinsamen Eigenfunktionensystems ψ_1, ψ_2, \dots gleichwertig ist, vgl. II. 10.).

Der Prozeß **1.** ist also in allen Fällen, in denen er überhaupt eine Änderung bewirkt, irreversibel. —

Die Reversibilitätsfrage soll jetzt bei Prozessen **1.**, **2.**, wie in V. 2. als zweiter Programmpunkt angekündigt wurde, unabhängig von der phänomenologischen Thermodynamik behandelt werden. Die mathematische Methode, mit der dies gelingen kann, kennen wir schon: wenn der zweite Hauptsatz gilt, muß die Entropie gleich $-N\kappa \text{Spur}(U \ln U)$ sein, und dies darf bei keinem Prozeß **1.**, **2.** abnehmen — wir haben jetzt also $-N\kappa \text{Spur}(U \ln U)$, unabhängig von seiner Deutung als Entropie, als bloße Rechengröße zu behandeln, und zu ermitteln, was es bei **1.**, **2.** tut²⁰⁰.

Bei **2.** wird aus $U \rightarrow U_t = e^{-\frac{2\pi i}{\hbar}tH} U e^{\frac{2\pi i}{\hbar}tH}$, d. h. wenn wir den unitären Operator $e^{-\frac{2\pi i}{\hbar}tH}$ mit A bezeichnen, $U \rightarrow U_t = AUA^{-1}$. Da $f \rightarrow Af$ wegen der Unitarität von A eine isomorphe Abbildung des Hilbertschen Raumes auf sich selbst ist, die jeden Operator P in APA^{-1} überführt, ist allgemein $F(APA^{-1}) = AF(P)A^{-1}$. Also ist $U_t \ln U_t = A \cdot U \ln U \cdot A^{-1}$. Daher ist $\text{Spur}(U_t \ln U_t) = \text{Spur}(U \ln U)$, d. h. unsere Größe $-N\kappa \text{Spur}(U \ln U)$ ist bei **2.** konstant. Was bei **1.** geschieht, haben wir gerade vorhin (und zwar ohne Bezugnahme auf den zweiten Hauptsatz) ermittelt: wenn sich U dabei ändert (d. h. $U \neq U'$), nimmt sie zu, bei unverändertem U (d. h. $U = U'$, oder ψ_1, ψ_2, \dots Eigenfunktionen von U , oder U, R vertauschbar) bleibt sie natürlich auch unverändert. Bei einem aus mehreren Prozessen **1.** und **2.** (in beliebiger Zahl und Reihenfolge) kombinierten Eingriff bleibt also $-N\kappa \text{Spur}(U \ln U)$ unverändert, wenn jeder Prozeß **1.** unwirksam ist (keine Änderung bewirkt), in allen anderen Fällen aber nimmt es zu.

Wenn also nur Eingriffe **1.**, **2.** in Betracht gezogen werden, so ist jeder Prozeß **1.**, der überhaupt eine Veränderung bewirkt, irreversibel.

Es gibt übrigens auch einfachere Ausdrücke als $-\text{Spur}(U \ln U)$, die bei **1.** nicht zunehmen und bei **2.** konstant sind: z. B. der größte Eigenwert von U . In der Tat: bei **2.** ist er, wie alle Eigenwerte von U , invariant — bei **1.** gehen die Eigenwerte w_1, w_2, \dots von U in die Eigenwerte $\sum_1^n w_n |x_{1n}|^2, \sum_1^n w_n |x_{2n}|^2, \dots$ von U' über (vgl. die früheren Betrachtungen dieses Paragraphen), und da wegen der Unitarität der Matrix $\{x_{mn}\}$ $\sum_1^n |x_{1n}|^2 = 1, \sum_1^n |x_{2n}|^2 = 1, \dots$ gilt, sind alle diese Zahlen \leq als das größte w_n (ein größtes w_n existiert, da alle $w_n \geq 0$ sind, und wegen $\sum_1^n w_n = 1$ $w_n \rightarrow 0$ gilt). Da es nun ohne weiteres möglich ist, U so zu ändern, daß $-\text{Spur}(U \ln U) = -\sum_1^\infty w_n \ln w_n$ invariant bleibt, aber das größte w_n abnimmt, sieht man, daß es phänomenologisch-thermodynamisch mögliche Übergänge gibt — die also mit unseren Gasprozessen wirklich durchführbar sind —, welche durch sukzessives Anwenden von **1.**, **2.** allein niemals zustande kommen können. Dies zeigt, daß die Einführung der Gasmethoden unvermeidbar ist.

Statt $-\text{Spur}(U \ln U)$ können wir auch $\text{Spur}(F(U))$ für geeignete Funktionen $F(x)$ betrachten. Daß dies bei **1.** für $U \neq U'$ zunimmt (für $U = U'$ sowie bei **2.** ist es natürlich invariant), kann ebenso bewiesen werden, wie wir es bei $F(x) = -x \ln x$ taten, falls die einzigen Eigenschaften dieser Funktion, die wir w. o. benutzten, auch bei $F(x)$ vorhanden sind. Diese sind: $F''(x) < 0$, und das monotone Fallen von $F'(x)$; aber das letztere folgt aus dem ersteren. Also: für unsere unthermodynamischen Irreversibilitätsbetrachtungen können wir jede $\text{Spur}(F(U))$ verwenden, wenn nur $F(x)$ eine nach oben konvexe Funktion ist, d. h. wenn $F''(x) < 0$ gilt (in $0 \leq x \leq 1$, da die Eigenwerte von U alle dort liegen).

Schließlich wäre noch zu zeigen, daß auch das Vermischen zweier Gesamtheiten U, V (etwa $\alpha : \beta$, $\alpha > 0$, $\beta > 0$, $\alpha + \beta = 1$) nicht Entropie-verniedrigend ist, d. h.

$$\begin{aligned} & -\text{Spur}((\alpha U + \beta V) \ln(\alpha U + \beta V)) \\ & \geq -\alpha \text{Spur}(U \ln U) - \beta \text{Spur}(V \ln V). \end{aligned}$$

Auch dies gilt selbst für jedes konvexe $F(x)$ an Stelle von $-x \ln x$. Der Beweis bleibe dem Leser überlassen. —

Wir wollen das stationäre Gleichgewichtsgemisch, d. h. das Gemisch maximaler Entropie, aufsuchen, wenn die Energie gegeben ist. Letzteres ist natürlich so zu verstehen, daß der Erwartungswert der Energie

vorgeschrieben ist — im Sinne der in Anm. ¹⁸⁴ angeführten Methode zur thermodynamischen Untersuchung statistischer Gesamtheiten kommt nur diese Fassung in Frage. Es werden somit nur solche Gemische zugelassen, für deren U Spur $U = 1$, Spur $(UH) = \mathbf{E}$ ist, wobei H der Energieoperator ist und \mathbf{E} der vorgeschriebene Energie-Erwartungswert — und unter diesen Nebenbedingungen ist $-N \kappa$ Spur $(U \ln U)$ maximal zu machen. Wir machen noch die vereinfachende Annahme, daß H ein reines Punktspektrum hat: etwa die Eigenwerte W_1, W_2, \dots und die Eigenfunktionen $\varphi_1, \varphi_2, \dots$ (es dürfen auch mehrfache darunter sein).

Sei \mathfrak{N} eine Größe, deren Operator R die Eigenfunktionen $\varphi_1, \varphi_2, \dots$ hat, aber lauter verschiedene Eigenwerte. Die Messung von \mathfrak{N} transformiert U nach \mathfrak{Z} . in $U' = \sum_1^{\infty} (U \varphi_n, \varphi_n) P_{[\varphi_n]}$, und dabei nimmt $-N \kappa$ Spur $(U \ln U)$ zu, wenn nicht $U = U'$ ist, und Spur (U) , Spur (UH) ändern sich nicht — letzteres weil die φ_n Eigenfunktionen von H sind, also $(H \varphi_m, \varphi_n)$ für $m \neq n$ verschwindet:

$$\begin{aligned} \text{Spur}(U'H) &= \sum_1^{\infty} (U \varphi_n, \varphi_n) \text{Spur}(P_{[\varphi_n]} H) = \sum_1^{\infty} (U \varphi_n, \varphi_n) (H \varphi_n, \varphi_n) \\ &= \sum_1^{\infty} (U \varphi_m, \varphi_m) (H \varphi_n, \varphi_m) = \text{Spur}(UH); \end{aligned}$$

auch wegen der Vertauschbarkeit von R, H (d. h. gleichzeitige Meßbarkeit von \mathfrak{N} und Energie) muß es so sein. Somit ist das gesuchte Maximum dasselbe, wenn wir uns auf die U' beschränken, d. h. auf statistische Operatoren mit den Eigenfunktionen $\varphi_1, \varphi_2, \dots$, und angenommen wird es auch nur unter diesen.

Es ist also $U = \sum_1^{\infty} w_n P_{[\varphi_n]}$, und da $U, UH, U \ln U$ alle die Eigenfunktionen φ_n , aber die Eigenwerte w_n , bzw. $W_n w_n$, bzw. $w_n \ln w_n$ haben, gilt es $-N \kappa \sum_1^{\infty} w_n \ln w_n$ mit den Nebenbedingungen $\sum_1^{\infty} w_n = 1$, $\sum_1^{\infty} W_n w_n = \mathbf{E}$ zum Maximum zu machen. Dies ist aber genau dieselbe Aufgabe wie diejenige, die beim entsprechenden Gleichgewichtsproblem der gewöhnlichen Gastheorie entsteht²⁰¹, und wird daher ebenso gelöst. Nach den bekannten Regeln der Extremalrechnung muß für das maximale w_1, w_2, \dots -System

$$\frac{\partial}{\partial w_n} \left(\sum_1^{\infty} w_m \ln w_m \right) + \alpha \frac{\partial}{\partial w_n} \left(\sum_1^{\infty} w_m \right) + \beta \frac{\partial}{\partial w_n} \left(\sum_1^{\infty} W_m w_m \right) = 0$$

gelten, wobei α, β geeignete Konstanten sind, und $n = 1, 2, \dots$. D. h.:

$$(\ln w_n + 1) + \alpha + \beta W_n = 0, \quad w_n = e^{-1-\alpha-\beta W_n} = a e^{-\beta W_n},$$

wobei an Stelle von α die Konstante $a = e^{-1-\alpha}$ eingeführt werde.

Aus $\sum_1^{\infty} w_n = 1$ folgt $a = \frac{1}{\sum_1^{\infty} e^{-\beta W_n}}$, also

$$w_n = \frac{e^{-\beta W_n}}{\sum_1^{\infty} e^{-\beta W_m}},$$

und wegen $\sum_1^{\infty} W_n w_n = \mathbf{E}$ muß

$$\frac{\sum_1^{\infty} W_n e^{-\beta W_n}}{\sum_1^{\infty} e^{-\beta W_n}} = \mathbf{E}$$

gelten, was β festlegt. Wenn wir, wie üblich, die „Zustandssumme“

$$Z(\beta) = \sum_1^{\infty} e^{-\beta W_n} = \text{Spur}(e^{-\beta H})$$

einführen (vgl. hierzu und zum folgenden Anm. 197), so ist

$$Z'(\beta) = - \sum_1^{\infty} W_n e^{-\beta W_n} = \text{Spur}(H e^{-\beta H}),$$

also lautet die Bedingung für β

$$- \frac{Z'(\beta)}{Z(\beta)} = \mathbf{E}.$$

(Wir machen hier noch die Annahme, daß $\sum_1^{\infty} e^{-\beta W_n}$ und $\sum_1^{\infty} W_n e^{-\beta W_n}$ für alle $\beta > 0$ konvergieren, d. h. daß für $n \rightarrow \infty$ $W_n \rightarrow \infty$, und zwar schnell genug. Z. B. reicht $\frac{W_n}{\ln n} \rightarrow \infty$ aus.) Für U selbst entsteht so der folgende Ausdruck:

$$U = \sum_1^{\infty} a e^{-\beta W_n} P_{[\varphi_n]} = a e^{-\beta H} = \frac{e^{-\beta H}}{\text{Spur}(e^{-\beta H})} = \frac{e^{-\beta H}}{Z(\beta)}.$$

Die Eigenschaften der Gleichgewichtsgesamtheit U , die durch die Angabe des Wertes von \mathbf{E} oder von β festgelegt wird, also, wie es sein muß, von einem Parameter abhängt, können nun mit der in der Gas- theorie üblichen Methode bestimmt werden.

Die Entropie unserer Gesamtheit ist

$$\begin{aligned} \mathbf{S} &= -N\kappa \text{Spur}(U \ln U) = -N\kappa \text{Spur}\left(\frac{e^{-\beta H}}{Z(\beta)} \ln \frac{e^{-\beta H}}{Z(\beta)}\right) \\ &= -\frac{N\kappa}{Z(\beta)} \text{Spur}(e^{-\beta H} (-\beta H - \ln Z(\beta))) \\ &= \frac{\beta N\kappa}{Z(\beta)} \text{Spur}(H e^{-\beta H}) + \frac{\ln Z(\beta) N\kappa}{Z(\beta)} \text{Spur}(e^{-\beta H}) \\ &= N\kappa \left[-\frac{\beta Z'(\beta)}{Z(\beta)} + \ln Z(\beta) \right]. \end{aligned}$$

und die Gesamtenergie

$$N \mathbf{E} = - N \frac{Z'(\beta)}{Z(\beta)}$$

(diese und nicht \mathbf{E} selbst, ist mit \mathbf{S} in Parallele zu setzen). Damit sind U , \mathbf{S} , $N \mathbf{E}$ durch β ausgedrückt. Anstatt nur β durch \mathbf{E} ausdrücken zu wollen, ist es praktischer, die Temperatur \mathbf{T} des Gleichgewichtsgemisches zu bestimmen, und alles auf diese zurückzuführen. Dies geschieht so: Unser Gleichgewichtsgemisch werde mit einem Wärmereservoir von der Temperatur \mathbf{T}' in Berührung gebracht, und es möge von ihm die Energiemenge $N d\mathbf{E}$ übernehmen — hierbei muß (im Sinne der beiden Hauptsätze) die Gesamtenergie unverändert bleiben, und die Entropie nicht fallen. Somit verliert das Wärmereservoir die Energie $N d\mathbf{E}$, daher ist seine Entropiezunahme $-\frac{N d\mathbf{E}}{\mathbf{T}'}$, und es muß gleichzeitig

$$d\mathbf{S} - \frac{N d\mathbf{E}}{\mathbf{T}'} = \left(\frac{d\mathbf{S}}{N d\mathbf{E}} - \frac{1}{\mathbf{T}'} \right) N d\mathbf{E} \geq 0$$

sein. Andererseits ist offenbar $N d\mathbf{E} \geq 0$ je nachdem, ob $\mathbf{T}' \geq \mathbf{T}$ ist, weil der kältere Körper Energie vom wärmeren übernimmt — somit

bedeutet $\mathbf{T}' \geq \mathbf{T} \Rightarrow \frac{d\mathbf{S}}{N d\mathbf{E}} - \frac{1}{\mathbf{T}'} \geq 0$, d. h. $\mathbf{T}' \geq \frac{N d\mathbf{E}}{d\mathbf{S}} = \frac{N \frac{d\mathbf{E}}{d\beta}}{d\mathbf{S}}$. Somit ist

$$\mathbf{T} = \frac{N \frac{d\mathbf{E}}{d\beta}}{d\mathbf{S}} = - \frac{1}{\kappa} \frac{\left(\frac{Z'(\beta)}{Z(\beta)} \right)'}{\left(\ln Z(\beta) - \beta \frac{Z'(\beta)}{Z(\beta)} \right)'} = - \frac{1}{\kappa} \frac{\left(\frac{Z'(\beta)}{Z(\beta)} \right)'}{-\beta \left(\frac{Z'(\beta)}{Z(\beta)} \right)'} = \frac{1}{\kappa \beta},$$

d. h.

$$\beta = \frac{1}{\kappa \mathbf{T}}.$$

Damit sind U , \mathbf{S} , $N \mathbf{E}$ alle als Funktionen der Temperatur dargestellt.

Die Analogie der oben gewonnenen Ausdrücke für die Entropie, die Gleichgewichtsgesamtheit usw. mit den entsprechenden Resultaten der auf der klassischen Mechanik beruhenden thermodynamischen Theorie ist auffällig. Zunächst die Entropie $-N \kappa \text{Spur}(U \ln U)$. Es ist $U = \sum_1^{\infty} w_n P_{[\varphi_n]}$ ein Gemisch der Gesamtheiten $P_{[\varphi_1]}, P_{[\varphi_2]}, \dots$ im Verhältnisse $w_1 : w_2 : \dots$, d. h. $N w_1$ φ_1 -Systeme, $N w_2$ φ_2 -Systeme, Die Boltzmannsche Entropie dieser Gesamtheit wird mit Hilfe der „Komplexionszahl“ $\frac{N!}{(N w_1)! (N w_2)! \dots}$ gewonnen: sie ist ihr κ -facher Logarithmus²⁰¹. Da N groß ist, dürfen wir durch die Stirlingsche Formel $x! \approx \sqrt{2\pi x} e^{-x} x^x$ nähern, dann geht $\kappa \ln \frac{N!}{(N w_1)! (N w_2)! \dots}$ im wesentlichen in $-N \kappa \sum_1^{\infty} w_n \ln w_n$ über — und das ist gerade — Spur $(U \ln U)$.

Ferner hatten wir die Gleichgewichtsgesamtheit $U = e^{-\frac{H}{\kappa T}}$ (den Normierungsfaktor $\frac{1}{Z(\beta)}$ lassen wir fort), dies ist gleich $\sum_1^{\infty} e^{-\frac{W_n}{\kappa T}} P_{[\varphi_n]}$, also ein Gemisch der Zustände $P_{[\varphi_1]}, P_{[\varphi_2]}, \dots$, d. h. der stationären Zustände mit den Energien W_1, W_2, \dots , mit den bzw. (relativen) Gewichten $e^{-\frac{W_1}{\kappa T}} : e^{-\frac{W_2}{\kappa T}} : \dots$. Wenn ein Energieeigenwert mehrfach ist, etwa $W_{n_1} = \dots = W_{n_p} = W$, so tritt im Gemisch $P_{[\varphi_{n_1}]} + \dots + P_{[\varphi_{n_p}]}$ mit dem Gewicht $e^{-\frac{W}{\kappa T}}$ auf, d. h. die richtig normierte Gesamtheit $\frac{1}{p} (P_{[\varphi_{n_1}]} + \dots + P_{[\varphi_{n_p}]})$ (vgl. den Anfang von IV. 3.) mit dem Gewicht $\nu e^{-\frac{W}{\kappa T}}$. Genau so ist aber die klassische „kanonische“ Gesamtheit definiert (abgesehen vom Auftreten der spezifisch quantenmechanischen Bildung $\frac{1}{p} (P_{[\varphi_{n_1}]} + \dots + P_{[\varphi_{n_p}]})$): dies ist der sog. Boltzmannsche Satz²⁰¹.

Für $T \rightarrow 0$ streben die Gewichte $e^{-\frac{W_n}{\kappa T}}$ gegen 1, also unser U gegen $\sum_1^{\infty} P_{[\varphi_n]} = 1$, somit ist $U = 1$ der absolute Gleichgewichtszustand, falls keine Energiebeschränkungen gelten — ein Resultat, daß wir schon in IV. 3. gewonnen hatten. Man sieht: die „a-priori-Gleichwahrscheinlichkeit der Quantenbahnen“ (d. i. der einfachen, unentarteten — im allgemeinen ist die Vielfachheit des Eigenwertes das „a-priori-Gewicht“, vgl. das oben Gesagte) ergibt sich von selbst aus dieser Theorie.

Es lohnt sich festzustellen, wieviel unthermodynamisch über die Gleichgewichtsgesamtheit U von gegebener Energie ausgesagt werden kann — d. h. allein auf Grund der Tatsachen, daß U stationär ist (sich im Laufe der Zeit nicht ändert, Prozeß **1.**), und daß es bei allen Messungen, die die Energie nicht beeinflussen (d. h. bei Messungen von mit der Energie gleichzeitig meßbaren Größen, Prozeß **2.** mit vertauschbaren R, H , d. h. $\varphi_1, \varphi_2, \dots$ Eigenfunktionen von H) unverändert bleibt.

Das erstere bedeutet wegen der Differentialgleichung $\frac{\partial}{\partial t} U = \frac{2\pi i}{h} (UH - HU)$ lediglich, daß H, U vertauschbar sind. Das letztere besagt: wenn $\varphi_1, \varphi_2, \dots$ als vollständiges Eigenfunktionensystem von H verwendbar sind, so ist $U = U'$, d. h. $\varphi_1, \varphi_2, \dots$ sind auch Eigenfunktionen von U . Die entsprechenden H -Eigenwerte seien W_1, W_2, \dots , die von U w_1, w_2, \dots . Ist $W_j = W_k$, so können wir bei H φ_j, φ_k durch $\frac{\varphi_j + \varphi_k}{\sqrt{2}}, \frac{\varphi_j - \varphi_k}{\sqrt{2}}$ ersetzen, also sind dies auch Eigenfunktionen von U — woraus $w_j = w_k$ folgt. Daher kann eine Funktion $F(x)$ mit $F(W_n) = w_n$

($n = 1, 2, \dots$) konstruiert werden, und es ist $F(H) = U$. Daß dies hinreichend ist, ist klar, ebenso, daß es die Vertauschbarkeit von H und U nach sich zieht.

Es ergibt sich also auf diesem Wege wohl $U = F(H)$, aber eine Bestimmung von $F(x)$ (es ist, wie wir wissen, $F(x) = \frac{1}{Z(\beta)} e^{-\beta x}$, $\beta = \frac{1}{kT}$) gelingt nicht. Aus $\text{Spur}(U) = 1$, $\text{Spur}(UH) = E$ folgt noch

$$\sum_1^{\infty} n F(W_n) = 1, \quad \sum_1^{\infty} W_n F(W_n) = E,$$

aber damit ist diese Methode ganz erschöpft.

4. Die makroskopische Messung.

Obwohl unser Entropieausdruck, wie wir sahen, ein der klassischen Entropie völlig analoges Gebilde ist, muß es doch befremden, daß sie bei der zeitlichen Entwicklung des Systems (Prozeß 2.) invariant ist, und nur bei Messungen (Prozeß 1.) zunimmt — in der klassischen Theorie (wo die Messungen überhaupt keine Rolle spielten) nahm sie in der Regel schon bei der gewöhnlichen mechanischen zeitlichen Weiterentwicklung des Systems zu. Es ist darum notwendig, dieses scheinbar paradoxe Verhalten aufzuklären.

Die normale klassisch-thermodynamische Überlegung verläuft so: Man nehme einen Behälter vom Volum \mathcal{V} , in dessen rechter Hälfte (Volum $\frac{\mathcal{V}}{2}$, durch eine Zwischenwand von der anderen Hälfte getrennt) sich M Moleküle eines (der Einfachheit halber idealen) Gases von der Temperatur T befinden. Würden wir dieses Gas isotherm und reversibel aufs Volum \mathcal{V} expandieren (indem wir die Zwischenwand durch den Gasdruck zurücktreiben, die dabei gewonnene mechanische Arbeit verwerten, und die Gastemperatur mit Hilfe eines großen Wärmereservoirs von der Temperatur T konstant halten), so nimmt die Entropie außen (im Reservoir) um $M \varkappa \ln 2$ ab (vgl. Anm. ¹⁹⁵), also die Gasentropie um ebensoviel zu. Ziehen wir dagegen die Zwischenwand einfach hinaus, so diffundiert das Gas in die freie linke Hälfte hinein, das Volum wächst auf \mathcal{V} — d. h. die Entropie nimmt um $M \varkappa \ln 2$ zu, ohne daß irgendeine Kompensation geschaffen würde. Der Prozeß ist somit irreversibel, die Entropie hat im Laufe der einfachen mechanischen zeitlichen Entwicklung des Systems (nämlich bei der Diffusion) zugenommen. Warum ergibt unsere Theorie nichts Ähnliches?

Die Verhältnisse werden am klarsten, wenn man $M = 1$ setzt, für sein solches Ein-Molekül-Gas gilt die Thermodynamik noch immer, und es ist richtig, daß seine Entropie um $\varkappa \ln 2$ zunimmt, wenn sein Volum verdoppelt wird. Jedoch ist dieser Unterschied $\varkappa \ln 2$ nur so lange wirklich da, als man vom Molekül wirklich nicht mehr weiß, als daß es sich

im Volum $\frac{\mathcal{V}}{2}$ bzw. \mathcal{V} befindet. Wenn z. B. das Molekül im Volum \mathcal{V} ist, es aber bekannt ist, ob es sich rechts oder links von der Mitte des Behälters befindet, so genügt es, in die Mitte eine Zwischenwand einzuschieben, und diese isotherm-reversibel vom Molekül bis ans linke bzw. rechte Ende des Behälters abdrängen zu lassen. Dabei wird die mechanische Arbeit $\kappa T \ln 2$ geleistet, d. h. diese Energie dem Wärmereservoir entnommen. Somit ist am Ende das Molekül wieder im Volum \mathcal{V} , jedoch wissen wir jetzt nicht mehr, ob es sich rechts oder links von der Mitte befindet, dafür ist aber eine kompensierende Entropieabnahme von $\kappa \ln 2$ (im Reservoir) da. D. h. wir haben unser Wissen gegen die Entropieabnahme $\kappa \ln 2$ eingetauscht²⁰². D. h.: im Volum \mathcal{V} ist die Entropie dieselbe wie im Volum $\frac{\mathcal{V}}{2}$, falls man weiß, in welcher Hälfte des Behälters sich das Molekül befindet. Wenn man also das Molekül vor der Diffusion genau kannte (Ort und Impuls), so kann man für jeden Moment nach der Diffusion berechnen, ob es sich in der rechten oder linken Hälfte befindet, d. h. die Entropie hat gar nicht zugenommen. Bloß wenn einem lediglich die makroskopische Angabe zur Verfügung steht, daß das Volum vorher $\frac{\mathcal{V}}{2}$ war, nimmt die Entropie bei der Diffusion wirklich zu.

Für einen klassischen Beobachter, der alle Koordinaten und Impulse kennt, ist also die Entropie konstant, und zwar 0, da die Boltzmannsche „Komplexionszahl“ 1 ist (vgl. a. a. O. Anm. ²⁰¹): genau wie in unserer Theorie bei Zuständen, $U = P_{\{\varphi\}}$, die ja auch dem höchstmöglichen Stande der Kenntnisse des Beobachters bezüglich des Systems entsprechen.

Die zeitlichen Variationen der Entropie rühren also daher, daß der Beobachter nicht alles weiß, bzw. daß er nicht alles ermitteln (messen) kann, was prinzipiell meßbar ist. Seine Sinne gestatten eben nur, die sog. makroskopischen Größen wahrzunehmen. Diese Aufklärung des eingangs erwähnten scheinbaren Widerspruchs legt uns aber die Verpflichtung auf, das genaue Analogon der klassischen makroskopischen Entropie für die quantenmechanischen Gesamtheiten aufzusuchen, d. h. die Entropie vom Standpunkte eines solchen Beobachters gesehen, der nicht alle Größen messen kann, sondern nur einige ausgezeichnete, nämlich die makroskopischen Größen, und u. U. auch diese nur mit beschränkter Genauigkeit.

In III. 3. erkannten wir, daß alle Messungen mit beschränkter Genauigkeit durch absolut genaue Messungen anderer Größen ersetzt werden können, die Funktionen von ihnen sind, und reine Punktspektren haben. Ist nun \mathfrak{N} eine solche Größe, R ihr Operator, $\lambda^{(1)}, \lambda^{(2)}, \dots$ die voneinander verschiedenen unter seinen Eigenwerten, so kommt die Messung von \mathfrak{N} der Beantwortung der folgenden Fragen gleich: „Ist

$\mathfrak{N} = \lambda^{(1)}$?, „Ist $\mathfrak{N} = \lambda^{(2)}$?, ... Ja wir können auch direkt sagen: soll \mathfrak{C} mit dem Operator S mit beschränkter Genauigkeit gemessen werden, etwa entschieden werden, in welchem Intervall $c_{n-1} < \lambda \leq c_n$ es liegt ($\dots < c_{-2} < c_{-1} < c_0 < c_1 < c_2 < \dots$, $c_n \rightarrow +\infty$ bzw. $-\infty$ für $n \rightarrow +\infty$ bzw. $-\infty$), so handelt es sich um die Beantwortung aller Fragen „Liegt \mathfrak{C} in $c_{n-1} < \lambda \leq c_n$?, $n = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$.

Solchen Fragen entsprechen nun nach III. 5. Projektionsoperatoren E , deren Größen \mathfrak{C} (die nur die zwei Werte 0, 1 haben) eigentlich zu messen sind. In unseren Beispielen sind die \mathfrak{C} die Funktionen $F_n(\mathfrak{N})$, $n = 1, 2, \dots$, wobei $F(\lambda) \begin{cases} = 1, & \text{für } \lambda = \lambda^{(n)} \\ = 0, & \text{sonst} \end{cases}$ ist, bzw. die Funktionen $G_n(\mathfrak{C})$, $n = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$, wobei

$$G(\lambda) \begin{cases} = 1, & \text{für } c_{n-1} < \lambda \leq c_n \\ = 0, & \text{sonst} \end{cases}$$

ist — und die E sind entsprechend die $F_n(R)$ bzw. $G_n(S)$. Anstatt also die makroskopisch meßbaren Größen \mathfrak{C} inkl. der erreichbaren Meßgenauigkeit anzugeben, können die durch makroskopische Messungen beantwortbaren Fragen \mathfrak{C} angeben, bzw. deren Projektionsoperatoren E (vgl. III. 5.). Dies ist geradezu die Kennzeichnung eines makroskopischen Beobachters: die Angabe seiner E (klassisch würde man ihn etwa dadurch kennzeichnen, daß er in jedem cm^3 des Gasvolums die Temperatur und den Druck — evtl. mit gewissen Genauigkeitsschranken — zu messen vermag, aber nichts anderes)²⁰³.

