

## Werk

**Titel:** Mathematische Annalen

**Ort:** Berlin

**Jahr:** 1926

**Kollektion:** Mathematica

**Digitalisiert:** Niedersächsische Staats- und Universitätsbibliothek Göttingen

**Werk Id:** PPN235181684\_0095

**PURL:** [http://resolver.sub.uni-goettingen.de/purl?PPN235181684\\_0095](http://resolver.sub.uni-goettingen.de/purl?PPN235181684_0095)

**LOG Id:** LOG\_0042

**LOG Titel:** Über quantentheoretische Kinematik und Mechanik

**LOG Typ:** article

## Übergeordnetes Werk

**Werk Id:** PPN235181684

**PURL:** <http://resolver.sub.uni-goettingen.de/purl?PPN235181684>

**OPAC:** <http://opac.sub.uni-goettingen.de/DB=1/PPN?PPN=235181684>

## 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](mailto:gdz@sub.uni-goettingen.de)

# Über quantentheoretische Kinematik und Mechanik.

Von

W. Heisenberg in Göttingen.

---

Die vorliegende Arbeit soll eine zusammenfassende Darstellung der Grundzüge einer neuen physikalischen Theorie geben, die den Versuch unternimmt, durch eine genaue Diskussion der Frage nach den prinzipiell beobachtbaren Größen die Gesetze der für Atomsysteme gültigen Kinematik und Mechanik aus der Erfahrung herzuleiten; es sollen also in dieser Theorie die Grundpostulate der Quantentheorie, die in der Bohrschen Atomtheorie zu so außerordentlichen Fortschritten in unserem Wissen über den Bau der Atome geführt haben, in einfache mathematische Verbindung gebracht werden mit jenen hinsichtlich der Kinematik und der Mechanik abgeänderten Raum-Zeitvorstellungen der Quantentheorie. Da die Theorie auch zu einer interessanten Anwendung mancher in der Physik bisher wenig gebrauchten mathematischen Methoden geführt hat, so mag eine Darstellung der Theorie in dieser Zeitschrift berechtigt erscheinen.

Die physikalischen Grundlagen der im folgenden darzustellenden Theorie wurden, zusammen mit der mathematischen Formulierung der kinematischen und mechanischen Grundgleichungen gegeben in einer Arbeit des Verfassers<sup>1)</sup>; die Durchführung dieser Ansätze und der mathematische Ausbau der Theorie gelang Born und Jordan<sup>2)</sup>, ein Teil der von Born und Jordan abgeleiteten Gesetzmäßigkeiten und andere neue Folgerungen der Theorie wurden unabhängig angegeben von Dirac<sup>3)</sup>, der weitere mathematische Ausbau der Theorie wurde veröffentlicht in einer gemeinsamen Arbeit von Born, Jordan und dem Verfasser<sup>4)</sup>; die physikalische Bedeutung der von Born, Jordan und Dirac angegebenen Vertauschungsrelationen

---

1) W. Heisenberg, Ztschr. f. Phys. **33** (1925), S. 879.

2) M. Born und P. Jordan, Ztschr. f. Phys. **34** (1925), S. 858.

3) P. Dirac, Proceedings Roy. Soc. London **109** (1925), S. 642.

4) M. Born, W. Heisenberg und P. Jordan, Ztschr. f. Phys. **35** (1926), S. 557.

(vgl. § 2) behandelte Kramers<sup>5)</sup>); schließlich gelang es Pauli<sup>6)</sup>, die Gesetze des Wasserstoffatoms aus der neuen Theorie herzuleiten.