Nun liegt es im Wesen des makroskopischen Messens, daß alles, was so überhaupt meßbar ist, auch gleichzeitig meßbar ist — d. h. daß alle makroskopisch beantwortbaren Fragen \mathfrak{C} gleichzeitig beantwortbar sind, d. h. daß die E alle miteinander vertauschbar sind. Gerade darum hat ja die nichtgleichzeitige Meßbarkeit der quantenmechanischen Größen anfangs einen so paradoxen Eindruck gemacht, weil dieser Begriff der makroskopischen Anschauungsweise fremd ist. Bei der großen prinzipiellen Wichtigkeit dieses Punktes ist es angebracht, ihn noch etwas genauer zu diskutieren.

Vergegenwärtigen wir uns die Methode, mit der zwei notorisch nicht gleichzeitig meßbare Größen, z. B. die Koordinate q und der Impuls p (vgl. III. 4.), mit beschränkter Genauigkeit auf einmal gemessen werden. Die mittleren Meßfehler seien bzw. ε, η (nach der Unbestimmtheitsrelation ist $\varepsilon\eta \sim \hbar$), die Diskussion in III. 4. zeigte, daß bei solchen Genauigkeitsansprüchen die gleichzeitige Messung tatsächlich möglich ist: die q -(Orts-)Messung erfolgt mit nicht zu kurzwelligem Licht, die p -(Impuls-)Messung mit nicht zu langen Lichtwellenzügen. Wenn alles so eingerichtet ist, so besteht die eigentliche Messung daraus, daß die zwei Lichtquanten irgendwie nachgewiesen, z. B. photographiert werden:

das eine ist das bei der q -Messung durch Comptoneffekt abgelenkte Lichtquant, das andere bei der p -Messung mit Dopplereffekt reflektierte, in seiner Frequenz geänderte, und dann zur Ermittlung dieser Frequenz durch eine optische Vorrichtung (Prisma, Beugungsgitter) abgelenkte Lichtquant. Am Ende des Experimentes sind also zwei Lichtquanten oder gar zwei photographische Platten da, und aus den Richtungen der Lichtquanten, oder den Schwärzungsorten auf den Platten, haben wir q und p zu berechnen. Hier ist aber hervorzuheben: nichts hindert uns, die zwei genannten Richtungen, oder Schwärzungsorte, beliebig genau zu bestimmen, denn diese sind offenbar gleichzeitig meßbare Größen (es sind Impulse bzw. Koordinaten zweier verschiedener Objekte) — aber für die Messung von q und p nützt dies nicht viel. Denn wie in III. 4. gezeigt wurde, ist die Kopplung dieser Größen mit q und p derart, daß für diese gerade die Unsicherheiten ε, η übrigbleiben (auch bei vollkommen genauer Kenntnis der obigen Größen), und man kann es nicht so einrichten, daß $\varepsilon\eta \ll h$ wird.

Führen wir also die zwei genannten Richtungen oder Schwärzungsorte selbst als physikalische Größen ein, ihre Operatoren mögen Q', P' heißen, so sehen wir: Q', P' sind wohl genau vertauschbar, aber die zu q, p gehörigen Operatoren Q, P können mit ihrer Hilfe mit keiner höheren Genauigkeit als bzw. ε, η ausgedrückt werden. Die zu Q', P' gehörigen Größen seien q', p' ; die Interpretation, daß nicht q, p selbst, sondern q', p' die eigentlichen makroskopisch meßbaren Größen sind, liegt sehr nahe (tatsächlich werden ja q', p' gemessen!), und sie steht mit unserem Postulat von der gleichzeitigen Meßbarkeit aller makroskopischen Größen im Einklang.

Es ist zweckmäßig, diese Feststellung allgemein als ein Charakteristikum der makroskopischen Betrachtungsweise zu deuten. Danach besteht diese darin, alle möglichen Operatoren A, B, C, \dots , die in der Regel miteinander unvertauschbar sind, durch andere Operatoren A', B', C', \dots zu ersetzen, von denen sie näherungsweise Funktionen sind, und die miteinander vertauschbar sind. Da wir gleich diese Funktionen der A', B', C', \dots mit A, B, C, \dots bezeichnen können, dürfen wir dies auch so sagen: A', B', C', \dots sind Näherungen der A, B, C, \dots , aber miteinander genau vertauschbar. Wenn für die Größe der Operatoren $A' - A, B' - B, C' - C, \dots$ die bzw. Zahlen $\varepsilon_A, \varepsilon_B, \varepsilon_C, \dots$ ein Maß geben, so sieht man, daß $\varepsilon_A \varepsilon_B$ in der Größenordnung von $AB - BA$ (das ja allgemein $\neq 0$ ist) sein wird usw. — dies ergibt die Grenzen der erzielbaren Annäherungen. Natürlich ist es vernünftig, sich schon bei der Aufstellung der A, B, C, \dots auf diejenigen Operatoren zu beschränken, deren physikalische Größen in wenigstens leidlicher Näherung makroskopisch zu erfassen sind.

Diese ganz qualitativen Ausführungen bleiben ein leeres Programm, solange wir nicht zeigen können, daß sie etwas mathematisch Durch-

führbares verlangen. Darum wollen wir für den charakteristischen Fall Q, P die Frage nach der Existenz der oben charakterisierten Q', P' rein mathematisch weiter diskutieren. Es seien also zwei positive Zahlen ε, η mit $\varepsilon\eta = \frac{\hbar}{4\pi}$ gegeben, wir suchen zwei vertauschbare Q', P' , so daß $Q' - Q, P' - P$ (in einem noch näher zu definierenden Sinne) die bzw. Größenordnungen ε, η haben.

Wir machen dies mit vollkommen genau meßbaren Größen q', p' , d. h. Q', P' sollen reine Punktspektren haben; da sie vertauschbar sind, gibt es ein aus gemeinsamen Eigenfunktionen beider bestehendes vollständiges normiertes Orthogonalsystem: $\varphi_1, \varphi_2, \dots$ (vgl. II. 10.). Die entsprechenden Eigenwerte von Q', P' seien a_1, a_2, \dots bzw. b_1, b_2, \dots , also $Q' = \sum_1^n a_n P_{[\varphi_n]}$, $P' = \sum_1^n b_n P_{[\varphi_n]}$. Daß ihre Messung — die so ausgeführt werden möge, daß nach ihr einer der Zustände $\varphi_1, \varphi_2, \dots$ vorliegt (man messe etwa eine Größe \mathfrak{R} , deren Operator R die Eigenfunktionen $\varphi_1, \varphi_2, \dots$ und lauter verschiedene Eigenwerte c_1, c_2, \dots hat, dann sind Q', P' Funktionen von R) — eine Messung von Q und P näherungsweise impliziert, besagt offenbar dieses: im Zustande φ_n sind Q, P annähernd durch die bzw. Werte von Q', P' , d. i. a_n, b_n , ausgedrückt, d. h. ihre Streuungen um diese Werte sind klein. Diese Streuungen sind die Erwartungswerte der Größen $(q - a_n)^2, (p - b_n)^2$, d. h.

$$\begin{aligned} ((Q - a_n \mathbf{1})^2 \varphi_n, \varphi_n) &= \|(Q - a_n \mathbf{1}) \varphi_n\|^2 = \|Q \varphi_n - a_n \varphi_n\|^2, \\ ((P - b_n \mathbf{1})^2 \varphi_n, \varphi_n) &= \|(P - b_n \mathbf{1}) \varphi_n\|^2 = \|P \varphi_n - b_n \varphi_n\|^2. \end{aligned}$$

Sie sind die Maßstäbe für das Quadrat des Unterschiedes von Q' und Q , bzw. P' und P , d. h. sie müssen ungefähr ε^2 bzw. η^2 sein. Wir fordern also:

$$\|Q \varphi_n - a_n \varphi_n\| \lesssim \varepsilon, \|P \varphi_n - b_n \varphi_n\| \lesssim \eta.$$

Anstatt von Q', P' zu reden, ist es darum zweckmäßiger, lediglich ein vollständiges normiertes Orthogonalsystem $\varphi_1, \varphi_2, \dots$ zu suchen, für welches, bei geeigneter Wahl von a_1, a_2, \dots und b_1, b_2, \dots die obigen Abschätzungen gelten.

Einzelne φ (mit $\|\varphi\| = 1$), für die bei geeignetem a, b

$$\|Q \varphi - a \varphi\| = \varepsilon, \|P \varphi - b \varphi\| = \eta$$

gilt, kennen wir aus III. 4.:

$$\varphi_{e, \sigma, \gamma} = \varphi_{e, \sigma, \gamma}(q) \equiv \left(\frac{2\gamma}{\hbar}\right)^{1/4} e^{-\frac{\pi\gamma}{\hbar}(q-\sigma)^2 + \frac{2\pi e}{\hbar} i q},$$

dabei haben wir wegen $\varepsilon\eta = \frac{\hbar}{4\pi}$ wieder $\varepsilon = \sqrt{\frac{\hbar\gamma}{4\pi}}$, $\eta = \sqrt{\frac{\hbar}{4\pi\gamma}}$ gesetzt (d. h. $\gamma = \frac{\varepsilon}{\eta}$), und es ist $a = \sigma$, $b = q$ zu wählen. Nun gilt es aber, aus diesen $\varphi_{e, \sigma, \gamma}$ ein vollständiges normiertes Orthogonalsystem

zusammensetzen. Da ϱ der Q - und σ der P -Erwartungswert ist, ist es plausibel, daß man ϱ, σ unabhängig voneinander je ein Zahlensystem durchlaufen lassen soll, und zwar so, daß das erstere ungefähr die Dichte ε hat, und das letztere ungefähr die Dichte η . Tatsächlich erweist es sich also praktisch, die Einheiten $2\sqrt{\pi} \cdot \varepsilon = \sqrt{\hbar\gamma}$ und $2\sqrt{\pi} \cdot \eta = \sqrt{\frac{\hbar}{\gamma}}$ zu wählen, d. h. $\varrho = \sqrt{\hbar\gamma} \mu$, $\sigma = \sqrt{\frac{\hbar}{\gamma}} \nu$ ($\mu, \nu = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$). Die $\psi_{\mu, \nu} = \varphi \frac{1}{\sqrt{\hbar\gamma} \mu}, \sqrt{\frac{\hbar}{\gamma}} \nu, \nu$ ($\mu, \nu = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$) sollen

also den φ_n ($n = 1, 2, \dots$) entsprechen, daß wir zwei Indices μ, ν an Stelle des einen n haben, ist offenbar unwesentlich.

Nun sind aber diese $\psi_{\mu, \nu}$ noch nicht orthogonal. (Normiert sind sie, und es gilt

$$\|Q \psi_{\mu, \nu} - \sqrt{\hbar\gamma} \mu\| = \varepsilon, \|P \psi_{\mu, \nu} - \sqrt{\frac{\hbar}{\gamma}} \nu\| = \eta.)$$

Wenn wir sie nach dem E. Schmidtschen Verfahren (in irgendeiner Reihenfolge) „orthogonalisieren“ (vgl. II. 2., Beweis von Satz 8.), so kann man für das entstehende normierte Orthogonalsystem $\psi'_{\mu, \nu}$ ohne besondere Schwierigkeiten die Vollständigkeit beweisen, und die Abschätzungen

$$\|Q \psi_{\mu, \nu} - \sqrt{\hbar\gamma} \mu\| \leq C \varepsilon, \|P \psi_{\mu, \nu} - \sqrt{\frac{\hbar}{\gamma}} \nu\| \leq C \eta$$

sicherstellen, wobei sich für C Wert ~ 60 ergibt. (Derselbe ließe sich vermutlich noch bedeutend herabsetzen.) Der Beweis dieser Tatsachen führt zu ziemlich langwierigen, aber keinerlei neue Gesichtspunkte benötigenden, Rechnungen, die wir übergehen. Die Faktoren $C \sim 60$ machen nicht viel aus, da $\varepsilon \eta = \frac{\hbar}{4\pi}$ in makroskopischen (CGS-)Einheiten gemessen von ganz exorbitanter Kleinheit ist (ca. 10^{-28} !).

Zusammenfassend können wir also sagen, daß es motiviert ist, die Vertauschbarkeit aller makroskopischen Operatoren anzunehmen, insbesondere also auch diejenige der w. o. eingeführten makroskopischen Projektionsoperatoren E .

Die E entsprechen allen makroskopisch beantwortbaren Fragen \mathfrak{C} , d. h. allen Fallunterscheidungen, die sich auf das untersuchte System beziehen, und die makroskopisch durchgeführt werden können. Sie sind, wie wir sahen, alle vertauschbar, nach III. 5. gehört mit E auch $1 - E$ zu ihnen, ferner mit E, F auch $EF, E + F - EF, E - EF$. Es liegt nahe, anzunehmen, daß es ihrer nur endlich viele gibt: E_1, \dots, E_n . Wir führen für einen Augenblick die Bezeichnung $E^{(+)} = E, E^{(-)} = 1 - E$ ein, und betrachten alle 2^n Produkte $E_1^{(s_1)} \dots E_n^{(s_n)}$ ($s_1, \dots, s_n = \pm$). Je zwei verschiedene von ihnen haben das Produkt Null: denn sind $E_1^{(s_1)} \dots E_n^{(s_n)}$ und $E_1^{(t_1)} \dots E_n^{(t_n)}$ zwei solche, und etwa $s_r \neq t_r$, so kommen in ihrem Produkt die Faktoren $E_r^{(s_r)}, E_r^{(t_r)}$ vor, d. h. $E_r^{(+)} = E$

und $E_v^{(-)} = 1 - E_v$, deren Produkt Null ist. Jedes E_v ist Summe einiger solcher Produkte: es ist nämlich

$$E_v = \sum_{s_1, \dots, s_{v-1}, s_{v+1}, \dots, s_n = \pm} E_1^{(s_1)} \dots E_{v-1}^{(s_{v-1})} \cdot E_v^{(+)} \cdot E_{v+1}^{(s_{v+1})} \dots E_n^{(s_n)}.$$

Nennen wir die von Null verschiedenen unter diesen Produkten E'_1, \dots, E'_m (es ist offenbar $m \leq 2^n$, es muß aber sogar $m \leq n-1$ sein, da diese unter den E_1, \dots, E_n vorkommen müssen, und $\neq 0$ sind), so ist: $E'_\mu \neq 0, E'_\mu E'_\nu = 0$ für $\mu \neq \nu$, jedes E_μ ist Summe einiger E'_ν . (Aus dem letzteren folgt übrigens $n = 2^m$.) Man beachte: es kann nie $E_\mu + E_\nu = E'_e$ sein, wenn nicht $E_\mu = 0, E_\nu = E'_e$ oder $E_\mu = E'_e, E_\nu = 0$ ist. Denn andernfalls wären E_μ, E_ν Summen einiger E'_π , also E'_e Summe von ≥ 2 E'_π (evtl. mit Wiederholungen). Nach II. 4., Satz 15., 16. wären diese alle voneinander verschieden, da es ≥ 2 sind, auch von E'_e — daher ist ihr Produkt mit E'_e Null, also auch dasjenige ihrer Summe, was damit widerspricht, daß diese E'_e sein sollte.

Die den E'_1, \dots, E'_m entsprechenden Eigenschaften $\mathfrak{G}'_1, \dots, \mathfrak{G}'_m$ sind also makroskopische Eigenschaften von folgender Art: Keine ist absurd. Je zwei schließen sich gegenseitig aus. Jede makroskopische Eigenschaft entsteht durch Disjunktion aus einigen von ihnen. Keine von ihnen kann durch Disjunktion in zwei schärfere makroskopische Eigenschaften zerlegt werden. $\mathfrak{G}'_1, \dots, \mathfrak{G}'_m$ sind also die weitestgehenden makroskopischen Fallunterscheidungen, die überhaupt gemacht werden können, sie sind makroskopisch unzerlegbar.

Die Endlichkeit ihrer Anzahl werden wir im folgenden nicht fordern, sondern nur die Existenz der makroskopisch unzerlegbaren Eigenschaften: $\mathfrak{G}'_1, \mathfrak{G}'_2, \dots$. Ihre Projektionsoperatoren seien E'_1, E'_2, \dots , wieder alle $\neq 0$, je zwei orthogonal, jedes makroskopische E Summe einiger von ihnen.

Also ist auch 1 Summe einiger von ihnen, wäre ein E'_ν nicht darunter, so wäre es zu diesen, also zu 1, orthogonal: also $E'_\nu = E'_\nu \cdot 1 = 0$, was unmöglich ist. Also ist $E'_1 + E'_2 + \dots = 1$. Wir lassen die Akzente ' weg: $\mathfrak{G}_1, \mathfrak{G}_2, \dots$ und E_1, E_2, \dots . Die zu ihnen gehörigen abgeschlossenen Linearmanigfaltigkeiten sollen $\mathfrak{M}_1, \mathfrak{M}_2, \dots$ heißen, deren Dimensionszahlen s_1, s_2, \dots .

Wären die $s_n = 1$, d. h. \mathfrak{M}_n eindimensional, so wäre also $\mathfrak{M}_n = [\varphi_n], E_n = P_{[\varphi_n]}$, und wegen $E_1 + E_2 + \dots = 1$ die $\varphi_1, \varphi_2, \dots$ ein vollständiges normiertes Orthogonalsystem. Dies würde bedeuten, daß bereits makroskopische Messungen die vollständige Bestimmung des Zustandes des betrachteten Systems ermöglichen. Da dies normalerweise nicht der Fall ist, wird im allgemeinen $s_n > 1$, ja sogar $s_n \gg 1$ sein.

Man beachte übrigens, daß die E_n , die die elementaren Bausteine der makroskopischen Beschreibung der Welt sind, in einem gewissen

Sinne der in der klassischen Theorie üblichen Zelleneinteilung des Phasenraumes entsprechen. Daß sie das Verhalten unvertauschbarer Operatoren näherungsweise wiederzugeben vermögen, insbesondere dasjenige der für den Phasenraum so wichtigen Q, P , haben wir schon gesehen.

Welche Entropie hat nun das Gemisch U für einen makroskopischen Beobachter, dessen unzerlegbare Projektionsoperatoren E_1, E_2, \dots sind? Oder genauer: wieviel Entropie kann ein solcher Beobachter beim Verwandeln von U in V maximal gewinnen — d. h. welche Entropieabnahme (sie kann natürlich u. U. ≥ 0 sein) in äußeren Objekten vermag er, als Kompensation für den Übergang $U \rightarrow V$, bestenfalls zu erzeugen?

Zunächst ist hervorzuheben, daß er zwei Gesamtheiten U, U' , für die alle E_1, E_2, \dots denselben Erwartungswert haben, d. h. $\text{Spur}(UE_n) = \text{Spur}(U'E_n)$ ($n = 1, 2, \dots$) ist, gar nicht voneinander unterscheiden kann. Nach einiger Zeit könnte er es zwar, da sich U, U' nach \mathcal{Z} . verwandeln, und $\text{Spur}(AUA^{-1}E_n) = \text{Spur}(AU'A^{-1}E_n)$, $A = e^{-\frac{2\pi i}{\hbar}tH}$, nicht mehr gelten muß²⁰⁴ — aber wir betrachten ja nur sofort ausführbare Messungen. Unter den obigen Bedingungen dürfen wir also U, U' als ununterscheidbar ansehen. Ferner kann er auch nur solche semipermeable Wände verwenden, die φ einiger E_n durchlassen, und die der übrigen unverändert reflektieren. Dies genügt nun, wie man sich an Hand der Methode von V. 2. mühelos überzeugt, um ein $U' = \sum_1^{\infty} x_n E_n$ in ein $V' = \sum_1^{\infty} y_n E_n$ reversibel überzuführen, so daß der Entropieunterschied immer noch $\varkappa \text{Spur}(U' \ln U') - \varkappa \text{Spur}(V' \ln V')$ ist, d. h. die Entropie von U' gleich $-\varkappa \text{Spur}(U' \ln U')$. Allerdings ist zu beachten: damit solche U' mit $\text{Spur } U' = 1$ überhaupt existieren, müssen die $\text{Spur } E_n$, d. h. die Zahlen s_n endlich sein. Wir nehmen also an, daß alle s_n endlich sind. U' hat den s_1 -fachen Eigenwert x_1 , den s_2 -fachen Eigenwert x_2, \dots , also $-U' \ln U'$ den s_1 -fachen Eigenwert $-x_1 \ln x_1$, den s_2 -fachen Eigenwert $-x_2 \ln x_2, \dots$. Somit bedeutet $\text{Spur } U' = 1 \quad \sum_1^{\infty} s_n x_n = 1$, und die Entropie ist gleich $-\varkappa \sum_1^{\infty} s_n x_n \ln x_n$.

Wegen

$$U'E_m = \sum_1^{\infty} x_n E_n E_m = x_m E_m, \quad \text{Spur}(U'E_m) = x_m \text{Spur } E_m = s_m x_m,$$

$$x_m = \frac{\text{Spur}(U'E_m)}{s_m} \text{ ist daher die besagte Entropie gleich}$$

$$-\varkappa \sum_1^{\infty} \text{Spur}(U'E_n) \ln \frac{\text{Spur}(U'E_n)}{s_n}.$$

Bei beliebigem U ($\text{Spur } U = 1$) muß die Entropie auch gleich

$$-\varkappa \sum_1^{\infty} \text{Spur}(UE_n) \ln \frac{\text{Spur}(UE_n)}{s_n}$$

sein: denn setzen wir

$$x_n = \frac{\text{Spur}(U E_n)}{s_n}, \quad U' = \sum_1^{\infty} x_n E_n,$$

so ist $\text{Spur}(U E_n) = \text{Spur}(U' E_n)$, und da U, U' ununterscheidbar sind, haben sie dieselbe Entropie.

Es ist noch zu erwähnen, daß diese Entropie die gewöhnliche stets übertrifft: es ist stets

$$-\kappa \sum_1^{\infty} \text{Spur}(U E_n) \ln \frac{\text{Spur}(U E_n)}{s_n} \geq -\kappa \text{Spur}(U \ln U),$$

und das $=$ -Zeichen gilt nur für $U = \sum_1^{\infty} x_n E_n$. Nach den Resultaten

von V. 3. trifft dies bestimmt zu, wenn $U' = \sum_1^{\infty} \frac{\text{Spur}(U E_n)}{s_n} E_n$ durch einige (nicht notwendig makroskopische) Anwendungen des Prozesses $\mathbf{1}$. aus U erzeugt werden kann — denn links steht ja $-\kappa \text{Spur}(U' \ln U')$, und $U = \sum_1^{\infty} x_n E_n$ bedeutet dasselbe wie $U = U'$. Wir nehmen ein normiertes Orthogonalsystem $\varphi_1^{(n)}, \dots, \varphi_{s_n}^{(n)}$, welches die zu E_n gehörige abgeschlossene Linearmannigfaltigkeit \mathfrak{M}_n aufspannt, wegen $\sum_1^{\infty} E_n = \mathbf{1}$ bilden alle $\varphi_\nu^{(n)}$ ($n = 1, 2, \dots, \nu = 1, \dots, s_n$) ein vollständiges normiertes Orthogonalsystem. Sei R ein Operator, dessen Eigenfunktionen (mit lauter verschiedenen Eigenwerten) sie sind, \mathfrak{R} seine physikalische Größe. Bei der Messung von \mathfrak{R} wird aus U nach $\mathbf{1}$.

$$U'' = \sum_1^{\infty} \sum_1^{s_n} (U \varphi_\nu^{(n)}, \varphi_\nu^{(n)}) \cdot P_{[\varphi_\nu^{(n)}]}.$$

Sodann setzen wir

$$\psi_\mu^{(n)} = \frac{1}{\sqrt{s_n}} \sum_1^{s_n} e^{\frac{2\pi i}{s_n} \mu \nu} \varphi_\nu^{(n)} \quad (\mu = 1, \dots, s_n),$$

die $\psi_1^{(n)}, \dots, \psi_{s_n}^{(n)}$ bilden ein normiertes Orthogonalsystem, das dieselbe abgeschlossene Linearmannigfaltigkeit aufspannt wie die $\varphi_1^{(n)}, \dots, \varphi_{s_n}^{(n)}$: \mathfrak{M}_n . Daher bilden auch die $\psi_\nu^{(n)}$ ($n = 1, 2, \dots, \nu = 1, \dots, s_n$) ein vollständiges normiertes Orthogonalsystem, und wir bilden einen Operator S mit diesen Eigenfunktionen, und die dazugehörige physikalische Größe \mathfrak{S} . Wir konstatieren noch die Gültigkeit der folgenden Formeln:

$$(P_{[\varphi_\nu^{(n)}]} \psi_\mu^{(m)}, \psi_\mu^{(m)}) \left\{ \begin{array}{l} = 0 \quad \text{für } m \neq n \\ = \frac{1}{s_n} \quad \text{für } m = n \end{array} \right\},$$

$$\sum_1^{s_n} P_{[\varphi_\nu^{(n)}]} = \sum_1^{s_n} P_{[\psi_\nu^{(n)}]} = E_n.$$

Bei der Messung von \mathfrak{E} wird daher aus U'' nach **1.**

$$\begin{aligned} & \sum_1^{\infty} \sum_1^{s_m} (U'' \psi_{\mu}^{(m)}, \psi_{\mu}^{(m)}) P_{[\psi_{\mu}^{(m)}]} \\ &= \sum_1^{\infty} \sum_1^{s_m} \left[\sum_1^{\infty} \sum_1^{s_n} (U \varphi_{\nu}^{(n)}, \varphi_{\nu}^{(n)}) (P_{[\varphi_{\nu}^{(n)}]} \psi_{\mu}^{(m)}, \psi_{\mu}^{(m)}) \right] P_{[\psi_{\mu}^{(m)}]} \\ &= \sum_1^{\infty} \sum_1^{s_m} \left[\sum_1^{s_m} \frac{(U \varphi_{\nu}^{(m)}, \varphi_{\nu}^{(m)})}{s_m} \right] P_{[\psi_{\mu}^{(m)}]} = \sum_1^{\infty} \sum_1^{s_m} \frac{\text{Spur}(U E_m)}{s_m} P_{[\psi_{\mu}^{(m)}]} \\ &= \sum_1^{\infty} \frac{\text{Spur}(U E_m)}{s_m} E_m = U'. \end{aligned}$$

Somit genügen zwei Prozesse **1.**, um U in U' zu verwandeln — und dies ist alles, was wir zum Beweise benötigten.

Diese Entropie für Zustände ($U = P_{[\varphi]}$, $\text{Spur}(U E_n) = (E_n \varphi, \varphi)$)

$$= \|E_n \varphi\|^2$$

$$- \kappa \sum_1^{\infty} \|E_n \varphi\|^2 \ln \frac{\|E_n \varphi\|^2}{s_n},$$

leidet nicht mehr an den Übelständen der „mikroskopischen“ Entropie: Sie ist im allgemeinen nicht zeitlich (d. h. beim Prozeß **2.**) konstant, und nicht für alle Zustände $U = P_{[\varphi]}$ gleich 0. In der Tat: daß die $\text{Spur}(U E_n)$, aus denen sich unsere Entropie aufbaut, im allgemeinen nicht zeitlich konstant sind, wurde in Anm. 202 diskutiert. Es ist leicht anzugeben, wann der Zustand $U = P_{[\varphi]}$ die Entropie 0 hat: Da $\frac{\|E_n \varphi\|^2}{s_n} \geq 0, \leq 1$ ist, sind alle Addenden $\|E_n \varphi\|^2 \ln \frac{\|E_n \varphi\|^2}{s_n}$ im Entropieausdruck ≤ 0 , sie müßten also alle = 0 sein. D. h. $\frac{\|E_n \varphi\|^2}{s_n} = 0, 1$.

Ersteres bedeutet $E_n \varphi = 0$, letzteres $\|E_n \varphi\| = \sqrt{s_n}$, da aber

$$\|E_n \varphi\| \leq 1, \quad s_n \geq 1$$

ist, $s_n = 1$, $\|E_n \varphi\| = \|\varphi\|$, d. h. $E_n \varphi = \varphi$, oder: $s_n = 1$, φ in \mathfrak{M}_n . Dies letztere kann gewiß nicht für zwei verschiedene n gelten, aber auch nicht für gar keins, denn dann wäre stets $E_n \varphi = 0$, also wegen $\sum_1^{\infty} E_n = 1$ $\varphi = 0$. Also wäre für genau ein n φ in \mathfrak{M}_n , und dabei $s_n = 1$. Da wir feststellten, daß im allgemeinen alle $s_n \gg 1$ sind, ist das unmöglich. D. h. unsere Entropie ist immer > 0 .

Da die makroskopische Entropie zeitlich veränderlich ist, ist die nächste zu lösende Frage diese: verhält sie sich so, wie die Entropie der phänomenologischen Thermodynamik in der wirklichen Welt, nimmt sie vorwiegend zu? Diese Frage wird in der klassisch-mechanischen Theorie durch das sog. Boltzmannsche H-Theorem bejahend

beantwortet, wobei aber gewisse statistische Annahmen, sog. „Unordnungsannahmen“ gemacht werden müssen²⁰⁵. In der Quantenmechanik gelang es dem Verfasser, den entsprechenden Satz ohne derartige Annahmen zu beweisen²⁰⁶. Da das nähere Eingehen auf diesen Gegenstand sowie auf den damit aufs engste verknüpften Ergodensatz (vgl. a. a. O. Anm. ²⁰⁶, wo derselbe auch bewiesen wird) zu weit führen würde, müssen wir auf die Wiedergabe dieser Untersuchungen verzichten. Der in dieser Richtung interessierte Leser sei auf die angeführte Abhandlung verwiesen.