Unsere Erfahrungen über die Gesetzmäßigkeiten des Atombaues schöpfen wir zunächst aus zwei Quellen: den Strahlungsphänomenen und den Untersuchungen über Stoßvorgänge: die Gesetze der Wärmestrahlung haben Planck zur Einführung der Quantenhypothese veranlaßt, Einstein zeigte die Anwendbarkeit dieser Hypothese auf den lichtelektrischen Effekt; durch Versuche über den Zusammenstoß von  $\alpha$ - und  $\beta$ -Partikeln mit Atomen gelangten Lenard und Rutherford zur Vorstellung vom Kernatom. Durch Zusammenfassung aller Erfahrungen über die Gesetzmäßigkeiten des Atombaues gelang es Bohr, die optischen Äußerungen der Atomgesetze in Verbindung zu bringen mit der Vorstellung vom Kernatom und dadurch die wichtigsten Fortschritte in unserem Wissen über die Bedeutung des periodischen Systems der Elemente und über alle Gesetze der Atomstruktur zu erzielen. Trotz dieser Erfolge stieß die quantitative Deutung der optischen Erfahrungen, also insbesondere die Berechnung der Serienspektren der Elemente auf unüberwindliche Schwierigkeiten; überdies forderten die Strahlungsphänomene an sich schon eine tiefgehende Revision unserer Raum-Zeitvorstellungen bei ihrer Anwendung auf die Vorgänge in den Atomen<sup>7)</sup>. Diese Sachlage legte den Schluß nahe, daß zwar zweifellos die Grundpostulate der Quantentheorie und das Bohrsche Korrespondenzprinzip, denen wir ja fast allen Aufschluß über die Struktur der Atome verdanken, schon eine sinngemäße Beschreibung der Erfahrung darstellen, daß aber die speziellen Rechenregeln der bisherigen Theorie, die zur Deutung der Balmerreihe geführt hatten, noch nicht die richtige Darstellung der Gesetzmäßigkeiten des Atombaues enthalten könnten.

Wenn man mit Bohr die Annahme macht, daß die Balmerreihe den einer periodischen Bewegung eines Elektrons entsprechenden Strahlungsvorgang repräsentiert, so stößt man auf die bekannte grundsätzliche Schwierigkeit, daß das Spektrum jeder beliebigen periodischen Bewegung ein Spektrum äquidistanter Linien sein muß (alle Frequenzen sind als harmonische Obertöne ganzzahlige Vielfache einer Grundfrequenz), während die Balmerreihe eine Linienfolge mit Häufung der Linien an einer endlichen Grenze darstellt. Anscheinend kann man dieser Schwierig-

<sup>5)</sup> H. Kramers, *Physika* 5 (1925), S. 369.

<sup>6)</sup> W. Pauli jr., *Ztschr. f. Phys.* (Im Erscheinen.)

(Die hier von <sup>1)</sup> bis <sup>6)</sup> zitierten Arbeiten werden wir im folgenden als (l. c. <sup>1)</sup>), (l. c. <sup>2)</sup>) usw. anführen.)

<sup>7)</sup> Für die allgemeine Diskussion dieser Probleme vgl. insbesondere N. Bohr, Vortrag vor dem Mathematikerkongreß in Kopenhagen, Sept. 1925. *Nature* 116 (1925), S. 845. *Naturwiss.* 14 (1926); S. 1.

keit nur auf zweierlei Weise entgehen: entweder nimmt man an, daß das Strahlungsspektrum nichts mit dem mathematischen Spektrum der Bewegung des Elektrons im Atom zu tun habe, oder aber, man verläßt die Gesetze der klassischen Kinematik bei der Deutung der Atomprobleme. Die erstere Alternative scheint kaum möglich im Hinblick auf die großen Erfolge, welche die klassische Strahlungstheorie bei der Beschreibung optischer Phänomene erzielt hat. Die zweite Alternative führt zum Problem, die wirklichen Gesetze der quantentheoretischen Kinematik aus den Erfahrungen abzuleiten; dieses Problem ist der Gegenstand der hier darzustellenden Theorie.

## § 1.

**Quantentheoretische Kinematik (l. c. 1)).**

Die grundlegende Erfahrung, die im folgenden zur Ableitung der kinematischen Gesetze der Quantentheorie notwendig ist, bietet das Rydberg-Ritzsche Kombinationsprinzip. Es besagt, daß jede Frequenz  $\nu(nm)$  des beobachteten Spektrums darstellbar sei als Differenz zweier „Terme“  $T_n$  und  $T_m$  und daß umgekehrt jede Differenz zweier Terme aus der Gesamtheit der Terme als Frequenz einer beobachtbaren Spektrallinie auftreten kann, daß also gilt

$$(1) \quad \begin{aligned} \nu(nm) &= T_n - T_m \\ \nu(nk) + \nu(km) &= \nu(nm), \end{aligned}$$

wo die  $\nu(nk)$ ,  $\nu(km)$  und  $\nu(nm)$  beobachtbare Frequenzen des Spektrums bedeuten.