VI. Der Meßprozeß.

1. Formulierung des Problems.

Wir haben durch die bisherigen Erörterungen das Verhältnis der Quantenmechanik zu den verschiedenen kausalen und statistischen Methoden der Naturbeschreibung erörtert, dabei aber eine eigenartige Duplizität ihres Vorgehens gefunden, die nicht genügend erklärt werden konnte. Wir fanden nämlich, daß einerseits ein Zustand φ sich unter dem Einfluß eines Energieoperators H im Zeitintervall $0 \leq \tau \leq t$ folgendermaßen in den Zustand φ' verwandelt:

$$\frac{\partial}{\partial t} \varphi_\tau = -\frac{2\pi i}{h} H \varphi_\tau \quad (0 \leq \tau \leq t),$$

$$\varphi_0 = \varphi, \quad \varphi_t = \varphi',$$

d. h.:

$$\varphi' = e^{-\frac{2\pi i}{h} t H} \varphi,$$

also rein kausal. Ein Gemisch U verwandelt sich entsprechend in

$$U' = e^{-\frac{2\pi i}{h} t H} U e^{\frac{2\pi i}{h} t H},$$

gemäß der kausalen Veränderung von φ in φ' gehen dabei Zustände $U = P_{[\varphi]}$ in Zustände $U' = P_{[\varphi']}$ über (Prozeß 2. in V. 1.). Andererseits erleidet der Zustand φ bei einer Messung — die eine Größe mit lauter einfachen Eigenwerten, und den Eigenfunktionen $\varphi_1, \varphi_2, \dots$, messen mag — eine akasale Veränderung, indem jeder der Zustände $\varphi_1, \varphi_2, \dots$ entstehen kann, und zwar mit den bzw. Wahrscheinlichkeiten $|(\varphi, \varphi_1)|^2, |(\varphi, \varphi_2)|^2, \dots$. D. h. es entsteht das Gemisch $U' = \sum_1^\infty |(\varphi, \varphi_n)|^2 \cdot P_{[\varphi_n]}$. Allgemein geht das Gemisch U in $U' = \sum_1^\infty (U \varphi_n, \varphi_n) \cdot P_{[\varphi_n]}$ über (Prozeß 1. in V. 1.). Da hier Zustände in Gemische übergehen, ist dieser Prozeß nicht kausal.

Der Unterschied dieser zwei Prozesse $U \rightarrow U'$ ist ein ganz fundamentaler: abgesehen vom verschiedenen Verhalten gegenüber dem

Kausalitätsprinzip, unterscheiden sie sich auch dadurch, daß der erstere (thermodynamisch) reversibel ist, der letztere dagegen nicht (vgl. V. 3.).

Vergleichen wir nun diese Verhältnisse mit denjenigen, die in der Natur bzw. bei ihrer Beobachtung wirklich bestehen. Zunächst ist es an und für sich durchaus richtig, daß das Messen, bzw. der damit verknüpfte Vorgang der subjektiven Apperzeption eine gegenüber der physikalischen Umwelt neue, auf diese nicht zurückführbare Wesenheit ist. Denn sie führt aus dieser hinaus, oder richtiger: sie führt hinein, in das unkontrollierbare, weil von jedem Kontrollversuch schon vorausgesetzte, gedankliche Innenleben des Individuums (vgl. das w. u. zu Sagende). Trotzdem ist es aber eine für die naturwissenschaftliche Weltanschauung fundamentale Forderung, das sog. Prinzip vom psychophysikalischen Parallelismus, daß es möglich sein muß, den in Wahrheit außerphysikalischen Vorgang der subjektiven Apperzeption so zu beschreiben, als ob er in der physikalischen Welt stattfände — d. h. ihren Teilen physikalische Vorgänge in der objektiven Umwelt, im gewöhnlichen Raume, zuzuordnen. (Natürlich ergibt sich bei diesem Zuordnungsprozeß immer wieder die Notwendigkeit, diese Prozesse in solche Punkte zu lokalisieren, die im von unserem Körper eingenommenen Raumteile liegen. Dies ändert aber nichts an ihrer Zugehörigkeit zur Umwelt.) Auf ein einfaches Beispiel wäre diese Auffassung etwa so anzuwenden: Es werde eine Temperatur gemessen. Wenn wir wollen, können wir diesen Vorgang rechnerisch so weit verfolgen, bis wir die Temperatur der Umgebung des Quecksilberbehälters des Thermometers haben, und dann sagen: diese Temperatur wird vom Thermometer gemessen. Wir können aber die Rechnung weiterführen, und aus den molekularkinetisch erklärbaren Eigenschaften des Quecksilbers seine Erwärmung, Ausdehnung und die resultierende Länge des Quecksilberfadens errechnen, und dann sagen: diese Länge wird vom Beobachter gesehen. Noch weitergehend könnten wir, seine Lichtquelle mit in Betracht ziehend, die Reflexion der Lichtquanten am undurchsichtigen Quecksilberfaden, und den Weg der übrigen Lichtquanten in sein Auge ermitteln, sodann deren Brechung in der Linse und das Entstehen eines Bildes auf der Retina, und erst dann würden wir sagen: dieses Bild wird von der Retina des Beobachters registriert. Und wären unsere physiologischen Kenntnisse genauer als sie es heute sind, so könnten wir noch weiter gehen, die chemischen Reaktionen verfolgend, die dieses Bild an der Retina, in der Nervenbahn und im Gehirn verursacht, und erst am Ende sagen: diese chemischen Veränderungen seiner Gehirnzellen apperzipiert der Beobachter. Aber einerlei, wie weit wir rechnen: bis ans Quecksilbergefäß, bis an die Skala des Thermometers, bis an die Retina, oder bis ins Gehirn, einmal müssen wir sagen: und dies wird vom Beobachter wahrgenommen. D. h. wir müssen die Welt immer in zwei Teile teilen, der eine ist das beobachtete System, der

andere der Beobachter. In der ersteren können wir alle physikalischen Prozesse (prinzipiell wenigstens) beliebig genau verfolgen, in der letzteren ist dies sinnlos. Die Grenze zwischen beiden ist weitgehend willkürlich, so sahen wir im obigen Beispiel 4 verschiedene Möglichkeiten für sie, insbesondere braucht der Beobachter in diesem Sinne keineswegs mit dem Körper des wirklichen Beobachters identifiziert zu werden — rechneten wir doch im obigen Beispiel einmal sogar das Thermometer dazu, während das andere Mal seine Augen und Nervenbahnen nicht dazugerechnet wurden. Daß diese Grenze beliebig tief ins Innere des Körpers des wirklichen Beobachters verschoben werden kann, ist der Inhalt des Prinzips vom psychophysikalischen Parallelismus — dies ändert aber nichts daran, daß sie bei jeder Beschreibungsweise irgendwo gezogen werden muß, wenn dieselbe nicht leer laufen, d. h. wenn ein Vergleich mit der Erfahrung möglich sein soll. Denn die Erfahrung macht nur Aussagen von diesem Typus: ein Beobachter hat eine bestimmte (subjektive) Wahrnehmung gemacht, und nie eine solche: eine physikalische Größe hat einen bestimmten Wert.

Die Quantenmechanik beschreibt nun die Ereignisse, die im beobachteten Teile der Welt stattfinden, solange sie mit dem beobachtenden Teile nicht in Wechselwirkung stehen, mit Hilfe des Prozesses 2. (V. 1.); sobald aber eine derartige Wechselwirkung stattfindet, d. h. eine Messung, schreibt sie das Verwenden des Prozesses 1. vor. Die Duplizität ist also gerechtfertigt²⁰⁷. Indessen besteht die Gefahr, daß das Prinzip vom psychophysikalischen Parallelismus verletzt ist, solange nicht gezeigt wird, daß die Grenze zwischen dem beobachteten System und dem Beobachter im w. o. angegebenen Sinne beliebig verschiebbar ist.

Um dies zu diskutieren, teilen wir die Welt in drei Teile *I*, *II*, *III* ein, *I* sei das eigentlich beobachtete System, *II* das Meßinstrument, *III* der eigentliche Beobachter²⁰⁸. Es ist zu zeigen, daß die Grenze sowohl zwischen *I* und *II* + *III* als auch zwischen *I* + *II* und *III* gezogen werden kann. (In unserem obigen Beispiel war beim Vergleich des ersten und des zweiten Falles *I* das zu untersuchende System, *II* das Thermometer, *III* das Licht + der Beobachter; beim Vergleich des zweiten und dritten *I* das zu untersuchende System + Thermometer, *II* das Licht + das Auge des Beobachters, *III* der Beobachter, von der Retina an; beim Vergleich des dritten und vierten *I* alles bis zur Retina des Beobachters, *II* seine Retina, Nervenbahnen und Gehirn, *III* sein abstraktes „Ich“.) D. h. das eine Mal ist 2. auf *I* anzuwenden, 1. auf die Wechselwirkungen zwischen *I* und *II* + *III*, das andere Mal 2. auf *I* + *II*, 1. auf die Wechselwirkungen zwischen *I* + *II* und *III*. (*III* selbst bleibt beide Male außerhalb der Rechnung.) Der Nachweis dessen, daß beide Verfahren dieselben Aussagen für *I* ergeben (dieses, und nur dieses, gehört beidemale zum beobachteten Teile der Welt), ist unsere eigentliche Aufgabe.

Um aber dieselbe erfolgreich in Angriff nehmen zu können, müssen wir zuerst den Prozeß der Vereinigung zweier physikalischer Systeme (der von I und II zu $I + II$ führt) näher untersuchen.

2. Zusammengesetzte Systeme.

Wie am Ende des vorigen Paragraphen angekündigt wurde, betrachten wir zwei physikalische Systeme I, II (die aber nicht die Bedeutung des dortigen I, II zu haben brauchen), und ihre Vereinigung $I + II$. In der klassisch-mechanischen Beschreibungsweise habe I k Freiheitsgrade, also die Koordinaten q_1, \dots, q_k , an deren Stelle wir aber zur Abkürzung stets das eine Symbol q setzen werden; entsprechend habe II l Freiheitsgrade, die Koordinaten r_1, \dots, r_l , die zu r abgekürzt werden sollen. Daher hat $I + II$ $k + l$ Freiheitsgrade, die Koordinaten $q_1, \dots, q_k, r_1, \dots, r_l$, abgekürzt: q, r . In der Quantenmechanik haben also die Wellenfunktionen von I die Form $\varphi(q)$, die von II die Form $\xi(r)$, und die von $I + II$ die Form $\Phi(q, r)$. In den entsprechenden Hilbertschen Räumen $\mathfrak{R}^I, \mathfrak{R}^{II}, \mathfrak{R}^{I+II}$ ist das innere Produkt sinngemäß durch $\int \varphi(q) \overline{\psi(q)} dq$ bzw. $\int \xi(r) \overline{\eta(r)} dr$ bzw. $\iint \Phi(q, r) \overline{\Psi(q, r)} dq dr$ definiert. Die physikalischen Größen von $I, II, I + II$ sind entsprechend die (hypermaximalen) Hermiteschen Operatoren A bzw. A bzw. \mathbf{A} in \mathfrak{R}^I bzw. \mathfrak{R}^{II} bzw. \mathfrak{R}^{I+II} .

Jede physikalische Größe in I ist natürlich auch eine solche in $I + II$, und zwar ist aus ihrem A ihr \mathbf{A} so zu ermitteln: um $\mathbf{A} \Phi(q, r)$ zu ermitteln, sehe man r als eine Konstante an, und wende A auf die q -Funktion $\Phi(q, r)$ an²⁰⁹. Diese Zuordnungsregel ist jedenfalls für die Koordinaten- und Impulsoperatoren (Q_1, \dots, Q_k und P_1, \dots, P_k , d. i. $q_1, \dots, q_k, \frac{\hbar}{2\pi i} \frac{\partial}{\partial q_1}, \dots, \frac{\hbar}{2\pi i} \frac{\partial}{\partial q_k}$, vgl. I. 2.) richtig, und steht mit den Zuordnungsprinzipien **I.**, **II.** in IV. 2. in Einklang²¹⁰, wir postulieren sie darum allgemein. (Sie ist in der Quantenmechanik allgemein gebräuchlich.)

Ebenso ist jede physikalische Größe in II auch eine solche in $I + II$, und ihr A ergibt ihr \mathbf{A} nach derselben Regel: $\mathbf{A} \Phi(q, r)$ ist gleich $A \Phi(q, r)$, wenn bei der letzteren Bildung q als Konstante und $\Phi(q, r)$ als r -Funktion angesehen wird.

Wenn $\varphi_m(q)$ ($m = 1, 2, \dots$) ein vollständiges normiertes Orthogonalsystem in \mathfrak{R}^I ist, und $\xi_n(r)$ ($n = 1, 2, \dots$) eins in \mathfrak{R}^{II} , so ist $\Phi_{m/n}(q, r) = \varphi_m(q) \xi_n(r)$ ($m, n = 1, 2, \dots$) offenbar eins in \mathfrak{R}^{I+II} . Die Operatoren A, A, \mathbf{A} können also durch Matrizen $\{a_{m/m'}\}$ bzw. $\{a_{n/n'}\}$ bzw. $\{\alpha_{m m' / m' n'}\}$ ($m, m', n, n' = 1, 2, \dots$) dargestellt werden²¹¹, wovon wir noch mehrfach Gebrauch machen werden. Die Matrizen-darstellung bedeutet

$$A \varphi_m(q) = \sum_1^{\infty} a_{m/m'} \varphi_{m'}(q), \quad A \xi_n(r) = \sum_1^{\infty} a_{n/n'} \xi_{n'}(r),$$

und

$$\mathbf{A} \Phi_{mn}(q, r) = \sum_1^{\infty} m' n' \alpha_{mn/m'n'} \Phi_{m'n'}(q, r),$$

d. h.

$$\mathbf{A} \varphi_m(q) \xi_n(r) = \sum_1^{\infty} m' n' \alpha_{mn/m'n'} \varphi_{m'}(q) \xi_{n'}(r).$$

Insbesondere besagt die Zuordnung $A \rightarrow \mathbf{A}$

$$\mathbf{A} \varphi_m(q) \xi_n(r) = (A \varphi_m(q)) \xi_n(r) = \sum_1^{\infty} m' a_{m/m'} \varphi_{m'}(q) \xi_n(r),$$

d. h.

$$\alpha_{mn/m'n'} = a_{m/m'} \delta_{n/n'} \left(\delta_{n/n'} \begin{cases} = 1, & \text{für } n = n' \\ = 0, & \text{für } n \neq n' \end{cases} \right),$$

analog besagt die Zuordnung $A \rightarrow \mathbf{A}$ $\alpha_{mn/m'n'} = a_{n/n'} \delta_{m/m'}$.

Eine statistische Gesamtheit in $I + II$ ist durch ihren statistischen Operator \mathbf{U} , bzw. dessen Matrix $\{v_{mn/m'n'}\}$ gekennzeichnet. Derselbe bestimmt die statistischen Eigenschaften aller Größen in $I + II$, also insbesondere auch diejenigen der Größen in I . Somit entspricht ihr auch eine statistische Gesamtheit in I allein: in der Tat würde ein Beobachter, der nur I wahrzunehmen vermag, und II nicht, die Gesamtheit von Systemen $I + II$ als eine solche von Systemen I auffassen. Was ist nun der statistische Operator \mathbf{U} , bzw. seine Matrix $\{u_{m/m'}\}$, der zu dieser I -Gesamtheit gehört? Wir bestimmen ihn so: die I -Größe mit der Matrix $\{a_{m/m'}\}$ hat als $I + II$ -Größe die Matrix $\{a_{m/m} \delta_{n/n'}\}$, also hat sie auf Grund einer Rechnung in I den Erwartungswert $\sum_1^{\infty} m m' u_{m/m'} a_{m'/m}$, während die Rechnung in $I + II$

$$\begin{aligned} \sum_1^{\infty} m n m' n' v_{mn/m'n'} a_{m'/m} \delta_{n'/n} &= \sum_1^{\infty} m m' n v_{mn/m'n} a_{m'/m} \\ &= \sum_1^{\infty} m m' \left(\sum_1^{\infty} n v_{mn/m'n} \right) a_{m'/m} \end{aligned}$$

ergibt. Damit die beiden Ausdrücke gleich seien, muß

$$u_{m/m'} = \sum_1^{\infty} n v_{mn/m'n}$$

sein.

Ganz entsprechend bestimmt unsere $I + II$ -Gesamtheit, falls nur II berücksichtigt und I ignoriert wird, eine II -Gesamtheit, mit einem statistischen Operator \mathbf{U} und dessen Matrix $\{u_{n/n'}\}$. Analog ergibt sich

$$u_{n/n'} = \sum_1^{\infty} m v_{mn/m'n}$$

Für die statistischen Operatoren von I , II , $I + II$, d. i. \mathbf{U} , \mathbf{U} , \mathbf{U} haben wir also auch Zuordnungsregeln ermittelt, jedoch sind diese von denjenigen Zuordnungsregeln, die für die Operatoren \mathbf{A} , \mathbf{A} , \mathbf{A} physikalischer Größen gelten, wesentlich verschieden.

Es ist noch zu erwähnen, daß unsere U, U, U -Zuordnung nur scheinbar von der Wahl der vollständigen normierten Orthogonalsysteme $\varphi_m(q)$ und $\xi_n(q)$ abhängt. Denn sie wurde aus einer invarianten Bedingung hergeleitet (welche nur durch diese Zuordnung befriedigt wird): d. i. die Übereinstimmung der Erwartungswerte von A und A , bzw. von A und A .

U drückt die Statistik in $I + II$ aus, U bzw. U die auf I bzw. II beschränkte Statistik. Es entsteht die Frage: bestimmen U, U, U eindeutig oder nicht? Im allgemeinen wird man eine verneinende Antwort erwarten, den bei alleiniger Kenntnis von U und U , d. h. der getrennten Systeme I und II , gehen alle „Wahrscheinlichkeitsabhängigkeiten“, die zwischen denn beiden Systemen noch bestehen können, verloren. Wenn man aber sowohl den Zustand von I als auch denjenigen von II genau kennt, kommen „Wahrscheinlichkeitsabhängigkeiten“ nicht in Frage, und man kennt auch $I + II$ genau. Diesen qualitativen Erwägungen ist aber die genaue mathematische Diskussion vorzuziehen, die wir darum in Angriff nehmen.

Die Aufgabe ist: zu zwei gegebenen definiten Matrizen $\{u_{m/m'}\}$ und $\{u_{n/n'}\}$ eine dritte definite Matrix $\{v_{m n/m' n'}\}$ zu finden, derart, daß

$$\sum_1^{\infty} v_{m n/m' n'} = u_{m/m'}, \quad \sum_1^{\infty} v_{m n/m' n'} = u_{n/n'}$$

ist. (Aus $\sum_1^{\infty} u_{m/m} = 1$, $\sum_1^{\infty} u_{n/n} = 1$ folgt dann von selbst $\sum_1^{\infty} \sum_1^{\infty} v_{m n/m' n'} = 1$, d. h. die richtige Normierung bleibt erhalten.) Lösbar ist das Problem immer, so ist z. B. $v_{m n/m' n'} = u_{m/m'} u_{n/n'}$ immer eine Lösung (man erkennt leicht, daß diese Matrix definit ist), gefragt wird aber, wann es die einzige ist.

Wir zeigen: dies ist dann und nur dann der Fall, wenn mindestens eine der beiden Matrizen $\{u_{m/m'}\}$, $\{u_{n/n'}\}$ ein Zustand ist. Zuerst beweisen wir die Notwendigkeit dieser Bedingung, d. h. die Existenz mehrerer Lösungen, falls beide Matrizen Gemischen entsprechen. Dann ist nämlich (vgl. IV. 2.)

$$u_{m/m'} = \alpha v_{m/m'} + \beta w_{m/m'}, \quad u_{n/n'} = \gamma v_{n/n'} + \delta w_{n/n'}.$$

($v_{m/m'}$, $w_{m/m'}$ definit, und nicht nur durch einen konstanten Faktor unterschieden, $v_{n/n'}$, $w_{n/n'}$ ebenso,

$$\sum_1^{\infty} v_{m/m} = \sum_1^{\infty} w_{m/m} = \sum_1^{\infty} v_{n/n} = \sum_1^{\infty} w_{n/n} = 1$$

$\alpha, \beta, \gamma, \delta > 0$, $\alpha + \beta = 1$, $\gamma + \delta = 1$), und man verifiziert leicht, daß jedes

$$v_{m n/m' n'} = \pi v_{m/m'} v_{n/n'} + \varrho w_{m/m'} v_{n/n'} + \sigma v_{m/m'} w_{n/n'} + \tau w_{m/m'} w_{n/n'}$$

mit

$$\begin{aligned} \pi + \sigma = \alpha, \quad \varrho + \tau = \beta, \quad \pi + \varrho = \gamma, \quad \sigma + \tau = \delta, \\ \pi, \varrho, \sigma, \tau > 0, \end{aligned}$$

Lösung ist. Dabei sind $\pi, \varrho, \sigma, \tau$ auf unendlich viele Weisen wählbar (wegen $\alpha + \beta = \gamma + \delta$ sind nur 3 Gleichungen von den 4 unabhängig, also etwa: $\varrho = \gamma - \pi, \sigma = \alpha - \pi, \tau = (\delta - \alpha) + \pi$, damit alles > 0 sei, muß $\alpha - \delta = \gamma - \beta < \pi < \alpha, \gamma$ sein, was für unendlich viele π der Fall ist), und verschiedene $\pi, \varrho, \sigma, \tau$ führen zu verschiedenen $v_{m n / m' n'}$, denn die $v_{m/m'} v_{n/n'}, \dots, w_{m/m'} w_{n/n'}$ sind linear unabhängig, weil es die $v_{m/m'}, w_{m/m'}$ sowie die $v_{n/n'}, w_{n/n'}$ sind.

Nunmehr zeigen wir die Hinreichendheit, und zwar können wir annehmen, das $u_{m/m'}$ einem Zustande entspricht (der andere Fall erledigt sich ebenso). Also ist $U = P_{\{\varphi\}}$, und da das vollständige normierte Orthogonalsystem $\varphi_1, \varphi_2, \dots$ beliebig war, können wir $\varphi_1 = \varphi$ annehmen. $U = P_{\{\varphi_1\}}$ hat offenbar die Matrix

$$u_{m/m'} \begin{cases} = 1, & \text{für } m = m' = 1 \\ = 0, & \text{sonst} \end{cases}.$$

Also ist

$$\sum_1^{\infty} v_{m n / m' n'} \begin{cases} = 1, & \text{für } m = m' = 1 \\ = 0, & \text{sonst} \end{cases}.$$

Insbesondere ist für $m \neq 1$ $\sum_1^{\infty} v_{m n / m n} = 0$, da aber wegen der Definität von $v_{m n / m n}$ alle $v_{m n / m n} \geq 0$ sind [es ist $v_{m n / m n} = (U\Phi_{m n}, \Phi_{m n})$] ist in diesem Falle $v_{m n / m n} = 0$. D. h. $(U\Phi_{m n}, \Phi_{m n}) = 0$, also wegen der Definität von U auch $(U\Phi_{m n}, \Phi_{m' n'}) = 0$ (vgl. II. 5., Satz 19.), wobei m', n' beliebig ist. D. h.: aus $m \neq 1$ folgt $v_{m n / m' n'} = 0$, und wegen des Hermiteschen Charakters folgt dies dann auch aus $m' \neq 1$. Für $m = m' = 1$ aber ergibt sich

$$v_{1 n / 1 n'} = \sum_1^{\infty} v_{m n / m n'} = u_{n/n'}.$$

Somit ist, wie behauptet wurde, die Lösung $v_{m n / m' n}$ eindeutig bestimmt.

Zusammenfassend können wir unser Resultat auch so formulieren: Eine statistische Gesamtheit in $I + II$, mit dem Operator $U = \{v_{m n / m' n'}\}$, ist durch die von ihr in I allein bzw. in II allen bestimmten statistischen Gesamtheiten, mit den Operatoren $U = \{u_{m/m'}\}$ bzw. $U = \{u_{n/n'}\}$, dann und nur dann eindeutig bestimmt, wenn sie die folgenden Bedingungen erfüllt:

1. Es ist $v_{m n / m' n'} = v_{m/m'} v_{n/n'}$. (Aus $\text{Spur } U = \sum_1^{\infty} \sum_{m n} v_{m n / m n} = \sum_1^{\infty} v_{m/m'} \sum_1^{\infty} v_{n/n'} = 1$ folgt, daß wir, durch Multiplizieren von $v_{m/m'}$ und

$v_{n/n'}$, mit zwei reziproken konstanten Faktoren, $\sum_1^{\infty} v_{m/m'} = 1$, $\sum_1^{\infty} v_{n/n'} = 1$ erreichen können. Dann sieht man aber, daß $u_{m/m'} = v_{m/m'}$, $u_{n/n'} = v_{n/n'}$ ist.)

2. Es ist entweder $v_{m/m'} = \bar{x}_m x_{m'}$ oder $v_{n/n'} = \bar{x}_n x_{n'}$. (Denn $U = P_{[\varphi]}$ bedeutet: $\varphi = \sum_1^{\infty} y_m \varphi_m$, also $u_{m/m'} = \bar{y}_m y_{m'}$, und entsprechend für $v_{m/m'}$; analog steht es mit $U = P_{[\xi]}$.)

Übrigens wollen wir U und U die Projektionen von U in I bzw. II nennen²¹².

Wir wenden uns nun den Zuständen von $I + II$, $U = P_{\Phi}$, zu. Die dazugehörigen Wellenfunktionen $\Phi(q, r)$ können nach dem vollständigen normierten Orthogonalsystem $\Phi_{m,n}(q, r) = \varphi_m(q) \xi_n(r)$ entwickelt werden:

$$\Phi(q, r) = \sum_1^{\infty} f_{m,n} \varphi_m(q) \xi_n(r).$$

Wir können sie also auch durch die Koeffizienten $f_{m,n}$ ($m, n = 1, 2, \dots$) ersetzen, die nur dieser Beschränkung unterworfen sind: $\sum_1^{\infty} |f_{m,n}|^2 = \|\Phi\|^2$ ist endlich.

Wir können zwei Operatoren F, F^* durch

$$\begin{aligned} F\varphi(q) &= \int \overline{\Phi(qr)} \varphi(q) dq \\ F^*\xi(r) &= \int \Phi(qr) \xi(r) dr \end{aligned}$$

definieren, sie sind linear, haben aber die Eigentümlichkeit, in \mathfrak{R}^I bzw. \mathfrak{R}^{II} definiert zu sein, aber Werte aus \mathfrak{R}^{II} bzw. \mathfrak{R}^I anzunehmen. Ihr Verhältnis ist dasjenige von Adjungierten, da offenbar $(F\varphi, \xi) = (\varphi, F^*\xi)$ ist (das innere Produkt links ist in \mathfrak{R}^{II} , das rechts in \mathfrak{R}^I zu bilden!). Da der Unterschied von \mathfrak{R}^I und \mathfrak{R}^{II} mathematisch unerheblich ist, können wir die Resultate von II. 11. anwenden: so sind $\sum(F)$ und $\sum(F^*)$, da es sich um Integraloperatoren handelt, gleich

$$\iint |\Phi(qr)|^2 dq dr = \|\Phi\|^2 = 1 (\|\Phi\| \text{ in } \mathfrak{R}^{I+II}!),$$

also endlich. Somit sind F, F^* stetige, ja sogar vollstetige Operatoren, und F^*F sowie FF^* sind definite Operatoren, $\text{Spur}(F^*F) = \sum(F) = 1$, $\text{Spur}(FF^*) = \sum(F^*) = 1$. Beachten wir wieder den Unterschied zwischen $\mathfrak{R}^I, \mathfrak{R}^{II}$, so sehen wir: F^*F ist in \mathfrak{R}^I definiert, FF^* in \mathfrak{R}^{II} .

Da $F\varphi_m(q)$ gleich $\sum_1^{\infty} \bar{f}_{m,n} \xi_n(r)$ ausfällt, hat F die Matrix $\{\bar{f}_{m,n}\}$ [unter Verwendung der vollständigen normierten Orthogonalsysteme $\varphi_m(q)$ bzw. $\xi_n(r)$], ebenso hat F^* die Matrix $\{f_{m,n}\}$. Also haben F^*F, FF^* die Matrizen

$$\left\{ \sum_1^{\infty} \bar{f}_{m,n} f_{m',n} \right\} \text{ bzw. } \left\{ \sum_1^{\infty} \bar{f}_{m,n} f_{m,n'} \right\}.$$

Andererseits hat $U = P_{[\Phi]}$ im System $\bar{\Phi}_{mn}(q, r) = \varphi_m(q)\xi_n(r)$ die Matrix $\{\bar{f}_{mn}f_{m'n'}\}$, so daß seine Projektionen in I und II , \cup und U , die Matrizen $\{\sum_1^{\infty} \bar{f}_{mn}f_{m'n'}\}$ bzw. $\{\sum_1^{\infty} \bar{f}_{m'n}f_{mn'}\}$ haben²¹³. Somit ist

$$\cup = F^*F, \quad U = FF^*,$$

und diese Aussage ist von der Wahl der φ_m, ξ_n unabhängig (weil \cup, U, F es sind).