Aus den optischen Phänomenen kann ganz allgemein geschlossen werden, daß zu den prinzipiell beobachtbaren Größen gehört: die Frequenz und die zu dieser Frequenz gehörige Amplitude und Phase. Es soll sich zunächst handeln um ein Problem von einem Freiheitsgrad, also um ein Elektron, das längs einer Geraden innerhalb gewisser Grenzen periodisch schwingen kann. Die Elongation des Elektrons heiße  $x$ . Diese Größe  $x$  würde in der klassischen Theorie in eine Fourierreihe nach  $t$  zerlegt werden können:

$$(2) \quad x = x(n, t) = \sum_{\tau} x(n)_{\tau} \cdot e^{2\pi i \nu(n) \cdot \tau \cdot t},$$

wo  $n$  eine Konstante und  $\tau$  die Nummer der Oberschwingung bedeutet. Die einzelnen Glieder dieser Reihe

$$(3) \quad \dot{x}(n)_{\tau} e^{2\pi i \nu(n) \tau t}$$

würden direkt die als beobachtbar hervorgehobenen Größen Frequenz,

Amplitude und Phase zusammenfassen. — Aus dem Erfahrungsgesetz (1) folgt als sinngemäße Erweiterung dieser klassischen Auffassung, daß bei einer wirklichen Beschreibung der atomtheoretischen Phänomene an Stelle der Größen (3) Ausdrücke der Form

$$(4) \quad x(nm) e^{2\pi i \nu(nm)t}$$

treten müssen. Eine Zusammenfassung solcher Größen  $x(nm)$  zu einer Summe analog der Gleichung (2) scheint hier zunächst nicht sinnvoll. Man wird vielmehr die Frage nach der Zusammenfassung der Größen (4) zunächst offenlassen müssen und den Sinn der Größen (4) so ausdrücken: *Die Elongation  $x$  wird repräsentiert durch die Gesamtheit*

$$(5) \quad \mathbf{x} : (x(nm) e^{2\pi i \nu(nm)t}).$$

Mit dieser Aufstellung wäre aber offenbar physikalisch wie mathematisch nichts gewonnen, wenn man nicht zugleich angäbe, wie die Beziehungen solcher Gesamtheiten lauten, die den Beziehungen zwischen Fourierschen Reihen in der klassischen Theorie analog sind.

Denken wir uns also eine zweite Größe  $y$  (z. B. etwa die Entfernung des Elektrons von einem gegebenen Punkt im Raum), die ebenfalls klassisch in eine Fourierreihe

$$(6) \quad y = y(n, t) = \sum_{\tau} y(n)_{\tau} e^{2\pi i \nu(n) \cdot \tau \cdot t}$$

entwickelbar wäre. Quantentheoretisch würde man auch hier wieder aus (1) und aus der Tatsache, daß Frequenz, Amplitude und Phase für  $y$  prinzipiell beobachtbar sein dürften, schließen, daß  $y$  repräsentiert wird durch eine Gesamtheit:

$$(7) \quad \mathbf{y} : (y(nm) e^{2\pi i \nu(nm)t}).$$

Allgemein wird man — und dies soll auch für Systeme von beliebig vielen Freiheitsgraden gelten — jede zu dem betreffenden Atomsystem gehörige quantentheoretische Größe  $z$ , sofern nur ihr klassisches Analogon in eine Fourierreihe entsprechend (2) entwickelbar ist, darstellen durch die Gesamtheit

$$(8) \quad \mathbf{z} : (z(nm) e^{2\pi i \nu(nm)t}).$$

Die denkbar einfachste kinematische Fragestellung ist offenbar die: Gegeben seien die  $x$  und  $y$  repräsentierenden Gesamtheiten; welche Gesamtheit stellt  $x + y$  und welche  $x y$  dar?

Die naturgemäße Antwort lautet offenbar (l. c. <sup>1</sup>):

$$\mathbf{x} + \mathbf{y} : ((x + y)(nm) e^{2\pi i \nu(nm)t}); \quad \mathbf{x} \cdot \mathbf{y} : ((xy)(nm) e^{2\pi i \nu(nm)t}), \text{ wobei}$$

$$(9) \quad (x + y)(nm) e^{2\pi i \nu(nm)t} = [x(nm) + y(nm)] e^{2\pi i \nu(nm)t},$$

$$(10) \quad (xy)(nm) e^{2\pi i \nu(nm)t} = \sum_k x(nk) y(km) e^{2\pi i [\nu(nk) + \nu(km)]t} \\ = \sum_k x(nk) y(km) e^{2\pi i \nu(nm)t}.$$