Die Operatoren \cup, U sind vollstetig, und können nach II. 11. und IV. 3. so geschrieben werden:

$$\cup = \sum_1^{\infty} w'_k P_{[\psi_k]}, \quad U = \sum_1^{\infty} w''_k P_{[\eta_k]},$$

wobei die ψ_k ein vollständiges normiertes Orthogonalsystem in \mathfrak{R}^I bilden, die η_k eines in \mathfrak{R}^{II} , alle $w'_k, w''_k \geq 0$ sind. Nun lassen wir in jeder der beiden Formeln die Glieder mit $w'_k = 0$ bzw. $w''_k = 0$ fort und numerieren die übrigbleibenden wieder fortlaufend mit $k = 1, 2, \dots$. Dann bilden die ψ_k bzw. η_k nur noch normierte orthogonale, aber nicht notwendig vollständige Systeme; an Stelle der \sum_1^{∞} treten Summen $\sum_1^{M'}, \sum_1^{M''}$, wo M', M'' sowohl gleich ∞ als auch endlich sein können; aber alle w'_k, w''_k sind jetzt > 0 .

Betrachten wir ein ψ_k . Es ist $\cup \psi_k = w'_k \psi_k$, also $F^*F \psi_k = w'_k \psi_k$, $FF^*F \psi_k = w'_k F \psi_k$, $UF \psi_k = w'_k F \psi_k$. Ferner ist

$$\begin{aligned} (F \psi_k, F \psi_l) &= (F^*F \psi_k, \psi_l) = (\cup \psi_k, \psi_l) \\ &= w'_k (\psi_k, \psi_l) \begin{cases} = w'_k, & \text{für } k = l \\ = 0, & \text{für } k \neq l \end{cases}, \end{aligned}$$

also insbesondere $\|F \psi_k\|^2 = w'_k$. Die $\frac{1}{\sqrt{w'_k}} F \psi_k$ bilden also ein normiertes Orthogonalsystem in \mathfrak{R}^{II} , und zwar sind es Eigenfunktionen von U , mit denselben Eigenwerten, wie die ψ_k für \cup (d. i. w'_k). D. h.: jeder Eigenwert von \cup ist auch einer von U , mit mindestens derselben Vielfachheit; Vertauschen von \cup, U ergibt: sie haben dieselben Eigenwerte mit denselben Vielfachheiten. Die w'_k und w''_k stimmen also bis auf die Reihenfolge überein. Also ist $M' = M'' = M$, und durch Umnahmen der w''_k können wir $w'_k = w''_k = w_k$ erreichen. Und ist dies geschehen, so können wir offenbar allgemein $\eta_k = \frac{1}{\sqrt{w_k}} F \psi_k$ wählen.

Dann wird $\frac{1}{\sqrt{w_k}} F^* \eta_k = \frac{1}{w_k} F^* F \psi_k = \frac{1}{w_k} \cup \psi_k = \psi_k$. Also:

$$\eta_k = \frac{1}{\sqrt{w_k}} F \psi_k, \quad \psi_k = \frac{1}{\sqrt{w_k}} F^* \eta_k. \quad 212$$

Erweitern wir nun das normierte Orthogonalsystem ψ_1, ψ_2, \dots zu einem vollständigen $\psi_1, \psi_2, \dots, \psi'_1, \psi'_2, \dots$, und ebenso η_1, η_2, \dots zu $\eta_1, \eta_2, \dots, \eta'_1, \eta'_2, \dots$ (jedes der beiden Systeme ψ'_1, ψ'_2, \dots und η'_1, η'_2, \dots kann leer, endlich oder unendlich sein, und zwar unabhängig vom anderen). Die bisherigen Betrachtungen waren von der Wahl der vollständigen normierten Orthogonalsysteme $\varphi_1, \varphi_2, \dots$ und ξ_1, ξ_2, \dots unabhängig, wir können sie also mit $\psi_1, \psi_2, \dots, \psi'_1, \psi'_2, \dots$ bzw. $\eta_1, \eta_2, \dots, \eta'_1, \eta'_2, \dots$ zusammenfallen lassen. Und zwar entspreche ψ_k dem φ_{μ_k} , η_k dem ξ_{ν_k} (μ_1, μ_2, \dots voneinander verschieden, ν_1, ν_2, \dots ebenfalls). Dann ist:

$$F \varphi_{\mu_k} = \sqrt{w_k} \xi_{\nu_k}, \quad F \varphi_m = 0 \quad \text{für } m \neq \mu_1, \mu_2, \dots$$

Also ist

$$f_{mn} \left\{ \begin{array}{l} = \sqrt{w_k}, \quad \text{für } m = \mu_k, n = \nu_k, k = 1, 2, \dots, \\ = 0, \quad \text{sonst} \end{array} \right.$$

oder, was dasselbe bedeutet,

$$\Phi(q, r) = \sum_1^M \sqrt{w_k} \varphi_{\mu_k}(q) \xi_{\nu_k}(r).$$

Wir haben also durch geeignete Wahl der Systeme $\varphi_m(q)$ und $\xi_n(r)$ erreicht, daß jede Zeile und jede Spalte der Matrix $\{f_{mn}\}$ höchstens ein Element $\neq 0$ enthält (daß dieses sogar reell und > 0 ist, nämlich $\sqrt{w_k}$, ist für das Folgende unwichtig). Was ist der physikalische Sinn dieser formalen Aussage?

Sei A ein Operator mit den Eigenfunktionen $\varphi_1, \varphi_2, \dots$ und lauter verschiedenen Eigenwerten, etwa a_1, a_2, \dots ; ebenso B mit ξ_1, ξ_2, \dots und b_1, b_2, \dots . A entspricht einer physikalischen Größe in I , B einer in II , die also gleichzeitig meßbar sind. Man erkennt leicht, daß die Aussagen „ A hat den Wert a_m und B hat den b_n “ zusammen den Zustand $\Phi_{mn}(q, r) = \varphi_m(q) \xi_n(r)$ bestimmen, und dies im Zustande $\Phi(q, r)$ die Wahrscheinlichkeit $(P_{[\Phi_{mn}]} \Phi, \Phi) = |(\Phi, \Phi_{mn})|^2 = |f_{mn}|^2$ hat. Somit bedeutet unsere Aussage: A, B sind gleichzeitig meßbar, und wenn eines von ihnen an Φ gemessen wurde, so ist dadurch der Wert des anderen eindeutig bestimmt. (Ein a_m mit lauter $f_{mn} = 0$ kann ja nicht herauskommen, denn seine Gesamtwahrscheinlichkeit $\sum_1^\infty |f_{mn}|^2$ kann nicht 0 sein, wenn a_m überhaupt gefunden wird — also ist für genau ein n $f_{mn} \neq 0$. Ebenso für b_n .) D. h. es sind wohl mehrere A -Werte im Zustande Φ möglich (jedes a_m , für welches $\sum_1^\infty |f_{mn}|^2 > 0$ ist, d. h. ein n mit $f_{mn} \neq 0$ existiert — meistens sind es alle a_m), und ebenso viele B -Werte (jedes b_n , für welches $\sum_1^\infty |f_{mn}|^2 > 0$ ist, d. h. ein m mit $f_{mn} \neq 0$ existiert), aber zwischen den möglichen A - und B -Werten stiftet Φ eine ein-eindeutige Zuordnung.

Nennen wir die möglichen m μ_1, μ_2, \dots , die entsprechenden möglichen n ν_1, ν_2, \dots , so ist

$$f_{mn} \begin{cases} = c_k \neq 0, & \text{für } m = \mu_k, n = \nu_k, k = 1, 2, \dots \\ = 0, & \text{sonst} \end{cases},$$

also (M endlich oder ∞)

$$\Phi(q, r) = \sum_1^M c_k \varphi_{\mu_k}(q) \xi_{\nu_k}(r),$$

so wird

$$u_{mm'} = \sum_1^{\infty} \bar{f}_{mn} f_{m'n} \begin{cases} = |c_k|^2, & \text{für } m = m' = \mu_k, k = 1, 2, \dots \\ = 0, & \text{sonst} \end{cases},$$

$$u_{nn'} = \sum_1^{\infty} \bar{f}_{mn} f_{mn'} \begin{cases} = |c_k|^2, & \text{für } n = n' = \nu_k, k = 1, 2, \dots \\ = 0, & \text{sonst} \end{cases},$$

also

$$U = \sum_1^M |c_k|^2 P_{[\varphi_{\mu_k}]}, \quad U = \sum_1^M |c_k|^2 P_{[\xi_{\nu_k}]}.$$

In I oder II projiziert, wird also Φ im allgemeinen zum Gemisch, bloß in $I + II$ ist es ein Zustand, weil es eine Aussage über $I + II$ involviert, die sich in I allein oder II allein nicht verwerten läßt: nämlich die ein-eindeutige Zuordnung der A - und B -Werte zueinander.

Für jedes Φ können wir also A, B , d. h. die φ_m und ξ_n so wählen, daß diese unsere Bedingung erfüllt ist, bei beliebigem A, B wird sie natürlich verletzt sein. Jeder Zustand Φ stiftet also eine besondere Verknüpfung zwischen I und II , indem die verknüpften Größen A, B von Φ abhängen. Wie weit Φ sie, d. h. die φ_m und ξ_n festlegt, ist unschwer zu entscheiden. Sind alle $|c_k|$ verschieden und $\neq 0$, so bestimmen U, U (die durch Φ festgelegt sind) die φ_m bzw. ξ_n eindeutig (vgl. IV. 3.), die allgemeine Diskussion bleibe dem Leser überlassen.

Schließlich erwähnen wir: wegen $|c_k|^2 > 0$ ist für $M \neq 1$ weder U noch U ein Zustand. Für $M = 1$ sind es beide: $U = P_{[\varphi_{\mu_1}]}$, $U = P_{[\xi_{\nu_1}]}$, dann ist $\Phi(q, r) = c_1 \varphi_{\mu_1}(q) \xi_{\nu_1}(r)$. c_1 können wir in $\varphi_{\mu_1}(q)$ aufnehmen. Also: U, U sind dann und nur dann Zustände, wenn $\Phi(q, r)$ die Form $\varphi(q) \xi(r)$ hat, dann sind sie gleich $P_{[\varphi]}$ bzw. $P_{[\xi]}$.

Auf Grund der obigen Resultate heben wir noch hervor: Ist I im Zustande $\varphi(q)$ und II im Zustande $\xi(r)$, so ist $I + II$ im Zustande $\Phi(q, r) = \varphi(q) \xi(r)$. Ist dagegen $I + II$ in einem Zustande $\Phi(q, r)$, der kein Produkt $\varphi(q) \xi(r)$ ist, so sind I und II Gemische, aber Φ stiftet eine ein-eindeutige Zuordnung zwischen den möglichen Werten gewisser Größen in I und in II .

3. Diskussion des Meßprozesses.

Ehe wir den Meßprozeß im Sinne der in VI. 1. entwickelten Ideen mit Hilfe der in VI. 2. gewonnenen formalen Hilfsmittel zu Ende diskutieren, wollen wir noch die Resultate von VI. 2. verwenden, um eine mehrfach in Vorschlag gebrachte Erklärungsmöglichkeit für den statistischen Charakter des Prozesses **1.** (V. 1.) auszuschließen. Dieselbe beruht auf diesem Gedanken: Sei I das beobachtete System, II der Beobachter. Wenn I vor der Messung in einem Zustand $U = P_{[\varphi]}$ ist,

II dagegen in einem Gemisch $U = \sum_1^{\infty} w_n P_{[\xi_n]}$, so ist $I + II$ ein eindeutig festgelegtes Gemisch U , und zwar ist, wie man nach VI. 2. leicht berechnet, $U = \sum_1^{\infty} w_n P_{[\phi_n]}$, $\Phi_n(q, r) = \varphi(q) \xi_n(r)$. Findet nun

eine Messung einer Größe A in I statt, so ist dies als eine Wechselwirkung von I und II zu verstehen, dies ist ein Prozeß **2.** (V. 1.), mit einem Energieoperator H . Wenn sie die Zeitdauer t hat, so wird aus U

$U' = e^{-\frac{2\pi i}{h} t H} U e^{\frac{2\pi i}{h} t H}$, und zwar ist offenbar $U' = \sum_1^{\infty} w_n P_{[e^{-\frac{2\pi i}{h} t H} \phi_n]}$.

Wäre nun jedes $\Phi_n(q, r)$ von der Form $\psi_n(q) \eta_n(r)$, wo die ψ_n die Eigenfunktionen von A sind, und die η_n irgendein festes vollständiges normiertes Orthogonalsystem, so hätte dieser Eingriff den Charakter einer Messung: denn er führt jeden Zustand φ von I in ein Gemisch der Eigenfunktionen ψ_n von A über. Der statistische Charakter kommt daher, daß sich wohl I vor der Messung in einem einheitlichen Zustande befand, aber II war ein Gemisch — und der Gemischcharakter von II hat $I + II$ im Laufe der Wechselwirkung „angesteckt“, insbesondere die Projektion in I zum Gemisch gemacht. D. h.: das Resultat der Messung ist unbestimmt, weil der Zustand des Beobachters vor der Messung nicht genau bekannt ist. Es wäre denkbar, daß ein solcher Mechanismus funktioniert, denn die Informiertheit des Beobachters über den eigenen Zustand könnte naturgesetzliche Schranken haben. Diese Schranken kämen in den Werten der w_n zum Ausdruck, die vom Beobachter allein bestimmt sein müßten (also von φ unabhängig!).

Und hieran scheidet dieser Erklärungsversuch: denn die Quantenmechanik verlangt $w_n = (P_{\psi_n} \varphi, \varphi) = |(\varphi, \psi_n)|^2$, d. h. w_n von φ abhängig! Eine evtl. vorhandene andere Zerlegung $U' = \sum_1^{\infty} w'_n P_{[\phi'_n]}$ (die $\Phi'_n(q, r) = \psi_n(q) \eta_n(r)$ sind normiert orthogonal!) nützt auch nichts: denn die w'_n sind (bis auf die Reihenfolge) durch U' eindeutig festgelegt (IV. 3.), also den w_n gleich²¹⁴.

Die Akausalität des Prozesses **1.** wird also nicht durch die mangelhafte Kenntnis über den Zustand des Beobachters veranlaßt — wir werden denselben darum im folgenden stets als genau bekannt annehmen.

Wenden wir uns wieder der am Ende von VI. 1. formulierten Aufgabe zu, I, II, III sollen die dort angegebene Bedeutung haben, für die quantenmechanische Untersuchung von I, II verwenden wir die Bezeichnungen von VI. 2., während III außerhalb der Rechnungen bleibt (vgl. das in VI. 1. hierüber Gesagte). A sei die eigentlich zu messende Größe (in I), $\varphi_1(q), \varphi_2(q), \dots$ ihre Eigenfunktionen. I befinde sich im Zustande $\varphi(q)$.

Ist I das beobachtete System, $II + III$ der Beobachter, so haben wir den Prozeß \mathfrak{Z} . anzuwenden, und finden: die Messung führt I aus dem Zustande φ in einen der Zustände φ_n ($n = 1, 2, \dots$) über, die bzw. Wahrscheinlichkeiten hierfür sind bzw. $|(\varphi, \varphi_n)|^2$ ($n = 1, 2, \dots$). Wie lautet nun die Beschreibungsweise, wenn $I + II$ das beobachtete System ist, und nur III der Beobachter?

In diesem Falle müssen wir sagen: II ist ein Meßinstrument, das auf einer Skala den Wert von A (in I) anzeigt, der Zeigerstand auf dieser Skala ist eine physikalische Größe B (in II) die eigentlich von III beobachtet wird (wenn II schon im Inneren des Körpers des Beobachters liegt, treten an Stelle von Skala und Zeigerstand die korrespondierenden physiologischen Begriffe: z. B. Retina und Bild auf der Retina usw.), und deren Werte mit denjenigen von A ein-eindeutig gekoppelt sind. A habe die Werte a_1, a_2, \dots , B die Werte b_1, b_2, \dots , die Numerierung sei so, daß a_n mit b_n gekoppelt ist.

Anfangs ist I im (unbekannten) Zustand $\varphi(q)$ und II im (bekannten) Zustand $\xi(r)$, also $I + II$ im Zustand $\Phi(q, r) = \varphi(q) \xi(r)$. Die Messung (soweit sie von II an I vollzogen wird), wird, wie im früheren Beispiel, durch einen Energieoperator H (in $I + II$) in der Zeit t vollzogen: dies ist der Prozeß \mathfrak{Z} ., der Φ in $\Phi' = e^{-\frac{2\pi i}{h} t H} \Phi$ verwandelt. Vom Standpunkte des Beobachters III aus gesehen, kann von einer Messung nur dann die Rede sein, wenn folgendes der Fall ist: würde III durch Prozeß \mathfrak{I} . die gleichzeitig meßbaren Größen A, B messen (in I bzw. II , oder: beide in $I + II$) so hätten Wertepaare a_n, b_n mit $m \neq n$ die Wahrscheinlichkeit 0, für $m = n$ dagegen gewisse Wahrscheinlichkeiten w_n . D. h.: es genügt II „anzusehen“, und A in I ist gemessen. Die Quantenmechanik verlangt dann noch $w_n = |(\varphi, \varphi_n)|^2$.

Ist dies geschehen, so ist der Meßvorgang, soweit er in II vor sich geht, theoretisch „erklärt“, d. h. die in VI. 1. diskutierte Grenze von $I | II + III$ nach $I + II | III$ verschoben.

Die mathematische Aufgabe ist also diese: Ein vollständiges normiertes Orthogonalsystem $\varphi_1, \varphi_2, \dots$ in I ist gegeben. Ein ebensolches ξ_1, ξ_2, \dots in \mathfrak{R}^{II} sowie ein Zustand ξ in \mathfrak{R}^{II} ist zu finden, ferner ein (Energie-)Operator H in \mathfrak{R}^{I+II} und ein t , so daß folgendes gilt. Wenn φ ein beliebiger Zustand in \mathfrak{R}^I ist, und $\Phi(q, r) = \varphi(q) \xi(r)$, $\Phi'(q, r) = e^{-\frac{2\pi i}{h} t H} \Phi(q, r)$ gesetzt wird, so habe $\Phi'(q, r)$ die Form $\sum_1^n c_n \varphi_n(q) \xi_n(r)$

(die c_n sind natürlich von φ abhängig). Dabei soll $|c_n|^2 = |(\varphi, \varphi_n)|^2$ sein. (Daß letzteres der oben formulierten physikalischen Forderung gleichkommt, wurde in VI. 2. diskutiert.)

Wir werden im folgenden neben $\varphi_1, \varphi_2, \dots$ auch ξ_1, ξ_2, \dots und ξ fest vorgeben, und an Stelle von H den unitären Operator $\Delta = e^{-\frac{2\pi i}{\hbar} t H}$ suchen.

Die mathematische Aufgabe führt uns zu der in VI. 2. gelösten zurück: dort war Φ' gegeben, und wir zeigten die Existenz von c_n, φ_n, ξ_n , jetzt sind φ_n, ξ_n fest und Φ, c_n in Abhängigkeit von φ gegeben — und es gilt Δ so zu bestimmen, daß für $\Phi' = \Delta \Phi$ diese c_n, φ_n, ξ_n herauskommen.

Wir werden zeigen, daß eine solche Bestimmung von Δ tatsächlich möglich ist. Dabei kommt es uns nur auf das Prinzipielle an, d. h. die Existenz irgendeines solchen Δ . Die weitere Frage, ob die $\Delta = e^{-\frac{2\pi i}{\hbar} t H}$ der einfachsten anschaulichen Versuchsanordnungen (etwa derer aus III. 4.) diese Eigenschaft auch haben, soll uns dagegen nicht beschäftigen. Denn da wir sahen, daß unsere Bedingungen tatsächlich dem anschaulichen Kriterium des Messungscharakters bei einem Eingriff gleichkommen, und da die genannten Versuchsanordnungen den anschaulichen Charakter der Messung jedenfalls besitzen, müßte die Quantenmechanik der Anschauung grob widersprechende Resultate ergeben, wenn diese Δ unsere Bedingung nicht erfüllten (wenigstens angenähert)²¹⁵. D. h. im folgenden soll nur ein abstraktes Δ , das unsere Bedingungen genau erfüllt, angegeben werden.

Seien also die φ_m ($m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$) bzw. die ξ_n ($n = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$) zwei gegebene vollständige normierte Orthogonalsysteme in \mathfrak{R}^I bzw. \mathfrak{R}^{II} (wir lassen m, n nicht über $1, 2, \dots$ laufen, sondern über $0, \pm 1, \pm 2, \dots$, dies hat lediglich technische Gründe und ist prinzipiell gleichgültig), der Zustand ξ sei der Einfachheit halber gleich ξ_0 . Wir definieren den Operator Δ durch

$$\Delta \sum_{-\infty}^{\infty} x_{mn} \varphi_m(q) \xi_n(r) = \sum_{-\infty}^{\infty} x_{mn} \varphi_m(q) \xi_{m+n}(r),$$

da die $\varphi_m(q) \xi_n(r)$ ebenso wie die $\varphi_m(q) \xi_{m+n}(r)$ ein vollständiges normiertes Orthogonalsystem in \mathfrak{R}^{I+II} bilden, ist dieses Δ unitär. Nun ist

$$\varphi(q) = \sum_{-\infty}^{\infty} (\varphi, \varphi_m) \cdot \varphi_m(q), \quad \xi(r) = \xi_0(r),$$

also

$$\Phi(q, r) = \varphi(q) \xi(r) = \sum_{-\infty}^{\infty} (\varphi, \varphi_m) \cdot \varphi_m(q) \xi_0(r),$$

$$\Phi'(q, r) = \Delta \Phi(q, r) = \sum_{-\infty}^{\infty} (\varphi, \varphi_m) \cdot \varphi_m(q) \xi_m(r).$$

Damit ist unser Ziel erreicht: es ist sogar $c_n = (\varphi, \varphi_n)$.

Eine bessere Übersicht über den Mechanismus dieses Prozesses gewinnen wir übrigens, wenn wir ihn durch konkrete Schrödingersche Wellenfunktionen exemplifizieren, und an Stelle von ΔH selbst angeben.

Sowohl das beobachtete Objekt als auch der Beobachter (d. i. I bzw. II) mögen durch eine einzige, von $-\infty$ bis $+\infty$ kontinuierlich laufende Variable q bzw. r gekennzeichnet sein: d. h. beide seien als linear bewegliche Punkte gedacht, ihre Wellenfunktionen haben also stets die Form $\psi(q)$ bzw. $\eta(r)$. Wir nehmen an, daß ihre Massen m_1 bzw. m_2 so groß sind, daß der kinetische Energieanteil des Energieoperators (d. i. $\frac{1}{2m_1} \left(\frac{\hbar}{2\pi i} \frac{\partial}{\partial q} \right)^2 + \frac{1}{2m_2} \left(\frac{\hbar}{2\pi i} \frac{\partial}{\partial r} \right)^2$) vernachlässigt werden darf, dann bleibt von H nur der für die Messung entscheidende Wechselwirkungs-Energieanteil übrig. Für diesen wählen wir die besondere Form $\frac{\hbar}{2\pi i} q \frac{\partial}{\partial r}$.

Die Schrödingersche zeitabhängige Differentialgleichung lautet dann für die $I + II$ -Wellenfunktion $\psi_t = \psi_t(q, r)$:

$$\frac{\hbar}{2\pi i} \frac{\partial}{\partial t} \psi_t(q, r) = - \frac{\hbar}{2\pi i} q \frac{\partial}{\partial r} \psi_t(q, r),$$

$$\left(\frac{\partial}{\partial t} + q \frac{\partial}{\partial r} \right) \psi_t(q, r) = 0,$$

d. h.

$$\psi_t(q, r) = f(q, r - tq).$$

Ist für $t = 0$ $\psi_0(q, r) = \Phi(q, r)$, so haben wir $f(q, r) = \Phi(q, r)$, also

$$\psi_t(q, r) = \Phi(q, r - tq).$$

Sind insbesondere die Anfangszustände von I, II durch $\varphi(q)$ bzw. $\xi(r)$ dargestellt, so ist im Sinne unseres Rechenschemas (wenn die darin auftretende Zeit t gleich 1 gewählt wird)

$$\Phi(q, r) = \varphi(q) \xi(r),$$

$$\Phi'(q, r) = \psi_1(q, r) = \varphi(q) \xi(r - q).$$

Wir wollen nun zeigen, daß dies zu einer Ortsmessung von I durch II benützt werden kann, d. h. daß die Koordinaten q, r gekoppelt sind. (Da q, r Streckenspektren haben, also nur beliebig genau, aber nicht absolut genau, meßbar sind, kann dies nur angenähert gelingen.)

Zu diesem Zweck wollen wir annehmen, daß $\xi(r)$ nur in einem sehr engen Intervall $-\varepsilon < r < \varepsilon$ von 0 verschieden ist (d. h. die Koordinate r des Beobachters vor der Messung sehr genau bekannt), außerdem soll ξ natürlich normiert sein:

$$\|\xi\| = 1, \quad \text{d. h.} \quad \int |\xi(r)|^2 dr = 1.$$

Die Wahrscheinlichkeit dafür, daß q im Intervalle $q_0 - \delta < q < q_0 + \delta$ liegt, und r im Intervalle $r_0 - \delta' < r < r_0 + \delta'$, ist

$$\int_{q_0-\delta}^{q_0+\delta} \int_{r_0-\delta'}^{r_0+\delta'} |\Phi'(qr)|^2 dq dr = \int_{q_0-\delta}^{q_0+\delta} \int_{r_0-\delta'}^{r_0+\delta'} |\varphi(q)|^2 |\xi(r-q)|^2 dq dr.$$

Wenn sich q_0, r_0 um mehr als $\delta + \delta' + \varepsilon$ unterscheiden, so ist dies 0, d. h.: q, r sind so sehr gekoppelt, daß der Unterschied nie $> \delta + \delta' + \varepsilon$ werden kann. Und für $r_0 = q_0$ ist dies, wenn wir $\delta' \geq \delta + \varepsilon$ wählen,

wegen der Annahmen über ξ , gleich $\int_{q_0-\delta}^{q_0+\delta} |\varphi(q)|^2 dq$. Da wir aber $\delta, \delta', \varepsilon$ beliebig klein wählen können (nur > 0 müssen sie sein!), besagt dies: q, r sind beliebig genau gekoppelt, und die Wahrscheinlichkeitsdichte hat den von der Quantenmechanik geforderten Wert, $|\varphi(q)|^2$.

D. h. die Verhältnisse der Messung, wie wir sie in VI. 1. und in diesem Paragraphen diskutiert hatten, sind verwirklicht.

Die Diskussion komplizierterer Beispiele, etwa eines Analogons unseres 4-gliedrigen Beispiels aus VI. 1., oder die Kontrolle der Richtigkeit der Messung, die *II* an *I* ausführte, durch einen zweiten Beobachter *III*, kann analog ausgeführt werden. Sie bleibe dem Leser überlassen.

Anmerkungen.

1. So sind in deutscher Sprache u. a. die folgenden zusammenfassenden Darstellungen vorhanden: SOMMERFELD: Ergänzungsband zur 4. Aufl. v. Atombau und Spektrallinien, Braunschweig 1928. WEYL: Gruppentheorie und Quantenmechanik. Leipzig 1928, zweite Aufl. Leipzig 1931. FRAENKEL: Einführung in die Quantenmechanik. Berlin 1929. BORN und JORDAN: Elementare Quantenmechanik. Berlin 1930. DIRAC: Prinzipien der Quantenmechanik (Übers. v. W. BLOCH). Leipzig 1931.

2. Vgl. Proc. Roy. Soc., London, Bd. 109 (1925) u. ff., insbesondere Bd. 113 (1926). Unabhängig von DIRAC gaben P. JORDAN: Z. Physik Bd. 40 (1926), und F. LONDON: Z. Physik Bd. 40 (1926) verwandte Begründungen der Theorie an.

3. Vgl. Kap. IV. und VI. 3.

4. Vgl. Kap. V.

5. Ihre Haupttappen waren: Die Entdeckung der Quantengesetze durch PLANCK, im Falle der „schwarzen“ Hohlraumstrahlung (vgl. z. B. PLANCKS Darstellung in seinem Buche „Wärmestrahlung“, Leipzig 1906) ¹ und der Nachweis der korpuskularen Natur des Lichtes (Lichtquantentheorie) durch EINSTEIN (Ann. Physik [4] Bd. 17 [1905], damit war das erste Beispiel der Duplizität Wellen-Korpuskeln gegeben, die, wie wir heute wissen, die ganze Mikrophysik beherrscht); die Übertragung dieser zwei Gruppen von Gesetzmäßigkeiten aufs Atommodell durch BOHR: Fysisk Tidskr. Bd. 12 (1914); Z. Physik Bd. 6 (1920).

6. Nach EPSTEIN-SOMMERFELD waren für mehrfach-periodische Bewegungen die (zu den mechanischen Gesetzen hinzutretenden) Quantengesetze bekannt (vgl. z. B. SOMMERFELD: Atombau und Spektrallinien, Braunschweig 1924). Demgegenüber stand es fest, daß ein frei beweglicher Massenpunkt, oder ein Planet auf einer Hyperbelbahn (im Gegensatz zu denen auf Ellipsenbahnen), „ungequantelt“ ist. Eine vollständige Darstellung dieser Entwicklungsstufe der Quantentheorie findet der Leser in den Büchern von REICHE: Die Quantentheorie, ihr Ursprung und ihre Entwicklung, Berlin 1921, und LANDÉ: Fortschritte der Quantentheorie, Dresden 1922.

7. Dies bewies SCHRÖDINGER: Ann. Physik [4] Bd. 79 (1926).

8. Z. Physik Bd. 37 (1926).

9. Vgl. die in Anm. ² genannten Abhandlungen. SCHRÖDINGERS Abhandlungen sind in Buchform erschienen: Abhandlungen zur Wellenmechanik, Leipzig 1928.

10. Der heutige Stand der Dinge läßt sich dahin kennzeichnen, daß die Theorie, soweit es sich um einzelne Elektronen oder um die Elektronenschalen von Atomen oder Molekülen handelt, vollkommen erfolgreich ist, und zwar sowohl wenn es sich um elektrostatische Kraftwirkungen handelt, als auch bei den elektromagnetischen Vorgängen bei der Erzeugung, Fortpflanzung und Verwandlung des Lichtes. Dagegen scheint sie bei der Behandlung der Atomkerne und beim Versuche, eine allgemeine und relativistische Theorie des Elektromagnetismus aufzustellen, trotz bemerkenswerter Teilerfolge in große, ohne wesentliche neue Gedanken wohl kaum zu überwindende, Schwierigkeiten zu führen.

11. Die klassisch-mechanische Bewegung wird ja bekanntlich ganz durch die Hamiltonsche Funktion geregelt, da sie die Bewegungsgleichungen

$$\dot{q}_l = \frac{\partial H}{\partial p_l}, \quad \dot{p}_l = -\frac{\partial H}{\partial q_l} \quad (l = 1, \dots, k)$$

liefert. Vor der Entdeckung der Quantenmechanik versuchte man die Quantenerscheinungen unter Beibehaltung dieser Bewegungsgleichungen durch das Aufstellen zusätzlicher „Quantenbedingungen“ zu erfassen (vgl. Anm. 6). Die Bewegungsgleichungen bestimmten zu jedem, zur Zeit $t = 0$ gegebenen, Wertesystem der $q_1, \dots, q_k, p_1, \dots, p_k$ die weitere zeitliche Entwicklung, die „Bahnkurve“ des Systems im $2k$ -dimensionalen „Phasenraume“ der $q_1, \dots, q_k, p_1, \dots, p_k$, jede Zusatzbedingung kommt daher auf eine Einschränkung aller möglichen Anfangswerte bzw. Bahnkurven auf ein gewisses Teilsystem heraus. (Entsprechend den wenigen zulässigen Bahn niveaus sind dann auch nur wenige Energieniveaus möglich.) Wenn auch die Quantenmechanik mit diesem Verfahren völlig gebrochen hat, ist es doch von vornherein klar, daß die Hamiltonsche Funktion auch in ihr eine große Rolle spielen muß: denn die gesamte Erfahrung beweist die Gültigkeit des Bohrschen Korrespondenzprinzips, welches aussagt, daß die Quantentheorie im sog. Grenzfalle hoher Quantenzahlen mit der klassischen Mechanik übereinstimmende Resultate ergeben muß.

12. Die drei letzteren Begriffsbildungen sind dem vorquantenmechanischen, vornehmlich von N. BOHR entwickelten, Ideenkreise der Quantentheorie entnommen. Wir werden sie später vom quantenmechanischen Standpunkte noch eingehend analysieren, vgl. die in III. 6. darzulegende Diracsche Theorie des Lichtes. In ihrem historischen Zusammenhange findet man sie in BOHRs Abhandlungen über den Atombau aus den Jahren 1913 bis 1916 dargestellt (in deutscher Übersetzung von H. STINTZING, Braunschweig 1921, erschienen).

13. Es handelt sich, wie die genauere mathematische Analyse zeigt, notwendigerweise um unendliche Matrizen. Wir gehen hier nicht näher auf die Eigenschaften solcher Matrizen ein, da wir sie später doch ganz eingehend betrachten werden. Es genüge vorläufig, daß der formal-algebraische Kalkül mit diesen Matrizen im Sinne der bekannten Regeln der Matrizen-Addition und -Multiplikation zu verstehen ist. Unter 0, 1 verstehen wir insbesondere die Null- bzw. die Einheitsmatrix (mit lauter verschwindenden Elementen, bzw. mit verschwindenden Elementen außerhalb und Einsen auf der Diagonale).

14. Wenn Q_1, P_1 Hermitesch sind, brauchen weder $Q_1 P_1$, noch $P_1 Q_1$ es auch zu sein, wohl aber ist es $\frac{1}{2} (Q_1 P_1 + P_1 Q_1)$ stets. Im Falle von $Q_1^2 P_1$ kommen aber sowohl $\frac{1}{2} (Q_1^2 P_1 + P_1 Q_1^2)$, als auch $Q_1 P_1 Q_1$ in Frage (allerdings sind für $P_1 Q_1 - Q_1 P_1 = \frac{\hbar}{2\pi i} 1$ diese zwei Ausdrücke zufällig gleich), im Falle von $Q_1^2 P_1^2$ $\frac{1}{2} (Q_1^2 P_1^2 + P_1^2 Q_1^2)$, $Q_1 P_1^2 Q_1$, $P_1 Q_1^2 P_1$, usw. (hier fallen diese Ausdrücke auch im vorhin genannten Spezialfalle nicht alle zusammen). Wir gehen hierauf nicht näher ein, da der später zu entwickelnde Operatorenkalkül diese Verhältnisse viel klarer zu übersehen gestatten wird.

15. Es ist

$$\frac{\hbar}{2\pi i} \frac{\partial}{\partial q_1} (q_1 \psi) = q_1 \frac{\hbar}{2\pi i} \frac{\partial}{\partial q_1} \psi + \frac{\hbar}{2\pi i} \psi.$$

Somit haben wir $\frac{\hbar}{2\pi i} \frac{\partial}{\partial q_1} \cdot q_1 - q_1 \cdot \frac{\hbar}{2\pi i} \frac{\partial}{\partial q_1} = \frac{\hbar}{2\pi i} 1$, wenn 1 die identische (ψ in sich selbst überführende) Operation ist, d. h. $\frac{\hbar}{2\pi i} \frac{\partial}{\partial q_1}$ und q_1 erfüllen dieselbe Vertauschungsrelation wie die Matrizen P_1 und Q_1 .

16. Vgl. seine zwei ersten Abhandlungen, im in Anm. 9 genannten Buch. [Ann. Phys. (4) Bd. 79 (1926)].

17. Vgl. die erste der in Anm. 16 genannten Arbeiten SCHRÖDINGERS. Wir werden das Spektrum und seine Teile erst in II. 6 bis 9 genau definieren.

18. In der ursprünglichen Fassung der Matrizenmechanik (vgl. unsere Ausführungen w. o.) gab es einen solchen allgemeinen Zustandsbegriff, von dem die

stationären Spezialfälle sind, nicht. Nur die, den Eigenwerten der Energie zugeordneten, stationären Zustände waren Gegenstand der Theorie.

19. $H = H(q_1, \dots, q_k, p_1, \dots, p_k)$ darf sogar die Zeit t explizite enthalten. Natürlich wird es dann im allgemeinen überhaupt keine stationären Zustände geben.

20. Falls nur ein Punktspektrum existiert, vgl. II. 6.

21. Diese, wie auch alle folgenden, Reihenentwicklungen konvergieren „im Mittel“. Wir gehen darauf näher in II. 2 ein.

22. Daß solche Schwingungen für stationäre Zustände, und nur solche, fehlen, war eines der wichtigsten Grundpostulate BOHRS in 1913. Die klassische Elektrodynamik steht damit im Widerspruch.

23. Vgl. die zweite in Anm. ¹⁶ genannte Arbeit SCHRÖDINGERS.

24. Vgl. Anm. 7.

25. Vgl. z. B. die §§ 20, 23 des in Anm. ¹ genannten Buches von BORN und JORDAN.

26. Wegen

$$S^{-1} \cdot \mathbf{1} \cdot S = \mathbf{1},$$

$$S^{-1} \cdot aA \cdot S = a \cdot S^{-1}AS,$$

$$S^{-1} \cdot (A + B) \cdot S = S^{-1}AS + S^{-1}BS,$$

$$S^{-1} \cdot AB \cdot S = S^{-1}AS \cdot S^{-1}BS$$

gilt für jedes Matrizen-Polynom $P(A, B, \dots)$

$$S^{-1}P(A, B, \dots)S = P(S^{-1}AS, S^{-1}BS, \dots).$$

Wählen wir für P die linken Seiten der Vertauschungsrelationen, so folgt hieraus deren Invarianz; wählen wir für P H , so erhalten wir $S^{-1}HS = H$.

27. $\delta_{\mu\nu} = 1$ für $\mu = \nu$ und $= 0$ für $\mu \neq \nu$ ist das bekannte Kronecker-Weierstraßsche Symbol.

28. Die S -Spalten $s_{1\varrho}, s_{2\varrho}, \dots$ der ϱ mit $w_\varrho = \lambda$ bildeten ja ein vollständiges Lösungssystem, und sie müssen als Spalten einer Matrix, die eine Inverse besitzt, linear unabhängig sein.

29. Da eine beliebige Permutation der Spalten von S , mit der entsprechenden Permutation der Zeilen von S^{-1} verbunden, die Diagonalelemente in H in gleicher Weise permutiert, ist die Reihenfolge der w_1, w_2, \dots in der Tat undefiniert und unbestimmbar.

30. Die Theorie der Integralgleichungen hat ihre definitive Form durch FREDHOLM und HILBERT erhalten. Eine erschöpfende Darstellung sowie Literaturhinweise finden sich im Buche von COURANT-HILBERT: Methoden der mathematischen Physik, Berlin 1931.

31. Genauer: wenn wir den Lebesgueschen Integralbegriff zugrunde legen, so muß für $q \geq 0$ $\varphi(q) = 0$ bis auf eine Menge vom Maße 0 gelten — d. h. es ist bis auf eine solche Menge identisch $\varphi(q) \equiv 0$.

32. Die Fläche von $\delta(q)$ ist also als unendlich dünne und unendlich hohe, bei $q = 0$ gelegene Spitze, von der Fläche 1, gedacht. Dies ist etwa das Grenzverhalten

der Funktion $\sqrt{\frac{a}{\pi}} e^{-ae^a}$ für $a \rightarrow +\infty$ — aber nichtdestoweniger unmöglich.

33. Eine derartige Vereinheitlichung ist übrigens lange vor der Quantenmechanik von E. H. MOORE, dem Schöpfer der sog. „General Analysis“ angestrebt worden. Vgl. dazu den Artikel von HELLINGER-TOEPLITZ in der Math. Enzyklopädie Bd. II, 3, 9, Leipzig 1927.

34. Es ist eine mehrfach bemerkte Tatsache in der Schrödingerschen Theorie, daß bei den Wellenfunktionen φ nur die Endlichkeit von $\int_{\Omega} |\varphi(q_1 \dots q_k)|^2 dq_1 \dots dq_k$

wesentlich ist. So darf z. B. φ singular sein, etwa unendlich werden, wenn nur das genannte Integral endlich bleibt. Ein lehrreiches Beispiel hierfür ist das Wasser-

stoffatom in der relativistischen Theorie von DIRAC, vgl. Proc. Roy. Soc., Lond., Bd. 117 (1928); ferner W. GORDON: Z. Physik Bd. 48 (1928).

35. Im Laufe unserer Betrachtungen über den Hilbertschen Raum wird sich ein Beweis dieses Satzes mitergeben (vgl. II. 2, 3, insbesondere Satz 5. in II. 2). Es ist noch erwähnenswert, daß die für viele Zwecke ausreichende, leichter zu beweisende Hälfte dieses Satzes der Isomorphismus zwischen F_Ω und einem geeigneten Teile von F_Z ist; dieser stammt von HILBERT (Gött. Nachr. 1906). So stützt sich SCHRÖDINGERS ursprünglicher Gleichwertigkeitsbeweis (vgl. Anm.⁷) auch nur auf diese Satzhälfte.

36. Es ist

$$\frac{q_m \cdot q_m \cdot \varphi(q_1 \cdots q_k)}{\frac{\partial}{\partial q_m} \frac{\partial}{\partial q_n}} = \frac{q_n \cdot q_m \cdot \varphi(q_1 \cdots q_k)}{\frac{\partial}{\partial q_n} \frac{\partial}{\partial q_m}},$$

$$\frac{\partial}{\partial q_m} q_n \cdot \varphi(q_1 \cdots q_k) - q_n \cdot \frac{\partial}{\partial q_m} \varphi(q_1 \cdots q_k) \begin{cases} = 0 & \text{für } m \neq n, \\ = \varphi(q_1 \cdots q_k) & \text{für } m = n, \end{cases}$$

woraus die gewünschten Operatorenrelationen sofort folgen.

37. Die Charakterisierung des \mathfrak{R}_n durch \mathbf{A} , \mathbf{B} , $\mathbf{C}^{(n)}$ stammt von WEYL (vgl. z. B. „Raum, Zeit, Materie“, Berlin 1921). Will man statt \mathfrak{R}_n \mathfrak{R}_∞ erhalten, so ist es naturgemäß, $\mathbf{C}^{(n)}$ durch $\mathbf{C}^{(\infty)}$ zu ersetzen, aber dann werden \mathbf{D} , \mathbf{E} notwendig, vgl. das weiter unten im Text Gesagte.

38. Außer dem Nullpunkt oder Nullvektor 0 von \mathfrak{R} gibt es noch die Zahl 0, so daß für zwei Dinge dasselbe Symbol Verwendung findet. Die Verhältnisse liegen indessen so, daß hieraus keine Mißverständnisse entstehen können.

39. Es würde genügen zu verlangen: mit f gehört auch af , mit f, g auch $f + g$ zu \mathfrak{M} . Dann gehören mit f_1, \dots, f_k auch $a_1 f_1, \dots, a_k f_k$ zu \mathfrak{M} , und der Reihe nach auch $a_1 f_1 + a_2 f_2, a_1 f_1 + a_2 f_2 + a_3 f_3, \dots, a_1 f_1 + \dots + a_k f_k$.

40. Die Realität von (f, f) folgt bereits aus der Hermiteschen Symmetrie: denn für $f = g$ besagt dies $(f, f) = \overline{(f, f)}$.

41. Hat f die Komponenten x_1, \dots, x_n , so ist nach Ausführungen in γ), II. 1.,

$$\sqrt{(f, f)} = \sqrt{\sum_1^n |x_v|^2},$$

d. h. die übliche Euklidische Länge.

42. Da (f, f) reell und ≥ 0 ist, ist $\sqrt{(f, f)}$ reell, und zwar wird die Quadratwurzel ≥ 0 gewählt. Dasselbe gilt somit für $\|f - g\|$.

43. Nach Satz 2., der hierbei auf $f - g, g - h$ anzuwenden ist, muß $f - g = 0$, d. h. $g = f$, oder $g - h = 0$, d. h. $g = h$, oder $g - h = c(f - g)$ (c reell, > 0),

$$\text{d. h. } g = \frac{c}{c+1} f + \frac{1}{c+1} h \text{ sein — d. h. } g = af + (1-a)h \text{ mit } a \text{ bzw. } = 1, 0, \frac{c}{c+1}.$$

— Geometrisch besagt dies: der Punkt g liegt auf der Strecke f, h .

44. Auch die folgende Definition des Häufungspunktes ist üblich: Zu jedem $\varepsilon > 0$ gebe es ein f' aus \mathfrak{A} mit $\|f - f'\| < \varepsilon$. Man beweist, wörtlich wie in der Zahlenanalysis, die Gleichwertigkeit beider Definitionen.

45. Wir verwenden der Kürze halber den topologischen Terminus technicus (vgl. z. B. HAUSDORFF: Mengenlehre, Berlin 1927), der w. u. im Text erklärt wird.

46. Es ist ja $\|f\| = \sqrt{(f, f)} = 1$.

47. Wie man sieht, entsprechen die vollständigen Orthogonalsysteme den kartesischen Koordinatensystemen (d. h. den in deren Achsenrichtungen weisenden Einheitsvektoren) in \mathfrak{R}_n .

48. Als lineare Mannigfaltigkeit muß eine solche $\{\mathfrak{A}\}$ enthalten, und da sie abgeschlossen ist, auch die Häufungspunkte von $\{\mathfrak{A}\}$.

49. Sei $\varphi_1, \varphi_2, \dots$ vollständig, dann ist $\varphi_2, \varphi_3, \dots$ nicht mehr vollständig, aber auch unendlich!

50. Man bedenke, daß eine Doppelfolge g_{nm} ($n, m = 1, 2, \dots$) auch als einfache Folge geschrieben werden kann: $g_{11}, g_{12}, g_{21}, g_{13}, g_{22}, g_{31}, \dots$

51. Dieses Kapitel ist zum Verständnis der späteren nicht notwendig.

52. Z. B. CARATHÉODORY: Vorlesungen über reelle Funktionen, Leipzig 1927, insbesondere S. 237—274; KAMKE: Das Lebesguesche Integral, Leipzig 1925.

53. Es ist allgemein

$$|x + y|^2 = (x + y)(\bar{x} + \bar{y}) = x\bar{x} + y\bar{y} + (x\bar{y} + \bar{x}y) = |x|^2 + |y|^2 + 2 \operatorname{Re}(x\bar{y}).$$

54. Dies ist in der Theorie des Lebesgueschen Integrals allgemein üblich.

55. Obwohl α kontinuierlich variiert, ist dies eine Summe und kein Integral, denn es kommt ja nur eine Folge dieser α in der Summe vor!

56. $x(\alpha), y(\alpha)$ definieren wir natürlich als $\sum x(\alpha)y(\alpha)$.

57. Dies ist der mengentheoretische Satz über die „Unabzählbarkeit des Zahlenkontinuums“. Vgl. z. B. im in Anm. 45 genannten Buch von HAUSDORFF.

58. Sei z. B. \mathfrak{R}_∞ ein F_Ω , dabei Ω der Raum aller reellen x , $-\infty < x < \infty$. $\frac{d}{dx}$ ist eine Funktionenfunktion, d. h. ein Operator, aber in unserem Sinne nur für solche $f(x)$ definiert, die erstens differentierbar sind, und zweitens endliches $\int_{-\infty}^{\infty} \left| \frac{d}{dx} f(x) \right|^2 dx$ haben (vgl. II. 8., wo das genauer erörtert wird). Natürlich

wird dann im allgemeinen $\frac{d^2}{dx^2} f(x)$ nicht existieren müssen, und $\int_{-\infty}^{\infty} \left| \frac{d^2}{dx^2} f(x) \right|^2 dx$ muß nicht endlich sein. So verhält sich z. B. $f(x) = |x|^{\frac{3}{2}} e^{-x^2}$.

59. Nach den Ausführungen von II. 3. (bei der Diskussion der Bedingung **E**.) genügt es, wenn man alle Linearaggregate der folgenden Funktionen beliebig gut approximieren kann: $f(x) = 1$ in einer aus endlich vielen Intervallen bestehenden Menge, = 0 sonst. Dies gelingt, wenn wir jede einzelne solche Funktion approximieren können; und dieses, wenn es für die Funktionen mit einem einzigen 1-Intervall geht (die anderen sind Summen solcher); das Intervall sei z. B. $a < x < b$. Die Funktion

$$f(x) = 0, \quad \text{für } x < a - \varepsilon \text{ oder } x > b + \varepsilon,$$

$$f(x) = \cos^2 \frac{\pi}{2} \frac{a-x}{\varepsilon}, \quad \text{für } a - \varepsilon \leq x \leq a,$$

$$f(x) = \cos^2 \frac{\pi}{2} \frac{x-b}{\varepsilon}, \quad \text{für } b \leq x \leq b + \varepsilon,$$

$$f(x) = 1, \quad \text{für } a < x < b$$

genügt in der Tat unseren Regularitätsanforderungen, und approximiert für hinreichend kleines $\varepsilon (> 0)$ beliebig gut.

60. Diese Betrachtung ist nicht streng, da sie die Linearität bei unendlichen Summen verwendet, usw. Sie läßt sich aber wie folgt vervollständigen: Sei $\varphi_1, \varphi_2, \dots$ ein vollständiges und normiertes Orthogonalsystem, A, A^* adjungierte Operatoren.

Sei $f = \sum_1^{\infty} x_\nu \varphi_\nu$, $Af = \sum_1^{\infty} y_\nu \varphi_\nu$. Dann ist:

$$\begin{aligned} y_\mu &= (Af, \varphi_\mu) = (f, A^* \varphi_\mu) = \sum_1^{\infty} y_\nu (f, \varphi_\nu) (A^* \varphi_\mu, \varphi_\nu) \\ &= \sum_1^{\infty} y_\nu x_\nu (\varphi_\mu, A \varphi_\nu) = \sum_1^{\infty} y_\nu (A \varphi_\nu, \varphi_\mu) x_\nu. \end{aligned}$$

(nach Satz 7., γ)

Wenn wir also $a_{\mu\nu} = (A\varphi_\nu, \varphi_\mu)$ setzen, so haben wir die Formel $y_\mu = \sum_1^\infty a_{\mu\nu} x_\nu$ des Textes, und gesicherte absolute Konvergenz.

Im Hilbertschen Raume der Folgen x_1, x_2, \dots bilden die Folgen $\varphi_1 = 1, 0, 0, \dots; \varphi_2 = 0, 1, 0, \dots; \dots$, wie man leicht erkennt, ein vollständiges und normiertes Orthogonalsystem. Für $f = \{x_1, x_2, \dots\}$ ist $f = \sum_1^\infty x_\nu \varphi_\nu$, für $Af = \{y_1, y_2, \dots\}$ $Af = \sum_1^\infty y_\nu \varphi_\nu$, womit der Anschluß an den Text restlos erreicht ist.

Bilden wir $a_{\mu\nu}^*$ für A^* , so sehen wir:

$$a_{\mu\nu}^* = (A^* \varphi_\nu, \varphi_\mu) = (\varphi_\nu, A \varphi_\mu) = \overline{(A \varphi_\mu, \varphi_\nu)} = \overline{a_{\nu\mu}}.$$

61. (Af, f) ist jedenfalls reell, da es gleich

$$(Af, f) = (f, Af) = \overline{(Af, f)}$$

ist.

62. Somit müssen U, U^* überall sinnvoll sein. Ferner sind sie zueinander invers, daher nehmen beide jeden Wert an, und jeden nur einmal.

63. Bei gegebenem $\int_{-\infty}^{+\infty} |\varphi(q)|^2 dq$ kann sowohl $\int_{-\infty}^{+\infty} q^2 |\varphi(q)|^2 dq$ als auch

$\int_{-\infty}^{+\infty} \left| \frac{d}{dq} \varphi(q) \right|^2 dq$ beliebig groß gemacht werden. Z. B.: $\varphi(q) = a c^{-bq^2}$, die drei

Integrale sind alle drei endlich ($b > 0!$), aber bzw. proportional $a^2 b^{-\frac{1}{2}}, a^2 b^{-\frac{3}{2}}, a^2 b^{\frac{1}{2}}$, so daß der Wert von zweien beliebig vorgeschrieben werden kann.

64. Gött. Nachr. 1906.

65. Auf den Hermiteschen Charakter von R kommt es bei der Umrechnung

$$\begin{aligned} \left(R \frac{f+g}{2}, \frac{f+g}{2} \right) - \left(R \frac{f-g}{2}, \frac{f-g}{2} \right) &= \frac{(Rf, g) + (Rg, f)}{2} \\ &= \frac{(Rf, g) + \overline{(f, Rg)}}{2} = \frac{(Rf, g) + \overline{(Rf, g)}}{2} = \operatorname{Re}(Rf, g) \end{aligned}$$

an (beim dritten Schritt).

66. Vgl. die fünfte Abhandlung, im in Anm. ⁹ genannten Buch (Ann. Phys. [4] Bd. 80 (1926)).

67. Wir gehen absichtlich nicht auf feinere Konvergenzfragen ein: dieselben waren in den ursprünglichen Formen der Matrizen- und Wellentheorie auch nicht genau gefaßt; und wir werden sie später (vgl. z. B. II. 9.) ohnehin erledigen.

68. Letzteres ist nur bei überall sinnvollen, stetigen H ohne weiteres klar, d. h. wenn aus $f_n \rightarrow f$ auch $Hf_n \rightarrow Hf$ folgt. Indessen genügt auch, wie man leicht erkennt, auch die folgende, weniger weitgehende Eigenschaft: aus $f_n \rightarrow f$, $Hf_n \rightarrow f^*$ folgt $Hf = f^*$. (Dies ist die sog. „Abgeschlossenheit“ von H , vgl. die Arbeit des Verfassers in Math. Ann. Bd. 102 [1929]). Diese ist bei den Operatoren der Quantenmechanik, auch bei den unstetigen, immer erfüllt. Genauer: ein nicht abgeschlossener Hermitescher Operator kann durch eine eindeutige Erweiterung seines Definitionsbereiches (Hermitesches und) abgeschlossen gemacht werden (was z. B. bei der Stetigkeit nicht der Fall ist), vgl. II. 9., S. 76.

69. Vgl. z. B. SCHRÖDINGERS Behandlung des Wasserstoffatoms, a. a. O. Anm. ¹⁶.

70. Vgl. a. a. O. Anm. ⁶⁴.

71. Vgl. z. B. COURANT-HILBERT: a. a. O. Anm. ⁸⁰.

72. D. h. $E(l) = (e_{\mu\nu}(l))$, $E(l; \xi, \eta) = \sum_{\mu, \nu=1}^n e_{\mu\nu}(l) \xi_\mu \bar{\eta}_\nu$. Somit ist

$$e_{\mu\nu}(l) = \sum_{\lambda_\varrho \leq l} x_{\varrho\mu} \bar{x}_{\varrho\nu}.$$

73. Zum Begriff des Stieltjesschen Integrals vgl. PERRON: Die Lehre von den Kettenbrüchen, Leipzig 1913, ferner unter besonderer Berücksichtigung der Bedürfnisse der Operatoretheorie CARLEMAN: Equations intégrales singulières, Upsala 1923. Für den an diesen Dingen weniger interessierten Leser genüge seine Definition: Für jede Einteilung $\Lambda_0, \Lambda_1, \dots, \Lambda_k$ des Intervalles a, b

$$a \leq \Lambda_0 < \Lambda_1 < \dots < \Lambda_k \leq b$$

bilde man die Summe

$$\sum_{\tau=1}^k f(\Lambda_\tau) \{g(\Lambda_\tau) - g(\Lambda_{\tau-1})\}.$$

Wenn diese, bei immer feiner werdender Einteilung $\Lambda_0, \Lambda_1, \dots, \Lambda_k$ konvergiert, so wird das Integral $\int_a^b f(x) dg(x)$ für sinnvoll und diesem Limes gleich erklärt. (Für $g(x) = x$ geht dies ins bekannte Riemannsche Integral über.)

In unserem Falle besagt daher die hergeleitete Gleichung, daß $\int_{-\infty}^{+\infty} x dE(x; \xi, \eta)$

existiert (wir bezeichnen die Variable mit λ statt x) und $\sum_{\mu, \nu=1}^n h_{\mu\nu} \xi_\mu \bar{\eta}_\nu$ ist.

74. $\text{Min}(a, b, \dots, e)$ ist die kleinste, $\text{Max}(a, b, \dots, e)$ die größte von den endlich vielen reellen Zahlen a, b, \dots, e .

75. Vgl. a. a. O. Anm. ⁶⁴ sowie im in Anm. ⁷⁸ angeführten Buch von CARLEMAN. Wir werden noch viel mit diesen „Streckenspektren“ zu tun haben, vgl. II. 8.

76. Unter $A(\lambda) \rightarrow B$ ($A(\lambda)$, B Operatoren im \mathfrak{R}_∞ , λ ein Parameter) verstehen wir, daß für alle f von \mathfrak{R}_∞ $A(\lambda)f \rightarrow Bf$. Es ist also eine Abkürzung für Konvergenzaussagen im Hilbertschen Raume.

77. Dies folgt aus der in Anm. ⁷⁸ gegebenen Definition des Stieltjesschen Integrals. Zum Beweise vgl. die dort genannten Darstellungen.

78. Vgl. Math. Ann. Bd. 102 (1929).

79. Dies wurde nur für λ -Folgen bewiesen. Jedoch muß der Limes für alle solchen λ -Folgen ($\lambda \rightarrow \lambda_0$ und $\lambda < \lambda_0$ bzw. $\lambda > \lambda_0$) derselbe sein, denn zwei derartige Folgen lassen sich zu einer ebensolchen zusammenfassen — und da diese einen Limes hat, müssen die beiden Bestandteile auch denselben Limes haben; hieraus folgt, daß die Konvergenz (gegen den gemeinsamen Limes aller Folgen) auch bei kontinuierlicher Variabilität des λ stattfindet.

80. Dies ist die genaue Übertragung der in II. 7. gegebenen Definition von $E(\lambda; \xi, \eta)$.

81. Wie die beim Beweise von Satz 10. ausgeführte Konstruktion zeigt, ist $P_{[\varphi]}f = (f, \varphi) \cdot \varphi$ (wenn $\|\varphi\| = 1$ ist), also $\|P_{[\varphi]}f\| = |(f, \varphi)| = |(\varphi, f)|$.

82. Es ist (Satz 7.)

$$f = \sum_{\varrho} (f, \varphi_{\varrho}) \cdot \varphi_{\varrho} = \sum_{\varrho} P_{[\varphi_{\varrho}]} f,$$

dies folgt auch aus den Schlußbetrachtungen von II. 4.

83. Nach Anm. ⁷⁸ ist

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \lambda^2 d \left(\sum_{\lambda_{\varrho} \leq \lambda} |x_{\varrho}|^2 \right) = \text{limes} \sum_{\tau=1}^k \Lambda_{\tau}^2 - \sum_{\Lambda_{\tau-1} < \lambda_{\varrho} \leq \Lambda_{\tau}} |x_{\varrho}|^2.$$

Wenn durchweg $\Lambda_\tau^2 - \Lambda_{\tau-1}^2 < \varepsilon$ ist (d. h. das $\Lambda_0, \dots, \Lambda_k$ -Netz fein genug), so ändert sich dies um $< \varepsilon \sum_{\varrho=1}^k |x_\varrho|^2 = \varepsilon \|f\|^2$, wenn wir es durch

$$\sum_{\tau=1}^k \sum_{\Lambda_{\tau-1} < \lambda_\varrho \leq \Lambda_\tau} \lambda_\varrho^2 |x_\varrho|^2 = \sum_{\Lambda_0 < \lambda_\varrho \leq \Lambda_k} \lambda_\varrho^2 |x_\varrho|^2$$

ersetzen; und dieses liegt, wenn Λ_0 klein und Λ_k groß genug ist, beliebig nahe bei $\sum_{\tau=1}^{\infty} \lambda_\varrho^2 |x_\varrho|^2$. Diese Summe ist daher der gesuchte Limes, d. h. der Wert des Integrals.

Genau so beweist man die nächste Integralformel.

84. An diesem Punkte zweigt die von uns befolgte, mathematisch richtige, Methode von DIRACS symbolischem Verfahren (vgl. z. B. sein in Anm. ¹ angeführtes Buch) ab. Das letztgenannte Verfahren kommt darauf hinaus, die f mit $(q - \lambda)f(q) \equiv 0$ (wir setzen der Einfachheit halber $l = j = 1$, $q_j = q$) doch als Lösungen anzusehen. Da aber jedes $(f, g) = \int f(q)g(q) dq = 0$ ist, und $f \neq 0$ sein soll, wird $f(q)$ an der Stelle $q = \lambda$ (der einzigen, wo es $\neq 0$ ist!) als unendlich gedacht, und zwar so stark unendlich, daß die $(f, g) \neq 0$ werden. Da für $q \neq \lambda$ $f(q) = 0$ ist, kann $\int f(q)g(q) dq$ nur von $g(\lambda)$ abhängen, und zwar ist es klar, daß das Integral, wegen seiner Additivitätseigenschaft, $\overline{g(\lambda)}$ proportional sein muß. Also $= c\overline{g(\lambda)}$, und es soll $c \neq 0$ sein; indem wir $f(q)$ durch $\frac{1}{c}f(q)$ ersetzen, erreichen wir $c = 1$. Wir haben also eine fiktive Funktion $f(q)$, für die $\int f(q)\overline{g(q)} dq = \overline{g(\lambda)}$ gilt.

Es genügt natürlich den Fall $\lambda = 0$ zu betrachten, $f(q)$ heiße dann $\delta(q)$, es ist durch

$$A. \quad q \delta(q) \equiv 0, \quad \int \delta(q) f(q) dq = f(0)$$

definiert. Für beliebiges λ ist dann $\delta(q - \lambda)$ die Lösung. — Obwohl eine Funktion δ mit der Eigenschaft **A.** nicht existiert, gibt es Funktionenfolgen, die gegen ein solches Verhalten konvergieren (natürlich existiert die Grenzfunktion nicht), z. B.:

$$f_\varepsilon(q) = \begin{cases} \frac{1}{2\varepsilon}, & \text{für } |x| < \varepsilon \\ 0, & \text{für } |x| \geq \varepsilon \end{cases} \quad \text{für } \varepsilon \rightarrow +0,$$

oder

$$f_\varepsilon(q) = \sqrt{\frac{a}{\pi}} e^{-a^2} \quad \text{für } a \rightarrow +\infty.$$

(Vgl. auch I. 3., insbesondere Anm. ³².)

85. Die exakte Ausführung dieses (hier nur als heuristischer Ansatz zu wertenden) Gedankens findet sich in Abhandlungen von HELLINGER [J. f. Math. Bd. 136 (1909)] und WEYL [Math. Ann. Bd. 68 (1910)].

86. Natürlich kann nur der Erfolg bei der physikalischen Anwendung diesen Standpunkt, bzw. sein Geltendmachen in der Quantenmechanik, rechtfertigen.

87. PLANCHEREL: Circ. Math. di Pal. Bd. 30 (1910); TITCHMARSH: London Math. Soc. Proc. Bd. 22 (1924).

88. D. h. $E'(\lambda)$ gehört nicht zu $A' = \frac{h}{2\pi i} \frac{\partial}{\partial q}$ selbst, sondern zu einem Operator, dessen Definitionsbereich denjenigen von A' umfaßt, und der im letzteren mit A' übereinstimmt. Vgl. hierzu die Ausführungen in II. 9.

89. Es verschwinden alle Fourierkoeffizienten, also auch die Funktion selbst, vgl. z. B. COURANT-HILBERT (a. a. O. Anm. ³⁰).

90. Es ist nämlich zwar $M^{-1}Mf(q) = f(q)$ (es genügt $f(q)$ für $q < 0$ gleich 0 zu definieren, und die früheren Sätze anzuwenden), aber nicht immer $MM^{-1}F(p) = F(p)$ — weil im allgemeinen $\|M^{-1}F\| < \|F\|$, also $\|MM^{-1}F\| < \|F\|$ ist. Somit ist $M^{-1}M = 1$, $MM^{-1} \neq 1$, d. h. M^{-1} ist gar nicht die wirkliche Reziproke von M . (Es kann auch keine andere geben, denn gäbe es eine, so müßte diese wegen $M^{-1}M = 1$ doch unserem M^{-1} gleich sein.) Infolgedessen kann für $E'(\lambda) = ME(\lambda)M^{-1}$ z. B. der Schluß $E'^2(\lambda) = E'(\lambda)$ noch gemacht werden (da geht nur $M^{-1}M$ ein), es ist aber $E'(\lambda) \rightarrow MM^{-1} \neq 1$ (für $\lambda \rightarrow +\infty$).

91. Eigentlich muß das unsymbolisch, mit Hilfe der strengen Gleichung

$$(Af, g) = \int \lambda d(E(\lambda)f, g)$$

bewiesen werden. Dann verläuft die Rechnung so:

$$\begin{aligned} (AFf, g) &= \int \lambda d(E(\lambda)Ff, g) = \int \lambda d(FE(\lambda)f, g) \\ &= \int \lambda d(E(\lambda)f, Fg) = (Af, Fg) \equiv (FAf, g). \end{aligned}$$

Hieraus folgt $AF = FA$.

92. Dies folgt aus der für Stieltjessche Integrale allgemein gültigen Gleichung

$$\int f(\lambda) d\left(\int g(\lambda') d h(\lambda')\right) = \int f(\lambda) g(\lambda) d h(\lambda).$$

Diese Gleichung leuchtet ohne weiteres auf Grund des Reziprozitätsverhältnisses zwischen d und \int^{λ} ein, einen strengen Beweis gab der Verf. an: *Annals of Mathematics* Bd. 32 (1931).

93. D. h.

$$(Bf, g) = \int_{-\infty}^{\infty} r(\lambda) d(E(\lambda)f, g), \quad (Cf, g) = \int_{-\infty}^{\infty} s(\lambda) d(E(\lambda)f, g).$$

94. Die genaue Begründung dieses Funktionsbegriffes wurde vom Verf. in *Annals of Math.* Bd. 32 (1931) gegeben. Durch Grenzübergänge von Polynomen her definierte als erster F. RIESZ allgemeinere Operatorfunktionen.

95. Die Theorie der unbeschränkten Hermiteschen Operatoren, auf die im folgenden neben der Hilbertschen Theorie der beschränkten Operatoren hauptsächlich Bezug genommen werden wird, wurde vom Verf. a. a. O. Anm. 78 aufgestellt. Unabhängig gelangte auch M. STONE (*Proc. Nat. Ac.* 1929 und 1930) zu ähnlichen Resultaten.

96. *Math. Ann.* Bd. 69 (1911).

97. Auch die auf $-\infty < q < +\infty$ analytischen $f(q)$ (mit endlichem $\int_{-\infty}^{\infty} |f(q)|^2 dq$, $\int_{-\infty}^{\infty} |f'(q)|^2 dq$, ...) liegen im \mathfrak{R}_{∞} überall dicht. Nach II. 3., \mathfrak{B} ., liegen die Linearaggregate der $f_{a,b}(q) = \begin{cases} 1, & \text{für } a < q < b \\ 0, & \text{sonst} \end{cases}$ überall dicht, also genügt es, diese durch die obigen $f(q)$ beliebig gut zu approximieren. In der Tat ist z. B.

$$f_{a,b}^{(\varepsilon)}(q) = \frac{1}{2} - \frac{1}{2} \operatorname{Tg} \operatorname{hyp} \frac{(x-a)(x-b)}{\varepsilon} = \frac{1}{e^{\frac{2(x-a)(x-b)}{\varepsilon}} + 1}$$

von der gewünschten Art, und konvergiert für $\varepsilon \rightarrow +0$ gegen $f_{a,b}(q)$.

98. Es genügt wieder die $f_{a,b}(q)$, $0 \leq a < b \leq 1$ mit Funktionen aus \mathfrak{A}^0 zu approximieren. Als solche sind z. B. die

$$f_{a,b}^{(\varepsilon)}(q) = \frac{1}{2} - \frac{1}{2} \operatorname{Tg} \operatorname{hyp} \left(\frac{1}{\varepsilon} \frac{(x-a-\varepsilon)(x-b+\varepsilon)}{x(1-x)} \right)$$

mit $\varepsilon \rightarrow +0$ verwendbar.

99. Da wir die Funktion $f(\lambda)$ durch Polynome approximiert denken können, genügt es, Polynome zu betrachten — also deren Bausteine, die Potenzen: $f(\lambda) = \lambda^s$ ($s = 0, 1, 2, \dots$). Da eine unitäre Transformation hier nichts ausmacht, dürfen wir A als Diagonalmatrix annehmen; da die Diagonalelemente die Eigenwerte sind, sind sie $\lambda_1, \dots, \lambda_n$. Es ist also nur zu zeigen, daß auch A^s diagonal ist, und die Diagonalelemente $\lambda_1^s, \dots, \lambda_n^s$ hat — aber dies ist evident.

100. Daß diese Eigenschaften für den Hermiteschen bzw. unitären Charakter kennzeichnend sind, brauchen wir wieder nur an den Diagonalmatrizen zu verifizieren. Zur Diagonalmatrix A mit den Diagonalelementen $\lambda_1, \dots, \lambda_n$ ist die Diagonalmatrix A^* mit den Diagonalelementen $\bar{\lambda}_1, \dots, \bar{\lambda}_n$ konjugiert transponiert; daher besagt $A = A^* \begin{pmatrix} \lambda_1 & & \\ & \ddots & \\ & & \lambda_n \end{pmatrix}$, d. h. $\lambda_1, \dots, \lambda_n$ reell; und $AA^* = A^*A = I$ besagt $\lambda_1 \bar{\lambda}_1 = 1, \dots, \lambda_n \bar{\lambda}_n = 1$, d. h. $|\lambda_1| = \dots = |\lambda_n| = 1$.

101. Zum Beweis dieser Tatsachen vgl. die Arbeit des Verf. a. a. O. Anm. 78, ferner A. WINTNER: Math. Z. Bd. 30 (1929). — Die absolute Konvergenz aller Integrale

$\int_0^1 f(\sigma) d(E(\sigma)f, g)$ mit beschränktem $f(\sigma)$ erkennt man so: Es genügt, $\operatorname{Re}(E(\sigma)f, g)$ zu betrachten, da das Ersetzen von f, g durch if, g dies in $\operatorname{Im}(E(\sigma)f, g)$ verwandelt. Wegen

$$\operatorname{Re}(E(\sigma)f, g) = \left(E(\sigma) \frac{f+g}{2}, \frac{f+g}{2} \right) - \left(E(\sigma) \frac{f-g}{2}, \frac{f-g}{2} \right)$$

sind nur die $(E(\sigma)f, f)$ zu untersuchen. In $\int_0^1 f(\sigma) d(E(\sigma)f, f)$ ist aber der Integrand beschränkt, die σ -Funktion hinter dem d -Zeichen monoton: also die Behauptung klar.

102. Wir wenden nämlich die Stieltjesschen Integrale auf Elemente des \mathfrak{R}_∞ an, anstatt auf Zahlen. Alle unsere Beziehungen sind so zu verstehen, daß sie gelten, wenn man ein festes g aus \mathfrak{R}_∞ wählt, und für jedes in ihnen vorkommende Element von \mathfrak{R}_∞ sein inneres Produkt mit g einsetzt — und zwar gilt dies für alle g . — Im Vergleich zu den Operatoren-Stieltjes-Integralen in II. 7. ist dies als ein halb-symbolisches Verfahren zu bezeichnen: statt des einen g von \mathfrak{R}_∞ waren dort zwei f, g aus \mathfrak{R}_∞ nach Belieben zu wählen, und statt (\dots, g) war (\dots, f, g) (bei (\dots) steht dann der Operator) zu bilden.

103. Hierbei ist es stillschweigende Voraussetzung, daß es einen solchen Operator, für jede gegebene Zerlegung der Einheit $F(\lambda)$, wirklich gibt. D. h. daß bei endlichem $\int_{-\infty}^{\infty} \lambda^2 d\|F(\lambda)f\|^2$ ein f^* gefunden werden kann, so daß für alle g $(f^*, g) = \int_{-\infty}^{\infty} \lambda d(F(\lambda)f, g)$ ist; und daß diese f überall dicht liegen. (Der Hermitesche

Charakter des so definierten Operators folgt dann aus \bar{S}_g : man vertausche in der Schlußgleichung f, g und nehme die Komplex-Konjugierte.) — Diese beiden Behauptungen werden a. a. O. Anm. 78 bewiesen.

104. Damit das Eigenwertproblem von A stets lösbar sei, müßte hieraus die Unitarität von U , d. h. $\mathfrak{E} = \mathfrak{F} = \mathfrak{R}_n$ bzw. \mathfrak{R}_∞ folgen. Im \mathfrak{R}_∞ ist dies, wie wir es aus der Existenz nicht-maximaler A geschlossen, nicht der Fall. In \mathfrak{R}_n dagegen muß es zutreffen, was man auch direkt einsehen kann: Da jede Linearmanigfaltigkeit des \mathfrak{R}_n abgeschlossen ist, ist es auch die der $\varphi - U\varphi$, da sie überall dicht ist, ist sie $= \mathfrak{R}_n$. \mathfrak{E} , die Menge der φ , hat nicht weniger Dimensionen als ihr lineares Bild, die Menge der $\varphi - U\varphi$ — also die maximale Dimensionszahl, n . Dieselbe muß auch \mathfrak{F}

als lineares eindeutiges Bild von \mathfrak{E} haben. Bei endlichem n folgt aber hieraus $\mathfrak{E} = \mathfrak{F} = \mathfrak{H}_n$.

105. Immerhin ist, wie der Verfasser a. a. O. Anm. ⁷⁸ zeigte, der folgende Operator maximal, aber nicht hypermaximal: Sei \mathfrak{H}_∞ der Raum aller in $0 \leq q < +\infty$ definierten $f(q)$ mit endlichem $\int_0^\infty |f(q)|^2 dq$; R der Operator $i \frac{d}{dq}$, der etwa für alle stetig differenzierbaren $f(q)$ mit endlichem $\int_{-\infty}^\infty |f'(q)|^2 dq$ und $f(0) = 0$ definiert, und dann abgeschlossen gemacht wird. Er ist gleich $-\frac{2\pi}{h} A'$, wenn wir das A' in II. 8. für Intervall $0, \infty$ nehmen — also Hermitesch. Dieses R ist nun maximal, aber nicht hypermaximal, was man durch effektives Berechnen von $\mathfrak{E}, \mathfrak{F}$ verifizieren kann.

Dies ist darum bemerkenswert, weil $A' = -\frac{h}{2\pi} R$ physikalisch als Impulsoperator interpretiert zu werden pflegt, und zwar im durch die Wand $q = 0$ einseitig begrenzten Halbraume.

106. Dieser Begriff stammt von ERHARD SCHMIDT, vgl. a. a. O. Anm. ⁷⁸.

107. Da (vgl. II. 5.) $R \cdot 1, 1 \cdot R$ dann und nur dann Sinn haben, wenn R Sinn hat, gilt bei $a \neq 0$ dasselbe für $R \cdot a1, a1 \cdot R$. So werden diese beiden Produkte gleich, d. h. R und $a1$ sind vertauschbar. Somit gilt die Vertauschbarkeit von R und $a1$ mit einer einzigen Ausnahme: $a = 0$, R nicht überall sinnvoll. Dies ist recht unschön und legt die Änderung der Vertauschbarkeits-Definition nahe.

108. Zu $a \cdot 1$ gehört diese Zerlegung der Einheit: $F(\mu) = \begin{cases} 1, & \text{für } \mu \geq a \\ 0, & \text{für } \mu < a \end{cases}$. Man verifiziert dies mühelos.

109. Für zwei Hermitesche Operatoren A, B , die einer besonderen Klasse angehören (der sog. vollstetigen, vgl. a. a. O. Anm. ⁷⁰) bewies TOEPLITZ (vgl. z. B. a. a. O. Anm. ⁸⁸) einen Satz, aus dem der obige folgt. (Nämlich die Existenz eines vollständigen normierten Orthogonalsystems aus gemeinsamen Eigenfunktionen von A, B .) Den allgemeinen Satz für beliebige A, B , bzw. A, B, C, \dots , bewies der Verfasser a. a. O. Anm. ⁸⁴.

110. Die $\kappa_1, \kappa_2, \kappa_3, \dots$ sind beschränkt zu wählen, z. B. $\kappa_m = \frac{1}{m}$, damit R stetig sei. In der Tat folgt aus der Stetigkeit von R , d. h. $\|Rf\| \leq C \cdot \|f\|$ sofort $\|R\psi_m\| = \|\kappa_m \psi_m\| = |\kappa_m| \|\psi_m\| \leq C \cdot \|\psi_m\| = C, |\kappa_m| \leq C$; und aus $|\kappa_m| \leq C (m = 1, 2, \dots)$ umgekehrt

$$\|Rf\|^2 = \|R(\sum_1^\infty \kappa_m \psi_m)\|^2 = \|\sum_1^\infty \kappa_m \kappa_m \psi_m\|^2 = \sum_1^\infty |\kappa_m|^2 |\kappa_m|^2,$$

$$\|f\|^2 = \|\sum_1^\infty \kappa_m \psi_m\|^2 = \sum_1^\infty |\kappa_m|^2,$$

also $\|Rf\|^2 \leq C^2 \cdot \|f\|^2, \|Rf\| \leq C \cdot \|f\|$, d. h. die Stetigkeit von R .

111. Auf einer q_1, q_2 -Menge vom Lebesgueschen Maße 0 wären Ausnahmen zulässig!

112. Vgl. z. B. a. a. O. Anm. ⁴⁵.

113. $\{a_{\mu\nu}\}$ vertritt die Transformation (d. i. den Operator) $\eta_\mu = \sum_1^n a_{\mu\nu} \xi_\nu$ ($\mu = 1, \dots, n$, vgl. die Ausführungen in II. 7.), transformieren wir nach

$$\xi_\mu = \sum_1^n x_{\nu\mu} \eta_\nu \quad \eta_\mu = \sum_1^n x_{\nu\mu} \eta_\nu \quad (\mu = 1, \dots, n),$$

so wird hieraus $\eta_\mu = \sum_1^n \alpha_{\mu\nu} \xi_\nu$ ($\mu = 1, \dots, n$) mit

$$\alpha_{\mu\nu} = \sum_1^n e_{\rho\sigma} \bar{x}_{\mu\rho} x_{\nu\sigma} \quad (\mu, \nu = 1, \dots, n).$$

$\{\alpha_{\mu\nu}\}$ ist die transformierte Matrix. Offenbar ist

$$\sum_1^n \mu \alpha_{\mu\mu} = \sum_1^n (\mu, \lambda, \sigma) a_{\rho\sigma} \bar{x}_{\mu\rho} x_{\mu\sigma} = \sum_1^n e_{\rho\sigma} a_{\rho\sigma} \left(\sum_1^n \bar{x}_{\mu\rho} x_{\mu\sigma} \right) = \sum_1^n e_{\rho\sigma} a_{\rho\sigma},$$

d. h. die Spur invariant.

114. Genau lautet die Behauptung so: Wenn A hypermaximal und definit ist, so existiert ein und nur ein ebensolcher Operator A' mit $A'^2 = A$. Wir beweisen die Existenz.

Sei $A = \int_{-\infty}^{\infty} \lambda dE(\lambda)$ die Eigenwertdarstellung von A . Da A definit ist, ist $E(\lambda)$ für $\lambda < 0$ konstant (also nach \bar{S}_1 gleich 0), denn sonst wäre für geeignete $\lambda_1 < \lambda_2 < 0$ $E(\lambda_2) - E(\lambda_1) \neq 0$, also ein $f \neq 0$ mit $(E(\lambda_2) - E(\lambda_1))f = f$ wählbar — hieraus folgte aber, wie wir schon mehrfach schlossen, $E(\lambda)f = \begin{cases} f & \text{für } \lambda \geq \lambda_2 \\ 0 & \text{für } \lambda \leq \lambda_1 \end{cases}$, also

$$\begin{aligned} (A f, f) &= \int_{-\infty}^{\infty} \lambda d(E(\lambda) f, f) = \int_{\lambda_1}^{\lambda_2} \lambda d(E(\lambda) f, f) \leq \int_{\lambda_1}^{\lambda_2} \lambda_2 d(E(\lambda) f, f) \\ &= \lambda_2 ((E(\lambda_2) - E(\lambda_1)) f, f) = \lambda_2 (f, f) < 0. \end{aligned}$$

Infolgedessen ist

$$A = \int_{-\infty}^{\infty} \lambda dE(\lambda) = \int_0^{\infty} \lambda dE(\lambda) = \int_0^{\infty} \mu^2 dE(\mu^2),$$

und $A' = \int_1^{\infty} \mu dE(\mu^2)$ leistet das Gewünschte.

Man beachte: wir haben aus der Definitivität $E(\lambda) = 0$ für $\lambda < 0$ geschlossen, da hieraus offenbar die Definitivität folgt, ist dies, d. h. die Tatsache, daß das ganze Spektrum ≥ 0 ist, für die Definitivität kennzeichnend.

115. Vgl. a. a. O. Anm. ⁶⁴. Ein direkter Beweis gelingt so: Sei $\lambda_0 < \lambda_1 < \lambda_2 < \dots < \lambda_n$, alle $\geq \varepsilon$ oder alle $\leq -\varepsilon$, $E(\lambda_0) \neq E(\lambda_1) \neq E(\lambda_2) \neq \dots \neq E(\lambda_n)$. Dann ist $E(\lambda_\nu) - E(\lambda_{\nu-1}) \neq 0$, also $\varphi_\nu \neq 0$ mit $(E(\lambda_\nu) - E(\lambda_{\nu-1}))\varphi_\nu = \varphi_\nu$ wählbar, woraus $E(\lambda)\varphi_\nu = \begin{cases} \varphi_\nu & \text{für } \lambda \geq \lambda_\nu \\ 0 & \text{für } \lambda \leq \lambda_{\nu-1} \end{cases}$ folgt — wir können auch $\|\varphi_\nu\| = 1$ erreichen. Aus dem Obigen folgt $(\varphi_\mu, \varphi_\nu) = 0$ für $\mu \neq \nu$. Die $\varphi_1, \dots, \varphi_n$ bilden somit ein normiertes Orthogonalsystem, wir können es zu einem vollständigen erweitern: $\varphi_1, \dots, \varphi_n, \varphi_{n+1}, \dots$.

Es ist ($\nu = 1, \dots, n$)

$$\begin{aligned} \|A \varphi_\nu\|^2 &= \int_{-\infty}^{\infty} \lambda^2 d \|E(\lambda) \varphi_\nu\|^2 = \int_{\lambda_{\nu-1}}^{\lambda_\nu} \lambda^2 d \|E(\lambda) \varphi_\nu\|^2 \geq \int_{\lambda_{\nu-1}}^{\lambda_\nu} \varepsilon^2 d \|E(\lambda) \varphi_\nu\|^2 \\ &= \varepsilon^2 (\|E(\lambda_\nu) \varphi_\nu\|^2 - \|E(\lambda_{\nu-1}) \varphi_\nu\|^2) = \varepsilon^2 \|\varphi_\nu\|^2 = \varepsilon^2, \end{aligned}$$

also

$$\sum_1^n \mu \|A \varphi_\mu\|^2 \begin{cases} \geq \sum_1^n \mu \|A \varphi_\mu\|^2 \geq n \varepsilon^2 \\ = \Sigma(A) = C^2, \end{cases}$$

d. h. $n \leq \frac{C^2}{\varepsilon^2}$. D. h. für $|\lambda| \geq \varepsilon$ kann $E(\lambda)$ überhaupt nur $\leq 2 \cdot \frac{C^2}{\varepsilon^2}$ viele verschiedene Werte annehmen, es ändert sich also nur in endlich vielen Sprüngen, zwischen

denen Konstanz-Intervalle liegen. D. h.: bei $|\lambda| \geq \varepsilon$ liegt nur ein Punktspektrum. Da dies für alle $\varepsilon > 0$ gilt, ist überhaupt nur ein reines Punktspektrum vorhanden.

116. Außer den im Laufe der Erörterungen angeführten Originalabhandlungen kommt hierfür in erster Linie der Enzyklopädieartikel von HELLINGER und TOEPLITZ in Frage (vgl. Anm. 33).

117. Nach geometrischer Analogie soll im \mathfrak{R}_∞ die Kugel mit dem Mittelpunkt φ_0 und vom Radius r die Menge der Punkte mit $\|f - \varphi_0\| \leq r$ sein, ihr Inneres die Menge der $\|f - \varphi_0\| < r$, ihre Oberfläche die Menge der $\|f - \varphi_0\| = r$. Für die Einheitskugel ist $\varphi_0 = 0$, $r = 1$.

118. Die ersten statistischen Aussagen über das Verhalten eines Systems im Zustande φ stammen von M. BORN, eingehendere von DIRAC und von JORDAN, vgl. die Zitate in Anm. 8 und 2.

119. Über diese Zuordnung, die jeder physikalischen Größe einen Hermiteschen Operator entsprechen läßt, werden wir in IV. 1. noch ausführlicher sprechen. Vorläufig wissen wir nur auf Grund von I. 2., daß den Koordinaten die Opera-

toren q_1, \dots, q_k entsprechen, den Impulsen die Operatoren $\frac{h}{2\pi i} \frac{\partial}{\partial q_1}, \dots, \frac{h}{2\pi i} \frac{\partial}{\partial q_k}$ und der Energie der „Energie-Operator“ H .

120. Eine gute Veranschaulichung dieser Verhältnisse liefert die kinetische Gastheorie.

Ein Mol (16 g) Sauerstoff enthält $6 \cdot 10^{23}$ O_2 -Moleküle, ist also, wenn man beachtet, daß jedes O_2 -Molekül aus 2 O-Atomen besteht (deren innere Struktur wir vernachlässigen wollen, so daß sie als Massenpunkte mit je 3 Freiheitsgraden zu behandeln sind), ein mechanisches System von $2 \cdot 3 \cdot 6 \cdot 10^{23} = 36 \cdot 10^{23} = k$ Freiheitsgraden. Mit Hilfe von $2k$ Bestimmungsstücken ließe sich sein Verhalten also kausal erfassen, die Gastheorie verwendet aber nur zwei: Druck und Temperatur, die gewisse, komplizierte, Funktionen dieser $2k$ Bestimmungsstücke sind.

Infolgedessen kann sie nur statistische (Wahrscheinlichkeits-) Aussagen machen. Daß diese in vielen Fällen beinahe kausal, d. h. die Wahrscheinlichkeiten nahe 0 oder nahe 1 sind, ändert nichts am prinzipiellen Charakter der Dinge.

121. Wenn $F_t(\lambda)$ eine t -abhängige Funktion ist, $\frac{\partial}{\partial t} F_t(\lambda) = G_t(\lambda)$, und H ein Hermitescher Operator, so ist $\frac{\partial}{\partial t} F_t(H) = G_t(H)$, weil $\frac{\partial}{\partial t}$ durch Subtrahieren, Dividieren und Grenzübergang entsteht. Für $F_t(\lambda) = e^{-\frac{2\pi i}{h}(t-t_0)\lambda}$ ergibt dies:

$$\frac{\partial}{\partial t} \left(e^{-\frac{2\pi i}{h}(t-t_0)H} \right) = -\frac{2\pi i}{h} H \cdot e^{-\frac{2\pi i}{h}(t-t_0)H},$$

nach Anwenden auf φ also die gewünschte Differentialgleichung.

Wegen $|F_t(\lambda)| = 1$, $F_t(\lambda) \overline{F_t(\lambda)} = 1$ ist $F_t(H) \cdot \{F_t(H)\}^* = 1$, d. h. unser $F_t(H) = e^{-\frac{2\pi i}{h}(t-t_0)H}$ unitär. Da es für $t = t_0$ offenbar gleich 1 ist, ist auch $\varphi_{t_0} = \varphi$ erfüllt.

122. Z. Physik Bd. 37 (1926). Die ganze weitere Entwicklung (vgl. Anm. 2) beruht auf dieser Auffassung.

123. Physic. Rev. Bd. 26 (1925). Vgl. auch die zusammenfassende Darstellung von W. BOTHE im Handbuch der Physik Bd. 23 (Quanten), Berlin 1926, Kap. 3, insbesondere § 73.

124. Auf diesen Grundgedanken war eine statistische Theorie der Elementarerscheinungen aufgebaut, die BOHR, KRAMERS und SLATER aufstellten. Vgl.

Z. Physik Bd. 24 (1924), sowie a. a. O. Anm. ¹²³. Das Compton-Simonssche Experiment kann als Widerlegung dieser Auffassung angesehen werden.

125. Daß diese Sprünge mit der „Quantensprung“-Vorstellung der älteren, Bohrschen, Quantentheorie verwandt sind, erkannte JORDAN: Z. Physik Bd. 40 (1924).

126. Bei alledem ist Voraussetzung, daß die Struktur des beobachteten Systems und des Meßapparates — d. h. alle wirkenden Kraftfelder usw. — genau bekannt sind, und nur der Zustand, d. h. die augenblicklichen Werte der Koordinaten gesucht werden. Wenn diese (idealisierende) Annahme nicht zutrifft, so liegen natürlich weitere Unsicherheitsquellen vor.

Auch in unserer Beschreibungsweise der ungenauen Messung lag eine gewisse Idealisierung: wir nahmen an, daß sie daraus besteht, daß man mit absoluter Bestimmtheit entscheidet, ob ein Wert im Intervalle $I = \{\lambda', \lambda''\}$, $\lambda' < \lambda''$, liegt, oder nicht. Tatsächlich sind die Ränder λ' , λ'' verwaschen, d. h. die Entscheidung findet dort nur mit einer gewissen Wahrscheinlichkeit statt. Jedoch scheint unsere Beschreibungsweise, wenigstens vorläufig, die mathematisch brauchbarste zu sein.

127. Man kontrolliere die letztere Behauptung mit Hilfe von \mathcal{W} ! Die Zerlegungen der Einheit, die zu R bzw. zu S gehören, bilde man nach II. 8.

128. Dies Gesetz, wonach der Operator von $\mathfrak{M} + \mathfrak{S}$ die Summe der Operatoren von \mathfrak{M} und von \mathfrak{S} ist, haben wir für gleichzeitig meßbare \mathfrak{M} , \mathfrak{S} bewiesen. Es gilt aber sogar für beliebige \mathfrak{M} , \mathfrak{S} , läßt sich jedoch dann nicht beweisen — es ist vielmehr eines der Grundpostulate der Theorie. Vgl. das am Ende von IV. 1. und in IV. 2. zu Sagende.

129. Die ausführliche weitere Diskussion der „gleichzeitigen Meßbarkeit für die φ von \mathfrak{M} “, für nicht absolut genau meßbare \mathfrak{M} , \mathfrak{S} (Streckenspektra!), usw., bleibe dem Leser überlassen. Sie ist ganz analog zu den Betrachtungen von III. 3. durchzuführen.

130. Die Operatorenrechnung verläuft so:

$$\begin{aligned} \varepsilon^2 &= ((R - \varrho \cdot 1)^2 \varphi, \varphi) = (R^2 \varphi, \varphi) - 2\varrho \cdot (R\varphi, \varphi) + \varrho^2 \\ &= \|\! \| R\varphi \|\! \|^2 - 2 \cdot (R\varphi, \varphi)^2 + (R\varphi, \varphi)^2 = \|\! \| R\varphi \|\! \|^2 - (R\varphi, \varphi)^2, \end{aligned}$$

und entsprechend für η^2 .

131. Z. Physik Bd. 43 (1927). Diese Betrachtungen wurden von BOHR vertieft, Naturwiss. Bd. 16 (1928). Die im folgenden durchzuführende analytische Behandlung wurde von KENNARD in Angriff genommen, Z. Physik Bd. 44 (1926) und von ROBERTSON in der gegenwärtigen Form angegeben.

132. Die prinzipielle Bedeutung dieses Umstandes wurde von BOHR, a. a. O. Anm. ¹⁸¹, hervorgehoben. Übrigens ist die weiter unten zu befolgende Beschreibungsweise an einem Punkte nicht ganz klassisch: die Existenz von Lichtquanten wird benutzt werden, d. h. die Tatsache, daß Licht von der Frequenz ν niemals in kleineren Quantitäten als solchen mit der Energie $h\nu$ vorkommt.

133. Die nachfolgende Diskussion nach HEISENBERG und BOHR vgl. a. a. O. Anm. ¹⁸¹.

134. Vgl. z. B. EINSTEINS Originalabhandlung, Ann. Physik Bd. 14 (1905); oder irgendein modernes Lehrbuch.

135. Zur Theorie des Mikroskopes vgl. z. B. im Handbuch der Physik, Berlin 1927, Bd. 18, Kap. 2. G. Bei sehr genauen Messungen ist ε , also auch λ sehr klein, d. h. γ -Strahlen oder noch extremer kurzwelliges Licht zu verwenden. Eine normale Linse versagt unter solchen Umständen, nur eine solche wäre verwendbar, deren Moleküle von diesen γ -Strahlen weder zertrümmert noch aus ihren Standorten herausgerissen werden. Da die Existenz solcher Moleküle, bzw. Partikel, kein bekanntes Naturgesetz verletzt, ist ihre Verwendung für die Zwecke des Gedankenexperiments zulässig.

136. $\frac{m c \Delta v}{\nu}$ groß gegen $\frac{h \Delta v}{c}$ bedeutet, daß ν klein gegen $\frac{m c^2}{h}$ ist, d. h. $\bar{E} = h \nu$ klein gegen $m c^2$. D. h. die Energie des Lichtquants L klein gegen die relativistische Ruhmasse von T — eine Annahme, die bei nicht-relativistischer Rechnung ohnehin unvermeidlich ist.

137. Sei z. B. $F(x)$ ein sich von a bis τ erstreckender begrenzt-monochromatischer Wellenzug von der Frequenz ν_0 :

$$F(x) = \begin{cases} \alpha \sin 2\pi \nu_0 x, & \text{für } 0 \leq x \leq \tau, \\ 0, & \text{sonst.} \end{cases}$$

(Wegen des stetigen Anschlusses muß $\sin 2\pi \nu_0 \tau = 0$ sein, d. h. $\nu_0 = \frac{n}{2\tau}$, $n = 1, 2, 3, \dots$) Dann ist auf Grund der bekannten Umkehrformeln des Fourierintegrals (vgl. a. a. O. Anm. 87) $a_\nu^2 = b_\nu^2 + c_\nu^2$ mit

$$\begin{aligned} \left. \begin{matrix} b_\nu \\ c_\nu \end{matrix} \right\} &= 2 \int_{-\infty}^{+\infty} F(x) \begin{matrix} \cos \\ \sin \end{matrix} 2\pi \nu x \cdot dx = 2a \int_0^\tau \sin 2\pi \nu_0 x \cdot \begin{matrix} \cos \\ \sin \end{matrix} 2\pi \nu x \cdot dx \\ &= \pm a \int_0^\tau \left(\frac{\sin \pi(\nu + \nu_0)x}{\cos \pi(\nu + \nu_0)x} - \frac{\sin \pi(\nu - \nu_0)x}{\cos \pi(\nu - \nu_0)x} \right) \cdot dx \\ &= -a \left[\frac{\cos \pi(\nu + \nu_0)x}{\sin \pi(\nu + \nu_0)} - \frac{\cos \pi(\nu - \nu_0)x}{\sin \pi(\nu - \nu_0)} \right]_0^\tau \\ &= \begin{cases} -a \left[\frac{(-1)^n \cos \pi \nu \tau - 1}{\pi(\nu + \nu_0)} - \frac{(-1)^n \cos \pi \nu \tau - 1}{\pi(\nu - \nu_0)} \right] = -\frac{2a \nu_0 (1 - (-1)^n \cos \pi \nu \tau)}{\pi(\nu^2 - \nu_0^2)}, \\ -a \left[\frac{(-1)^n \sin \pi \nu \tau}{\pi(\nu + \nu_0)} - \frac{(-1)^n \sin \pi \nu \tau}{\pi(\nu - \nu_0)} \right] = \frac{2a \nu_0 (-1)^n \sin \pi \nu \tau}{\pi(\nu^2 - \nu_0^2)}, \end{cases} \end{aligned}$$

also

$$a_\nu = \frac{2a \nu_0 \sqrt{2 - 2(-1)^n \cos \pi \nu \tau}}{\pi(\nu^2 - \nu_0^2)} = \frac{4a \nu_0 \left| \frac{\sin \frac{1}{2} \pi \nu \tau}{\cos \frac{1}{2} \pi \nu \tau} \right|}{\pi(\nu^2 - \nu_0^2)} = \frac{4a \nu_0 |\sin \pi(\nu - \nu_0) \tau|}{\pi(\nu^2 - \nu_0^2)}.$$

Wie man sieht, ist die Umgebung der Frequenz $\nu = \nu_0$ am stärksten vertreten, und der größte Teil der Energie des Wellenzuges entfällt auf diejenigen Frequenzbereiche, in denen $\pi(\nu - \nu_0)\tau$ mäßige Werte hat. Also hat die Streuung von $\nu - \nu_0$ (oder, was dasselbe ist, die von ν) die Größenordnung von $\frac{1}{\tau}$. Dasselbe ergibt

$$\text{die exakte Berechnung des maßgebenden Ausdrucks } \frac{\int_0^\infty a_\nu^2 (\nu - \nu_0)^2 d\nu}{\int_0^\infty a_\nu^2 d\nu}.$$

138. Proc. Roy. Soc., Lond. Bd. 114 (1927). Vgl. auch die Darstellung bei WEYL: Gruppentheorie und Quantenmechanik, 2. Aufl., S. 91 u. ff. Leipzig 1931.

139. Der interessierte Leser findet Darstellungen der elektromagnetischen Theorie des Lichtes in jedem Lehrbuche der Elektrodynamik, z. B. ABRAHAM-BECKER: Theorie der Elektrizität, Berlin 1930. Vgl. auch für die folgenden, in den Rahmen der Maxwell'schen Theorie gehörigen, Ausführungen.

140. Vgl. R. COURANT und D. HILBERT: Methoden der mathematischen Physik I. S. 358—363. Berlin 1924.

141. Es gilt nämlich

$$\iiint_H [\mathbf{a}, \text{rot } \mathbf{b}] dx dy dz = \iiint_H [\text{rot } \mathbf{a}, \mathbf{b}] dx dy dz$$

wegen

$$[\mathbf{a} \operatorname{rot} \mathbf{b}] - [\operatorname{rot} \mathbf{a}, \mathbf{b}] = \operatorname{grad}(\mathbf{a} \times \mathbf{b})$$

($\mathbf{a} \times \mathbf{b}$ ist das sog. äußere, vektorielle, Produkt von \mathbf{a} , \mathbf{b}), falls die Normalkomponente von $\mathbf{a} \times \mathbf{b}$ am Rande von H verschwindet. Da $\mathbf{a} \times \mathbf{b}$ zu \mathbf{a} und zu \mathbf{b} senkrecht ist, ist dies bestimmt der Fall, der \mathbf{a} oder \mathbf{b} zu H senkrecht ist. Wir haben $\mathbf{a} = \operatorname{rot} \mathfrak{A}_n$, $\mathbf{b} = \mathfrak{A}_n$, so daß das erstere bestimmt eintritt.

142. Vgl. z. B. a. a. O. Anm. 138.

143. Da P_x^z mit Q_y^z, Q_x^y vertauschbar ist, nur mit Q_x^x nicht, haben wir, um die folgende Umformung zu rechtfertigen, die folgende Beziehung zu beweisen (nach Fortlassen der überflüssigen Indices, und Ersetzen von \mathfrak{A} durch F):

$$P F(Q) - F(Q) P = \frac{h}{2\pi i} F'(Q),$$

wenn $P = \frac{h}{2\pi i} \frac{\partial}{\partial q} \dots Q = q \dots$ ist. Diese, besonders für die Matrizenlehre hochwichtige, Beziehung läßt sich leicht durch direkte Rechnung verifizieren.

144. Daß die so beschriebenen Indexsysteme k, M_1, M_2, \dots wirklich eine Folge bilden, erkennt man am einfachsten so: Sei $\pi_1, \pi_2, \pi_3, \dots$ die Reihe der Primzahlen 2, 3, 5, ... Die Produkte $\pi_1^{k-1} \cdot \pi_2^{M_1} \cdot \pi_3^{M_2} \dots$ sind in Wahrheit endlich, denn, abgesehen von endlich vielen Ausnahmen, sind ja alle $M_n = 0$, d. h. die Faktoren $\pi_{n+1}^{M_n} = 1$. Und wenn k, M_1, M_2, \dots alle unsere Indexsysteme durchläuft, durchläuft $\pi_1^{k-1} \cdot \pi_2^{M_1} \cdot \pi_3^{M_2} \dots$ alle Zahlen 1, 2, 3, ..., und zwar jede nur einmal. Wir können also die $\pi_1^{k-1} \cdot \pi_2^{M_1} \cdot \pi_3^{M_2} \dots$ verwenden, um eine laufende einfache Indizierung der $\alpha_{k M_1 M_2 \dots}$ zu gewinnen.

145. Als Koordinaten des Lichtquants sind z. B. seine Impulse p_x, p_y, p_z verwendbar, sowie eine den Polarisationszustand beschreibende Koordinate π . p_x, p_y, p_z bestimmen die Richtung des Lichtquants, d. h. deren Richtungskosinusse $\alpha_x, \alpha_y, \alpha_z$ ($\alpha_x^2 + \alpha_y^2 + \alpha_z^2 = 1$), sowie Frequenz ν , Wellenlänge λ , und Energie: denn nach EINSTEIN hat der Impulsvektor den Betrag $\frac{h\nu}{c}$ (vgl. Anm. 134), also ist

$$p_x = \frac{h\nu}{c} \alpha_x, \quad p_y = \frac{h\nu}{c} \alpha_y, \quad p_z = \frac{h\nu}{c} \alpha_z,$$

d. h.

$$\nu = \frac{c}{h} \sqrt{p_x^2 + p_y^2 + p_z^2}, \quad \lambda = \frac{c}{\nu}, \quad \text{Energie} = h\nu,$$

$$\alpha_x = \frac{c p_x}{h\nu}, \quad \alpha_y = \frac{c p_y}{h\nu}, \quad \alpha_z = \frac{c p_z}{h\nu}.$$

Hierbei macht es sich störend bemerkbar, daß unsere Eigenschwingungen $\bar{\mathfrak{A}}_n(xyz) \cdot \gamma \cos 2\pi Q_n(t - \tau)$ stehende Lichtwellen sind, wie es im Hohlraum \mathbf{H} wegen der spiegelnden Wände gar nicht anders möglich ist — so daß $\bar{\mathfrak{A}}_n$ mit keiner „Strahlrichtung“ $\alpha_x, \alpha_y, \alpha_z$ in Beziehung gesetzt werden kann. Man erkennt sofort, daß neben $\alpha_x, \alpha_y, \alpha_z$ zumindest auch die entgegengesetzte Richtung $-\alpha_x, -\alpha_y, -\alpha_z$ da ist, und Entsprechendes gilt für die Impulse. Wir müssen somit in \mathbf{H} andere Koordinaten als p_x, p_y, p_z, π verwenden.

Diesem Übelstande halfen einige neuere Darstellungen des Gegenstandes dadurch ab, daß \mathbf{H} als Rechtflach

$$-A < x < A, \quad -B < y < B, \quad -C < z < C$$

angenommen wurde, dessen Randflächen $x = \pm A, y = \pm B, z = \pm C$ aber keine Wände sein sollen, vielmehr wird $x = A$ mit $x = -A$ identifiziert, $y = B$ mit $y = -B, z = C$ mit $z = -C$. D. h. Licht, daß die Wand $x = A$ bei A, y, z

trifft, setzt seinen Weg bei $-A, y, z$ fort (wieder nach **H** hinein), als ob nichts geschehen wäre, usw. (vgl. z. B. eine Abhandlung von L. LANDAU und R. PEIERLS: Z. Physik Bd. 62 [1930]). Man kann auch sagen: der Raum wird in den x, y, z -Richtungen periodisch mit den bzw. Perioden $2A, 2B, 2C$ angenommen.

Die analytische Behandlung bleibt dieselbe, nur lautet die Randbedingung jetzt $\mathfrak{U}(A, y, z) = \mathfrak{U}(-A, y, z), \mathfrak{U}(x, B, z) = \mathfrak{U}(x, -B, z), \mathfrak{U}(x, y, C) = \mathfrak{U}(x, y, -C)$ (statt $\frac{\partial}{\partial n} \mathfrak{U} = 0$ am Rande) und die „Elementarlösungen“, nach denen man entwickelt, sind die $\frac{\cos}{\sin} [2\pi\nu(t - c(\alpha_x x + \alpha_y y + \alpha_z z))]$ (statt der $\overline{\mathfrak{U}}(x, y, z) \cdot \tilde{Q}(t)$).

Man bestimmt leicht die zu den Eigenlösungen gehörigen $\nu = \varrho_n$ und $\alpha_x = \alpha_{n,x}, \alpha_y = \alpha_{n,y}, \alpha_z = \alpha_{n,z}$ ($n = 1, 2, \dots$), und der weitere Ausbau der Theorie fällt mit dem im Text angegebenen zusammen.

146. Dieser Grenzübergang $S \rightarrow +\infty$ ist von dem, in der elektromagnetischen Theorie vorgenommenen Grenzübergange $N \rightarrow +\infty$ verschieden! Denn wenn wir auch die dortigen M_1, M_2, \dots als Lichtquantenanzahlen deuten, so war N eine Schranke für die Anzahl inkohärenter Lichtquanten (d. h. von Lichtquanten nicht übereinstimmender Frequenz, Richtung — diese machen zusammen den Impuls aus — und Polarisation; vgl. Anm. 145), während S eine Schranke für die Anzahl der Lichtquanten schlechthin ist.

147. Diese Einführung von $\mathfrak{N}_{\infty}^{(S)}$ an Stelle von $\mathfrak{N}_{\infty}^{(S)}$ ist dem Ersetzen der gewöhnlichen Statistik durch die sog. Bose-Einsteinsche Statistik gleichwertig, wenn man die Konsequenzen dieser Maßregel ohne Verwendung der Quantenmechanik betrachtet. Vgl. hierzu z. B. DIRAC a. a. O. Anm. 138.

148. Nähere Erörterungen darüber, wie diese „Doppelnatur“ gedacht war und als wie paradox sie empfunden wurde, findet der Leser in der seinerzeitigen Literatur. Vgl. z. B. die in Anm. 6 angeführten Werke.

Es ist vielfach gesagt worden, daß die Quantenmechanik der Materie dieselbe Doppelnatur zuschreibt, da die diskreten Teilchen (Elektronen, Protonen) auch durch Wellenfunktionen beschrieben werden, und typische Welleneigenschaften zeigen, z. B. Beugung an Gittern, usw. [Vgl. die Experimente von DAVISON-GERMER: Physic. Rev. Bd. 30 (1927); Proc. nat. Acad. Sci. U.S.A. Bd. 14 (1928); ferner C. P. THOMPSON: Proc. Roy. Soc., Lond. Bd. 117 (1928) und RUPP: Ann. Physik Bd. 85 (1928).] Demgegenüber ist zu betonen, daß die Quantenmechanik beide „Naturen“ aus einer einzigen, einheitlichen Theorie der Elementarerscheinungen herleitet. Das Paradoxon der früheren Quantentheorie bestand daraus, daß man zur Erklärung der Erfahrung abwechselnd zwei einander widersprechende Theorien (elektromagnetische Lichttheorie von MAXWELL-HERTZ, Lichtquantentheorie von EINSTEIN) heranziehen mußte.

149. Die exakte Auflösung dieser Differentialgleichungen gaben WEISSKOPF und WIGNER an [Z. Physik Bd. 63 (1930)], aus ihr erkennt man das Zutreffen dieser Aussagen.

150. N. BOHR stellte bekanntlich 1913 (vgl. a. a. O. Anm. 5) fest, daß das Atom, beim Übergange aus einem stationären Zustande von der Energie $W^{(1)}$ in einen stationären Zustand von der Energie $W^{(2)}$, Licht von der Frequenz $\frac{W^{(1)} - W^{(2)}}{h}$ emittiert (natürlich ist $W^{(1)} > W^{(2)}$). In unserem Falle entspricht dem $\frac{W_k - W_{\bar{k}}}{h}$.

151. Es ist

$$\begin{aligned} |e^{i\alpha} - 1|^2 &= (e^{i\alpha} - 1)(e^{-i\alpha} - 1) = (e^{i\alpha} - 1)(e^{-i\alpha} - 1) \\ &= 2 - e^{i\alpha} - e^{-i\alpha} = 2 - 2 \cos \alpha = 2(1 - \cos \alpha). \end{aligned}$$

152. Es ist (vgl. COURANT-HILBERT S. 49)

$$\int_{-\infty}^{\infty} \frac{1 - \cos x}{x^2} dx = 2 \int_0^{\infty} \frac{1 - \cos x}{x^2} dx = \int_0^{\infty} \frac{1 - \cos(2y)}{y^2} dy = 2 \int_0^{\infty} \frac{\sin^2 y}{y^2} dy = \pi.$$

153. P_v^x ist mit allen $Q_\mu^x, Q_\mu^y, Q_\mu^z, P_\mu^x, P_\mu^y, P_\mu^z$ vertauschbar, Q_v^x ausgenommen. Und zwar ist

$$P_v^x Q_v^x - Q_v^x P_v^x = \frac{h}{2\pi i} 1.$$

Daher ist

$$H_0 Q_v^x - Q_v^x H_0 = \frac{1}{2m_v} (P_v^x)^2 Q_v^x - Q_v^x \frac{1}{2m_v} (P_v^x)^2 = \frac{h}{2\pi i} \frac{1}{m_v} P_v^x,$$

vgl. Anm. 143.

154. Physik. Z. Bd. 18 (1917).

155. Es ist wichtig, den begrifflichen Unterschied zwischen einem System schlechthin und einem System in einem gewissen Zustande zu betonen. Ein System ist z. B. ein Wasserstoffatom, d. h. ein Elektron und ein Proton mit den bekannten zwischen ihnen wirkenden Kräften — formal beschrieben durch die Angaben, daß der Zustandsraum 6 Dimensionen hat, die Koordinaten q_1, \dots, q_6 , die Impulse p_1, \dots, p_6 heißen, und die Hamiltonsche Funktion

$$H(q_1 \dots q_6, p_1 \dots p_6) = \frac{p_1^2 + p_2^2 + p_3^2}{2m_e} + \frac{p_4^2 + p_5^2 + p_6^2}{2m_p} + \frac{e^2}{\sqrt{(q_1 - q_4)^2 + (q_2 - q_5)^2 + (q_3 - q_6)^2}}$$

ist. Ein Zustand ist erst durch weitere Angaben fixiert: in der klassischen Mechanik durch Erteilen numerischer Werte $q_1^0, \dots, q_6^0, p_1^0, \dots, p_6^0$ an die Koordinaten und Impulse $q_1, \dots, q_6, p_1, \dots, p_6$; in der Quantenmechanik durch die Wellenfunktion $\varphi(q_1 \dots q_6)$. Mehr Angaben als diese braucht man nie: liegen System + Zustand vor, so gibt die Theorie eindeutige Rechenanweisungen zum Beantworten aller Fragen.

156. Solche Gesamtheiten, Kollektive genannt, sind überhaupt notwendig, um die Wahrscheinlichkeitsrechnung als Lehre von den Häufigkeiten begründen zu können. Sie wurden von R. v. MISES eingeführt, der ihre Bedeutung für die Wahrscheinlichkeitsrechnung erkannte, und einen entsprechenden Aufbau derselben durchführte (vgl. z. B. sein Buch Wahrscheinlichkeit, Statistik und ihre Wahrheit, Berlin 1928).

157. $w(a')$ ist die Wahrscheinlichkeit von $a \leq a'$, d. h. es gehört zum Intervalle $-\infty, a'$. Wie man sieht, hat $w(a)$, oder, wie wir es bezeichnen wollen, um seine Abhängigkeit von \mathfrak{R} in Evidenz zu setzen, $w_{\mathfrak{R}}(a)$, die folgenden Eigenschaften: Für $a \rightarrow -\infty$ ist $w_{\mathfrak{R}}(a) \rightarrow 0$; für $a \rightarrow +\infty$ ist $w_{\mathfrak{R}}(a) \rightarrow 1$; für $a \geq a_0, a \rightarrow a_0$ ist $w_{\mathfrak{R}}(a) \rightarrow w_{\mathfrak{R}}(a_0)$; für $a' \leq a''$ ist $w_{\mathfrak{R}}(a') \leq w_{\mathfrak{R}}(a'')$. (In der Quantenmechanik ist, wenn $E(\lambda)$ die zu R gehörige Zerlegung der Einheit ist, $w_{\mathfrak{R}}(a) = \|\|E(a)\varphi\|\|^2 = (E(a)\varphi, \varphi)$.)

Wenn $w_{\mathfrak{R}}(a)$ differentiierbar ist, so kann an seine Stelle die wohlbekanntere „Wahrscheinlichkeitsdichte“ $\frac{d}{da} w_{\mathfrak{R}}(a)$ eingeführt werden; wenn es an der Stelle $a = a_0$ unstetig ist (natürlich von links), so hat die Stelle $a = a_0$ die „diskrete Wahrscheinlichkeit“ $w_{\mathfrak{R}}(a_0) - w_{\mathfrak{R}}(a_0 - 0)$. Der allgemein brauchbare Oberbegriff ist aber $w_{\mathfrak{R}}(a)$, vgl. a. a. O. Anm. 156.

158. Dies folgt aus dem sog. Gesetz der großen Zahlen, dem Theorem von BERNOUILLY.

159. So galt es z. B. als eine prinzipielle Schwierigkeit der Definition des elektrischen Feldes, daß der dabei zu verwendende elektrische „Probekörper“ nicht kleiner sein kann als ein Elektron.

160. Der scharfe Wert a_0 entspricht der Wahrscheinlichkeitsfunktion $w_{\mathfrak{A}}(a)$ mit

$$w_{\mathfrak{A}}(a) \begin{cases} = 1, & \text{für } a \geq a_0, \\ = 0, & \text{für } a < a_0. \end{cases}$$

In diesem und nur in diesem Falle ist die Streuung ε^2 Null. Übrigens sind Mittelwert ϱ und Streuung ε^2 so zu berechnen (Stieltjessche Integrale!)

$$\begin{aligned} \varrho &= \int_{-\infty}^{+\infty} a \, d w_{\mathfrak{A}}(a), \\ \varepsilon^2 &= \int_{-\infty}^{+\infty} (a - \varrho)^2 \, d w_{\mathfrak{A}}(a) \\ &= \int_{-\infty}^{+\infty} a^2 \, d w_{\mathfrak{A}}(a) - 2 \varrho \int_{-\infty}^{+\infty} a \, d w_{\mathfrak{A}}(a) + \varrho^2 = \int_{-\infty}^{+\infty} a^2 \, d w_{\mathfrak{A}}(a) - \varrho^2 \\ &= \int_{-\infty}^{+\infty} a^2 \, d w_{\mathfrak{A}}(a) - \left(\int_{-\infty}^{+\infty} a \, d w_{\mathfrak{A}}(a) \right)^2. \end{aligned}$$

(Vgl. mit III. 4., Anm. 130.)

161. Es handelt sich um unabhängige Messungen an mehreren Systemen; sukzessive Messungen am selben System würden immer wieder denselben Wert ergeben (vgl. III. 3.).

162. Man überlege sich z. B., was geschieht, wenn man die (wegen der Unbestimmtheitsrelationen) nicht gleichzeitig meßbaren Größen q (cartesische Koordinate) und p (Impuls) für \mathfrak{A} , \mathfrak{C} einsetzt. Wenn q in einer Gesamtheit kaum streut, so wird die p -Messung mit der Genauigkeit (d. h. Streuung) ε die q -Streuung auf mindestens $\frac{h}{4\pi\varepsilon}$ heraufsetzen (vgl. III. 4.) — d. h. alles verderben.

163. $a \mathfrak{A}, \mathfrak{C}^2, \mathfrak{A} + \mathfrak{C} + \dots$ bedeutet: man setze im Sinne der weiter oben gegebenen Definition die Größen \mathfrak{A} bzw. \mathfrak{C} bzw. $\mathfrak{A}, \mathfrak{C}, \dots$ in die Funktionen $f(x) = ax$ bzw. $f(x) = x^2$ bzw. $f(x, y, \dots) = x + y + \dots$ ein.

164. So ist z. B. der Energieoperator der Heisenbergschen Theorie eines in einem Potentialkraftfelde $V(xyz)$ bewegten Elektrons

$$H_0 = \frac{(P_x)^2 + (P_y)^2 + (P_z)^2}{2m} + V(Q_x, Q_y, Q_z)$$

(vgl. z. B. in III. 6.) eine Summe von zwei unvertauschbaren Operatoren: $R = \frac{(P_x)^2 + (P_y)^2 + (P_z)^2}{2m}$, $S = V(Q_x, Q_y, Q_z)$. Während die Messung der zu R gehörigen Größe \mathfrak{A} eine Impulsmessung ist, und diejenige der zu S gehörigen Größe \mathfrak{C} eine Koordinatenmessung, mißt man die zu $H_0 = R + S$ gehörige Größe $\mathfrak{A} + \mathfrak{C}$ ganz anders: z. B. durch Ausmessen der Frequenz der durch dieses (gebundene) Elektron emittierten Spektrallinien, da diese auf Grund der Bohrschen Frequenzrelation die Energieniveaus, d. h. die $\mathfrak{A} + \mathfrak{C}$ -Werte, festlegen. Trotzdem ist unter allen Umständen

$$\text{Erw}(\mathfrak{A} + \mathfrak{C}) = \text{Erw}(\mathfrak{A}) + \text{Erw}(\mathfrak{C}).$$

165. Für streuungsfreie Gesamtheiten besteht aber auch kein Anlaß, nicht die richtigen Erwartungswerte einzuführen.

166. D. h.

$$U \varphi_m = \sum^n u_{m n} \varphi_n.$$

wozu freilich die Endlichkeit von $\sum_n |u_{mn}|^2$ nötig ist. Diese läßt sich z. B. so begründen: Wenn $\sum_n |x_n|^2 = 1$ ist, so hat für $\varphi = \sum_n x_n \varphi_n$ $R = P_{[\varphi]}$ die Matrix $\bar{x}_\mu x_\nu$, also sein \mathfrak{M} den Erwartungswert $\sum_{m,n} u_{m,n} \bar{x}_m x_n$. Wegen $P_{[\varphi]} = P_{[\varphi]}^2$, $1 - P_{[\varphi]} = (1 - P_{[\varphi]})^2$ ist dieser ≥ 0 , $\leq \text{Erw}(1)$, also, wenigstens für normierte $\text{Erw}(\mathfrak{M})$, ≥ 0 , ≤ 1 . Wenn $x_{N+1} = x_{N+2} = \dots = 0$ ist, besagt dies: die N -dimensionale Hermitesche Form $\sum_{m,n} u_{m,n} \bar{x}_m x_n$ hat für $\sum_n |x_n|^2 = 1$ Werte ≥ 0 , ≤ 1 , d. h. die Eigenwerte der Matrix $u_{\mu\nu}$, $\mu, \nu = 1, \dots, N$, sind ≥ 0 , ≤ 1 . Daher ist die Länge

des Vektors $y_m = \sum_{n=1}^N u_{m,n} x_n$ stets \leq als diejenige des Vektors x_m . Für

$x_m = \begin{cases} 1, & \text{für } m = \bar{m} \\ 0, & \text{sonst} \end{cases}$ ist $y_m = u_{m\bar{m}}$, also:

$$\sum_{m=1}^N |x_m|^2 \geq \sum_{m=1}^N |y_m|^2, \quad 1 \geq \sum_{m=1}^N |u_{m\bar{m}}|^2.$$

Da dies für jedes N gilt, ist $\sum_n |u_{m,n}|^2 \leq 1$.

167. Die ganze Betrachtung ist streng genommen nur dann stichhaltig, wenn $\varphi_1, \varphi_2, \dots$ alle zum Definitionsbereich von R gehören. Nun können wir zwar für jedes R ein solches vollständiges normiertes Orthogonalsystem $\varphi_1, \varphi_2, \dots$ finden (vgl. II. 11.), aber wenn R nicht überall sinnvoll ist, so hängt dieses System von R ab. Eigentlich haben wir also für jedes vollständige normierte Orthogonalsystem $\varphi_1, \varphi_2, \dots$ ein, von diesem abhängiges U , derart, daß

$$\text{Erw}(\mathfrak{M}) = \text{Spur}(UR)$$

nur für diejenigen R zu gelten braucht, zu deren Definitionsbereich $\varphi_1, \varphi_2, \dots$ dazugehören.

Indessen sind alle diese U einander gleich. Denn sind U', U'' zwei solche, so gilt die obige Formel für beide, wenn R überall sinnvoll ist, d. h. es ist dann $\text{Spur}(U'R) = \text{Spur}(U''R)$. Für $R = P_{[\varphi]}$ wird also $(U'\varphi, \varphi) = (U''\varphi, \varphi)$, $((U' - U'')\varphi, \varphi) = 0$. Da dies für alle φ mit $|\varphi| = 1$, also auch für alle Elemente des Hilbertschen Raumes gilt, muß $U' - U'' = 0$ sein — also $U' = U''$.

168. Direkt $\mathfrak{E} = \sqrt{\mathfrak{M}}$, d. h. $\mathfrak{E} = h(\mathfrak{M})$, $h(x) = \sqrt{x}$, zu setzen, geht nicht an, denn wir betrachten nur für alle reellen x definierte reellwertige Funktionen, und \sqrt{x} ist nicht so — da es für negative x imaginär ist.

169. Es gelingt auch einen einfachen direkten Beweis zu führen. Sei $\varphi_1, \varphi_2, \dots$ ein vollständiges normiertes Orthogonalsystem, $a_{\mu\nu} = (A\varphi_\mu, \varphi_\nu)$, $b_{\mu\nu} = (B\varphi_\mu, \varphi_\nu)$, $\text{Spur}(AB) = \sum_{\mu\nu} a_{\mu\nu} b_{\nu\mu}$. Dies ist ≥ 0 , wenn alle $\sum_{\mu\nu} a_{\mu\nu} b_{\nu\mu} \geq 0$ sind. Ist

$f = \sum_{\mu=1}^N x_\mu \varphi_\mu$, so ist $(Af, f) = \sum_{\mu\nu} a_{\mu\nu} x_\mu \bar{x}_\nu \geq 0$, $(Bf, f) = \sum_{\mu\nu} b_{\mu\nu} x_\mu \bar{x}_\nu \geq 0$, also sind die endlichen Matrizen $a_{\mu\nu}, b_{\mu\nu}$ ($\mu, \nu = 1, \dots, N$) auch definit. Sowohl die

Definitität, also auch der Wert von $\sum_{\mu\nu} a_{\mu\nu} b_{\nu\mu}$ sind Orthogonalinvarianten im N -dimensionalen Raume; da $b_{\mu\nu}$ Hermitesch ist, kann es (im N -dimensionalen Raume!) durch eine orthogonale Transformation auf die Diagonalform gebracht werden. Wir dürfen es daher gleich diagonal annehmen, d. h. $b_{\mu\nu} = 0$ für $\mu \neq \nu$.

Also ist $\sum_{\mu\nu} a_{\mu\nu} b_{\nu\mu} = \sum_{\mu} a_{\mu\mu} b_{\mu\mu}$. Wegen der Definitität ist aber $a_{\mu\mu} \geq 0$,

$b_{\mu\mu} \geq 0$ (man setze $x_\nu = \begin{cases} 1, & \text{für } \nu = \mu \\ 0, & \text{für } \nu \neq \mu \end{cases}$), also ist die obige Summe wirklich ≥ 0 .

170. Für $\varphi' = \varphi''$ ist es klar, sei $\varphi' \neq \varphi''$. „Orthogonalisieren“ von φ', φ'' (vgl. II. 2.) führt zu einem φ_1 mit $|\varphi_1| = 1$, das zu φ' orthogonal ist, derart, daß φ'' Linearaggregat von φ', φ_1 ist. Also: $\varphi'' = a\varphi' + b\varphi_1$, $|\varphi''|^2 = |a|^2 + |b|^2 = 1$. Sei etwa $|a| = \cos \theta$, $|b| = \sin \theta$, also $a = e^{i\alpha} \cos \theta$, $b = e^{i\beta} \sin \theta$, dann ist auch für $a(x) = e^{i\alpha} \cos x \theta$, $b(x) = e^{i\beta} \sin x \theta$ $|a(x)|^2 + |b(x)|^2 = 1$, also für $\varphi(x) = a(x)\varphi' + b(x)\varphi_1$ $|\varphi(x)| = 1$. Und $\varphi(x)$ variiert stetig von $\varphi'(x=0)$ zu $\varphi''(x=1)$.

171. Eigentlich sollten wir noch wegen 2. $V \neq 0, W \neq 0$ verlangen, indessen sind die Fälle $V=0$ oder $W=0$ mit $c'=0, c''=1$ bzw. $c'=1, c''=0$ einbegriffen.

172. Die in den zwei letzten Paragraphen gegebene Deduktion, die zu den einheitlichen Gesamtheiten führt, wurde vom Verfasser, Gött. Nachr. 1927, angegeben. Die Existenz der einheitlichen Gesamtheiten, bzw. ihre Beziehung zu den allgemeinen Gesamtheiten, wurde unabhängig von H. WEYL: Z. Physik Bd. 46 (1927), und vom Verfasser, a. a. O., gefunden. Ein besonderer Fall allgemeinerer Gesamtheiten (nämlich bei zwei gekoppelten Systemen, vgl. die Diskussion in VI. 2.) kam schon früher bei J. LANDAU: Z. Physik Bd. 45 (1927) vor.

173. Wenn die „verborgenen Parameter“, die wir zusammen mit π bezeichnen wollen, nur diskrete Werte $\pi_1, \pi_2, \dots, \pi_n$ ($n > 1$) annehmen, gewinnt man die zwei Gesamtheiten, deren Gemisch die ursprüngliche ist, indem man in die eine die Systeme mit $\pi = \pi_1$ aufnimmt, in die andere die mit $\pi \neq \pi_1$. Variiert π kontinuierlich über ein Gebiet Π , so sei Π' ein Teilgebiet von Π , und die eine Gesamtheit enthalte die Systeme mit π aus Π' , die andere diejenigen, deren π nicht zu Π' gehört.

174. Der Phasenraum ist 6-dimensional, seine 6 Koordinaten sind die 3 cartesischen Koordinaten des Massenpunktes, q_1, q_2, q_3 , und die 3 entsprechenden Impulse p_1, p_2, p_3 . Nach III. 4. gilt für die bzw. Streuungen $\varepsilon_1, \varepsilon_2, \varepsilon_3, \eta_1, \eta_2, \eta_3$

$$\varepsilon_1 \eta_1 \geq \frac{\hbar}{4\pi}, \quad \varepsilon_2 \eta_2 \geq \frac{\hbar}{4\pi}, \quad \varepsilon_3 \eta_3 \geq \frac{\hbar}{4\pi},$$

d. h.

$$\varepsilon_1 \varepsilon_2 \varepsilon_3 \eta_1 \eta_2 \eta_3 \geq \left(\frac{\hbar}{4\pi}\right)^3,$$

und bis auf dies Volum ist die Lage im Phasenraume der klassischen Mechanik jedenfalls unbestimmt.

175. Vgl. die ungemein lichtvollen diesbezüglichen Ausführungen von SCHRÖDINGER: Naturwiss. Bd. 17 (1929) Heft 37.

176. $u_\mu \rightarrow -u_\mu$ (oder $u_\nu \rightarrow -u_\nu$, bzw. $v_\mu \rightarrow -v_\mu$) ist eine Symmetrie-Operation von K , bei der die ersteren Integranden ihr Vorzeichen wechseln, ihre Integrale sind also gleich 0. $u_\mu \rightarrow v_\mu, v_\mu \rightarrow u_\mu$ bzw. $u_\nu \rightarrow u_\nu, u_\nu \rightarrow u_\nu$ sind solche Symmetrieoperationen von K' , die die letzteren Integrale ineinander überführen, ihre Integrale sind daher einander gleich, also $\frac{1}{2s}$ -mal ihre Summe:

$$\iint_K \dots \iint (u_1^2 + v_1^2 + \dots + u_s^2 + v_s^2) dv = \iint_K \dots \iint dv = \text{Oberfläche von } K,$$

die C heißen möge.

177. Wenn Spur U unendlich ist, mag die letztere, durch Subtraktion gewonnene, Formel zweifelhaft erscheinen. Jedoch kann sie auch so begründet werden: Daß λ^* den Wert λ^* hat, bedeutet $w(a', a'') = 0$, d. h. Spur $U(E(a'') - E(a')) = 0$ für $a'' < \lambda^*$ oder $a' \geq \lambda^*$. Da diese Spur stets ≥ 0 ist, und mit a'' nichtfallend sowie mit a' nichtwachsend ist, genügt es für $a'' < \lambda^*$ ihren limes zu betrachten, und für $a' \geq \lambda^*$ ihren limes. D. h. Spur $UE(a'') = 0$ für $a'' < \lambda^*$, Spur $U(1 - E(a')) = 0$ für $a' \geq \lambda^*$.

178. D. h. wenn \mathfrak{C} vorhanden ist, ist der Zustand φ . Ist es nicht vorhanden, so ist „non \mathfrak{C} “ vorhanden, wobei an Stelle von $E = P_{[\varphi]}$, $\mathfrak{M} = [\varphi]$ $1 - E = 1 - P_{[\varphi]}$, $\mathfrak{R} - \mathfrak{M} = \mathfrak{R} - [\varphi]$ tritt, das U nicht eindeutig festlegt. (E entspricht eben der Frage: „ist der Zustand φ ?“) Eine Messung, die bei jedem Ausgang den Zustand eindeutig festlegt, ist eine Messung einer Größe \mathfrak{M} , deren Operator R ein reines Punktspektrum mit lauter einfachen Eigenwerten hat, vgl. III. 3. Nach der Messung liegt dann einer der Zustände $\varphi_1, \varphi_2, \dots$ (die Eigenfunktionen von R) vor, d. h. der Zustand von S wird im allgemeinen durch die Messung geändert. — Analog ändert auch die \mathfrak{C} -Messung den Zustand, da nachher bei positivem Resultat $U = P_{[\varphi]}$ ist, bei negativem dagegen $U(1 - P_{[\varphi]}) = U$, $UP_{[\varphi]} = 0$, d. h. $U\varphi = 0$; während vorher keins von beiden der Fall sein mußte. Diese quantenmechanische „Ermittlung“ des Zustandes ändert ihn also, wie es auch nicht anders zu erwarten war.

179. Z. B. weil

$$RP_{[\varphi_n]}f = R((f, \varphi_n) \cdot \varphi_n) = (f, \varphi_n) \cdot R\varphi_n = \lambda_n(f, \varphi_n) \cdot \varphi_n,$$

$$P_{[\varphi_n]}Rf = (Rf, \varphi_n) \cdot \varphi_n = (f, R\varphi_n) \cdot \varphi_n = \lambda_n(f, \varphi_n) \cdot \varphi_n$$

ist.

180. Jedes Lehrbuch der klassischen (Hamiltonschen) Mechanik gibt diese Zusammenhänge wieder.

181. Die Unbestimmtheitsrelationen für das Paar Zeit — Energie sind mehrfach diskutiert worden. Vgl. die zusammenfassende Darstellung bei HEISENBERG: Die physikalischen Prinzipien der Quantentheorie, § II. 2. d., Leipzig 1930.

182. Alle anderen Einzelheiten der Meßanordnung bezwecken lediglich die Kopplung der eigentlich interessierenden Größe \mathfrak{M} , bzw. ihres Operators R , mit den hier genannten M_n , bzw. P^x, P^y, P^z , bzw. Q^x, Q^y, Q^z . Freilich ist gerade dies die praktisch wichtigste Seite der Meßtechnik.

183. Vgl. z. B. NERNST: Theoretische Chemie, Stuttgart (zahlreiche Ausgaben seit 1893), Buch IV, Diskussion des thermodynamischen Beweises des „Massenwirkungsgesetzes“.

184. Das auf dieser Grundlage aufgebaute, phänomenologische System der Thermodynamik findet der Leser in zahlreichen Lehrbüchern, z. B. PLANCK: Vorlesungen über Thermodynamik, Berlin 1930. Fürs folgende kommt hauptsächlich die statistische Fassung der Hauptsätze in Frage, wie sie z. B. in den folgenden Abhandlungen auseinandergesetzt wird: EINSTEIN: Verh. d. dtsh. physik. Ges. Bd. 12 (1914); L. SZILÁRD: Z. Physik Bd. 32 (1925).

185. Das ist die Maxwell-Boltzmannsche Methode der statistischen Mechanik (vgl. die Übersicht im Artikel von P. und T. EHRENFEST: in der Enzykl. d. Math. Wiss., Bd. II. 4. D. Leipzig 1907). In der Gastheorie z. B. ist das „sehr komplizierte“ System das Gas, das aus vielen (wechselseitig wirkenden) Molekülen besteht, und die Moleküle werden statistisch untersucht.

186. Das ist die Gibbssche Methode (vgl. a. a. O. Anm. ¹⁸⁵). Hier ist das Einzelsystem das ganze Gas, und viele Exemplare desselben Systems (d. i. desselben Gases) werden in ihren Schicksalen verfolgt und ihre Eigenschaften statistisch ausgewertet.

187. Vgl. a. a. O. Anm. ¹⁸⁴. Weiter ausgebildet wurde dieselbe von L. SZILÁRD.

188. So beschreibt bekanntlich die kinetische Gastheorie denjenigen Prozeß, bei dem die Wände ihre Temperatur auf das von ihnen eingeschlossene Gas übertragen. Vgl. a. a. O. Anm. ¹⁸⁴, ¹⁸⁵.

189. Wenn bei dieser Verwandlung die Wärmemengen Q_1, \dots, Q_i bei den bzw. Temperaturen T_1, \dots, T_i verbraucht werden, so ist der Entropieunterschied gleich $\frac{Q_1}{T_1} + \dots + \frac{Q_i}{T_i}$. Vgl. a. a. O. Anm. ¹⁸⁴.

190. Ist $c(\mathbf{T})$ die spezifische Wärme des vorliegenden Gasquantums bei der Temperatur \mathbf{T} , so nimmt es im Temperaturintervalle $\mathbf{T}, \mathbf{T} + d\mathbf{T}$ die Wärmemenge $c(\mathbf{T}) d\mathbf{T}$ auf. Nach Anm. 186 ist daher der Entropieunterschied $\int_{\mathbf{T}_1}^{\mathbf{T}_2} \frac{c(\mathbf{T}) d\mathbf{T}}{\mathbf{T}}$.

191. Für ein ideales Gas ist $c(\mathbf{T}) = \text{Konstans}$, bei sehr kleinem \mathbf{T} versagt dies bestimmt. Vgl. z. B. a. a. O. Anm. 6.

192. Hierzu ist erforderlich, daß das Volum V von \bar{K} im Verhältnis zum Gesamtvolum der $\bar{K}_1, \dots, \bar{K}_N$ groß sei, ferner daß die „Energie pro Freiheitsgrad“, $k\mathbf{T}$ ($k = \text{Boltzmannsche Konstante}$) im Verhältnis zu $\frac{h^2}{\mu \nu^{2/3}}$ ($h = \text{Plancksche Konstante}$, $\mu = \text{Masse des Einzelmoleküls}$, diese Größe ist der Dimension nach eine Energie) groß sei. Vgl. z. B. FERMI: Z. Physik Bd. 36 (1926).

193. Vgl. z. B. a. a. O. Anm. 184.

194. Vgl. a. a. O. Anm. 185, eine ausführliche Diskussion der mit dem Begriff des „Maxwellschen Dämons“ verbundenen Schwierigkeiten findet der Leser bei L. SZILÁRD: Z. Physik Bd. 53 (1929).

195. Besteht ein ideales Gas aus M Molekülen, so ist sein Druck $p = \frac{M\kappa\mathbf{T}}{\nu}$. Bei der Kompression vom Volum ν_1 aufs Volum ν_2 wird also die mechanische Arbeit

$$\int_{\nu_1}^{\nu_2} p d\nu = M\kappa\mathbf{T} \int_{\nu_1}^{\nu_2} \frac{d\nu}{\nu} = M\kappa\mathbf{T} \ln \frac{\nu_2}{\nu_1}$$

geleistet. In unserem Falle ist $M = \frac{N}{2}$, $\nu_1 = \frac{\nu}{2}$, $\nu_2 = \nu$.

196. Die Energie eines idealen Gases hängt bekanntlich nur von seiner Temperatur ab.

197. Wir bestimmen gleich die Eigenwerte von $aP_{[\varphi]} + bP_{[\psi]}$. Es soll

$$(aP_{[\varphi]} + bP_{[\psi]})f = \lambda f$$

sein, da die linke Seite Linearaggregat von φ, ψ ist, ist es auch die rechte, also auch f , wenn $\lambda \neq 0$ ist. $\lambda = 0$ ist sicher unendlich vielfacher Eigenwert, da jedes zu φ, ψ orthogonale f dazu gehört. Es genügt also $\lambda \neq 0$ und $f = x\varphi + y\psi$ zu betrachten. (φ, ψ seien linear unabhängig, sonst ist $\varphi = c\psi$, $|c| = 1$, also die zwei Zustände identisch.)

Die obige Gleichung lautet dann:

$$a(x + y(\varphi, \varphi)) \cdot \varphi + b(x(\varphi, \psi) + y) \cdot \psi = \lambda x \cdot \varphi + \lambda y \cdot \psi,$$

d. h.

$$a \cdot x + a \overline{(\varphi, \varphi)} \cdot y = \lambda \cdot x, \quad b(\varphi, \psi) \cdot x + b \cdot y = \lambda \cdot y.$$

Die Determinante dieser Gleichungen muß verschwinden:

$$\begin{vmatrix} a - \lambda & a \overline{(\varphi, \varphi)} \\ b(\varphi, \psi) & b - \lambda \end{vmatrix} = 0, \quad (a - \lambda)(b - \lambda) - ab |(\varphi, \psi)|^2 = 0,$$

$$\lambda^2 - (a + b)\lambda + ab(1 - \alpha^2) = 0,$$

$$\lambda = \frac{a + b \pm \sqrt{(a + b)^2 - 4ab(1 - \alpha^2)}}{2} = \frac{a + b \pm \sqrt{(a - b)^2 + 4\alpha^2 ab}}{2}.$$

Setzen wir $a = 1$, $b = 0$ bzw. $a = \frac{1}{2}$, $b = \frac{1}{2}$ bzw. $a = \frac{1}{3}$, $b = \frac{2}{3}$, so entstehen die Formeln des Textes.

198. Da $(x \ln x)' = \ln x + 1$, also

$$\begin{aligned} \left(\frac{1+y}{2} \ln \frac{1+y}{2} + \frac{1-y}{2} \ln \frac{1-y}{2} \right)' &= \frac{1}{2} \left(\ln \frac{1+y}{2} + 1 \right) - \frac{1}{2} \left(\ln \frac{1-y}{2} + 1 \right) \\ &= \frac{1}{2} \ln \frac{1+y}{1-y} \end{aligned}$$

ist, ist die Ableitung unseres Ausdrucks

$$\begin{aligned} -3 \cdot \frac{1}{2} \ln \frac{3 + \sqrt{1+8\alpha^2}}{3 - \sqrt{1+8\alpha^2}} \cdot \frac{1}{3} \frac{8\alpha}{\sqrt{1+8\alpha^2}} + 4 \cdot \frac{1}{2} \ln \frac{1+\alpha}{1-\alpha} \\ = 2 \left(\ln \frac{1+\alpha}{1-\alpha} - \frac{2\alpha}{\sqrt{1+8\alpha^2}} \ln \frac{3 + \sqrt{1+8\alpha^2}}{3 - \sqrt{1+8\alpha^2}} \right). \end{aligned}$$

Daß dies > 0 ist, bedeutet

$$\ln \frac{1+\alpha}{1-\alpha} > \frac{2\alpha}{\sqrt{1+8\alpha^2}} \ln \frac{3 + \sqrt{1+8\alpha^2}}{3 - \sqrt{1+8\alpha^2}},$$

d. h.

$$\frac{1}{2\alpha} \ln \frac{1+\alpha}{1-\alpha} > \frac{2}{3} \cdot \frac{1}{2\beta} \ln \frac{1+\beta}{1-\beta}, \quad \beta = \frac{\sqrt{1+8\alpha^2}}{3}.$$

Wir werden dies sogar mit $\frac{8}{9}$ an Stelle von $\frac{2}{3}$ beweisen. Wegen $1 - \beta^2 = \frac{8}{9}(1 - \alpha^2)$ und $\alpha < \beta$ (was wegen $\alpha < 1$ aus ersterem folgt), besagt das

$$\frac{1-\alpha^2}{2\alpha} \ln \frac{1+\alpha}{1-\alpha} > \frac{1-\beta^2}{2\beta} \ln \frac{1+\beta}{1-\beta},$$

und dies steht fest, wenn $\frac{1-x^2}{2x} \ln \frac{1+x}{1-x}$ als monoton fallend in $0 < x < 1$ erkannt ist. Dies kann man aber z. B. an seiner Potenzreihe sehen:

$$\begin{aligned} \frac{1-x^2}{2x} \ln \frac{1+x}{1-x} &= (1-x^2) \left(1 + \frac{x^2}{3} + \frac{x^4}{5} + \dots \right) \\ &= 1 - \left(1 - \frac{1}{3} \right) x^2 - \left(\frac{1}{3} - \frac{1}{5} \right) x^4 - \dots \end{aligned}$$

199. Vgl. zu diesem, für die phänomenologisch-thermodynamische Methode charakteristischen, Kunstgriff, z. B. a. a. O. Anm. ¹⁸⁴.

200. Natürlich könnten wir hier den Faktor Nx fortlassen, und $-\text{Spur}(U \ln U)$ betrachten. Oder auch, um die Proportionalität zur Elementenzahl N zu wahren, $-N \text{Spur}(U \ln U)$.

201. Vgl. z. B. PLANCK: Theorie der Wärmestrahlung, Leipzig 1913.

202. L. SZILÁRD hat a. a. O. Anm. ¹⁹⁴ gezeigt, daß man sich dieses „Wissen“ auch nicht um weniger als eine kompensierende Entropiezunahme $x \ln 2$ verschaffen kann — allgemein ist $x \ln 2$ der „thermodynamische Wert“ der Kenntnis, welcher von zwei Fällen einer Alternative besteht. — Alle Versuche, den oben beschriebenen Prozeß dann durchzuführen, wenn man nicht weiß, in welcher Hälfte des Behälters sich das Molekül befindet, lassen sich als unstichhaltig nachweisen, obwohl sie u. U. zu recht komplizierten Automaten-Mechanismen führen.

203. Diese Kennzeichnung des makroskopischen Beobachters stammt von E. WIGNER.

204. Wenn E_n mit H , also mit A , vertauschbar ist, besteht die Gleichheit wegen

$$\text{Spur}(A \cdot U A^{-1} E_n) = \text{Spur}(U A^{-1} E_n \cdot A) = \text{Spur}(U A^{-1} A E_n) = \text{Spur}(U E_n)$$

doch. Aber alle E_n , d. h. alle makroskopisch beobachtbaren Größen, sind keines-

wegs alle mit H vertauschbar: viele, z. B. der Schwerpunkt eines Gases bei der Diffusion ändern sich mit t merkbar, d. h. $Spur(U E_n)$ ist nicht konstant. — Da alle makroskopischen Größen vertauschbar sind, ist H keinesfalls eine makroskopische Größe, d. h. die Energie ist makroskopisch nicht vollkommen genau zu messen. Dies ist ohnehin plausibel.

205. Zum klassischen H -Theorem vgl. BOLTZMANN: Vorlesungen über Gas-theorie, Leipzig 1896, sowie die äußerst lehrreiche Diskussion durch P. und T. EHRENFEST a. a. O. Anm. ¹⁸⁵. Die „Unordnungsannahmen“, die in der Quantenmechanik den Platz derjenigen von BOLTZMANN einnehmen können, formulierte W. PAULI (Sommerfeld-Festschrift, 1928), dort wird das H -Theorem mit ihrer Hilfe bewiesen. — Neuerdings gelang dem Verf. auch der Beweis des klassisch-mechanischen Ergodensatzes, vgl. Proc. Nat. Ac. Jan. und März 1930, sowie die Verschärfung durch G. D. BIRKHOFF: Proc. Nat. Ac. Dez. 1929 und März 1930.

266. Z. Physik Bd. 57 (1929).

207. N. BOHR: Naturwiss. Bd. 17 (1929) wies als erster darauf hin, daß die von der Quantenmechanik in formaler Hinsicht unvermeidbar gemachte Duplizität in der Naturbeschreibung auch sachlich gerechtfertigt ist, und auf den Zusammenhang mit dem Prinzip vom psycho-physikalischen Parallelismus.

208. Die Diskussion, die im folgenden, sowie in VI. 3., ausgeführt wird, enthält wesentliche Elemente, die der Verf. Gesprächen mit Herrn L. SZILÁRD verdankt. Vgl. auch die ähnlichen Betrachtungen bei HEISENBERG, a. a. O. Anm. ¹⁸¹.

209. Man zeigt leicht, daß mit A auch \mathbf{A} Hermiteisch bzw. hypermaximal ist.

210. Für **I.** ist dies klar, für **II.** ebenfalls, solange nur Polynome in Frage kommen. Für allgemeine Funktionen erkennt man dies daraus, daß die Zusammengehörigkeit einer Zerlegung der Einheit und eines Hermiteschen Operators bei unserer Übertragung $A \rightarrow \mathbf{A}$ nicht zerstört wird.

211. Wegen der großen Zahl und Verschiedenheit der Indices wenden wir diese, von der bisherigen etwas abweichende, Schreibweise für Matrizen an.

212. Die Projektionen eines Zustandes aus $I + II$ sind im allgemeinen Gemische in I bzw. II , vgl. w. u. Dieser Umstand wurde von J. LANDAU entdeckt, Z. Physik Bd. 45 (1927).

213. Die mathematische-Diskussion lehnt an eine Abhandlung von E. SCHMIDT: Math. Ann. Bd. 63 (1907) an.

214. Dieser Ansatz ist noch einiger Variationen fähig, die aus ähnlichen Gründen unberücksichtigt bleiben müssen.

215. Die entsprechende Rechnung, für den in III. 4. diskutierten Fall der Ortsmessung, ist in einer Abhandlung von WEIZSÄCKER: Z. Physik Bd. 70 (1931) enthalten.