Die erste (9) dieser Relationen leuchtet ohne weiteres ein, die zweite scheint eine sinngemäße Folge von (1); in Analogie zur entsprechenden klassischen Formel wird man nämlich erwarten, daß auf der rechten Seite von (10) eine Summe steht von Produkten je zweier Glieder der Reihen (5) und (7), wobei diese Produkte der Summe sämtlich die gleiche  $e$ -Potenz enthalten sollen. Dies ist nach (1) naturgemäß durch Gleichung (10) zu erreichen. Da für alle zum selben Atomsystem gehörigen Gesamtheiten der exponentielle Faktor  $e^{2\pi i \nu(nm)t}$  derselbe ist, so kann man ihn der Einfachheit halber weglassen und die bisherigen Resultate in den Formeln zusammenfassen:

$$(11) \quad \begin{cases} \mathbf{x}: (x(nm)) \\ \mathbf{y}: (y(nm)). \end{cases}$$

$$(12) \quad (\mathbf{x} + \mathbf{y})(nm) = x(nm) + y(nm).$$

$$(13) \quad (\mathbf{xy})(nm) = \sum_k x(nk) y(km).$$

Diese in (11), (12), (13) enthaltenen Rechenregeln entsprechen vollständig den aus der Theorie der linearen Gleichungen wohlbekannten für Matrizen gültigen Rechenregeln (l. c. <sup>2</sup>). Man wird also eine quantentheoretische Größe mit einer (übrigens unendlichen) quadratischen Matrix vergleichen können. Für ihre Multiplikation gilt bekanntlich das distributive und das assoziative Gesetz:

$$(14) \quad \mathbf{z}(\mathbf{x} + \mathbf{y}) = \mathbf{zx} + \mathbf{zy},$$

$$(15) \quad (\mathbf{xy})\mathbf{z} = \mathbf{x}(\mathbf{yz}),$$

aber im allgemeinen nicht das kommutative Gesetz; also im allgemeinen:  $\mathbf{xy} \neq \mathbf{yx}$ ; die Forderung  $\mathbf{xy} - \mathbf{yx} = 0$  dürfte zum Spezialfall der klassischen Theorie zurückführen.

Irgendeine Funktion  $f(\mathbf{x}, \mathbf{y}, \mathbf{z})$  wird nach (12), (13) quantentheoretisch dann definiert werden können, wenn ihr klassisches Analogon in eine Potenzreihe nach  $\mathbf{x}, \mathbf{y}, \mathbf{z} \dots$  entwickelbar ist.

Zur Vervollständigung der kinematischen Gesetzmäßigkeiten sei noch hervorgehoben, daß die Relationen (5, 12, 13) auch (in etwas modifizierter Form) noch Gültigkeit behalten, wenn die zugrunde gelegte Bewegung nicht als periodisch betrachtet werden kann (l. c. <sup>1</sup>). Es tritt dann klassisch an Stelle der Fourierreihe das Fourierintegral; dem entspricht es, daß in der Matrix  $(x(nm))$  die Indizes  $n$  und  $m$  auch kontinuierliche Wertebereiche durchlaufen können; die Summe der rechten Seite von (13)

wird in diesen kontinuierlichen Wertebereichen durch ein Integral zu ersetzen sein.

Außer der für quantentheoretische Größen gültigen Algebra haben noch die Operationen der Differentiation für die Formulierung der mechanischen Gesetzmäßigkeiten eine entscheidende Bedeutung. Allerdings wird sich später herausstellen, daß der Prozeß der Differentiation nur künstlich in die Theorie eingeführt werden kann und daß eine andere Operation (vgl. § 3) das naturgemäße Analogon zur Differentiation der klassischen Theorie darstellt. Wir werden im folgenden für die Differentiation nach der Zeit in einfacher Analogie zur klassischen Theorie annehmen:

Wird eine quantentheoretische Größe  $z$  dargestellt durch die Gesamtheit

$$z : (z(nm) e^{2\pi i \nu(nm)t}) \text{ oder einfacher } (z(nm)),$$

so wird die Größe  $\dot{z} = \frac{dz}{dt}$  repräsentiert durch:

$$\dot{z} : (z(nm) 2\pi i \nu(nm) e^{2\pi i \nu(nm)t})$$

oder einfacher:

$$(16) \quad \dot{z} : (2\pi i \nu(nm) z(nm)).$$

Der Differentialquotient einer Funktion  $f(x, y, z \dots)$  nach einer der durch Matrizen repräsentierten quantentheoretischen Größen  $x, y, z \dots$  wird am einfachsten definiert werden können durch:

$$(17) \quad \frac{\partial f(x, y, z \dots)}{\partial x} = \lim_{\alpha \rightarrow 0} \frac{f(x + \alpha \cdot \mathbf{1}, y, z \dots) - f(x, y, z \dots)}{\alpha},$$

wobei  $\alpha$  eine Konstante,  $\mathbf{1}$  die „Einheitsmatrix“ bedeutet  $\mathbf{1} : (1(nm))$ , bei der alle Glieder außerhalb der Diagonale Null sind, während die Diagonalglieder sämtlich den Wert 1 haben:

$$\mathbf{1}(nm) = \delta_{nm} = \begin{cases} 1 & \text{für } n = m \\ 0 & \text{für } n \neq m. \end{cases}$$

Die Differentiation genügt offenbar den Beziehungen:

$$(17a) \quad \begin{aligned} \frac{\partial}{\partial x} (f + g) &= \frac{\partial f}{\partial x} + \frac{\partial g}{\partial x}, \\ \frac{\partial}{\partial x} (fg) &= \frac{\partial f}{\partial x} g + f \frac{\partial g}{\partial x}. \end{aligned}$$

Durch die Annahmen (5), (12), (13), (16), (17) scheinen sämtliche Rechenoperationen für quantentheoretische Größen definiert. Es entsteht die weitere Aufgabe, auf der Basis dieser kinematischen Relationen eine Quantenmechanik aufzubauen. Der leitende Gesichtspunkt dabei wird wieder entsprechend Bohrs Korrespondenzprinzip der möglichst enge Anschluß an die klassische Theorie sein müssen.

## § 2.

**Quantenmechanische Vertauschungsrelationen.**

Die Rechenregeln, die in der bisherigen Theorie bedingt-periodischer quantentheoretischer Probleme üblich waren<sup>8)</sup>, lassen sich folgendermaßen kurz skizzieren: Entsprechend den Gesetzen der Hamilton-Jacobischen Mechanik suche man (unter Vernachlässigung der Strahlungskräfte) als kanonische Variable die Winkelvariablen  $w_k (w_1 \dots w_f)$  bei einem Problem von  $f$  (Freiheitsgraden) und die kanonisch-konjugierten Wirkungsvariablen  $J_k (J_1 \dots J_f)$  auf. Die  $w_k$  sind lineare Funktionen der Zeit  $w_k = \nu_k t + \varphi_k$ , die  $J_k$  sind Konstante der Bewegung und genügen der Gleichung

$$\nu_k = \frac{\partial H}{\partial J_k}$$

( $H$  = Hamiltonsche Funktion). Dem Korrespondenzprinzip wurde Genüge geleistet durch die Annahme, daß ein stationärer Zustand charakterisiert sei durch  $J_k = n_k \cdot h$  ( $h$  bedeutet die Plancksche Konstante,  $n_k$  eine ganze Zahl), dann stimmte gerade die quantentheoretische Bohrsche Frequenzbedingung

$$\nu(nm) = \frac{H_n - H_m}{h}$$

( $H$  die Energie) im Limes  $h = 0$  und für hohe Quantenzahlen mit der klassischen Beziehung

$$\nu_k = \frac{\partial H}{\partial J_k}$$

überein.

Unter Benutzung dieser durch die letzten Beziehungen angedeuteten Korrespondenz soll jetzt das Verhalten des quantentheoretischen Ausdrucks  $\mathbf{x} \mathbf{y} - \mathbf{y} \mathbf{x}$  für hohe Quantenzahlen untersucht werden (l. c. <sup>3)</sup>). Im Grenzfall hoher Quantenzahlen wird man entsprechend dem Übergang zur klassischen Theorie (vgl. (2)) als Näherung setzen dürfen  $x(n, n - \alpha) = x(J)_\alpha$ , wo  $J_k = n_k \cdot h$  oder, was praktisch hier dasselbe bedeuten soll,  $J_k = (n_k + \alpha) h$ .

Wir befinden uns also in einem Gebiet, wo die Unterschiede zwischen Anfangs- und Endbahn relativ gering sind; in diesem Gebiet werden die Resultate der klassischen Theorie, wie die der bisherigen Quantentheorie näherungsweise richtig sein. Daher kann man die  $n_k$  als Quantenzahlen, die  $J_k$  als Wirkungsvariablen der klassischen Theorie,  $\alpha_k$  als die Nummer der Oberschwingung deuten. Wir denken uns also, wie schon durch die Bezeichnungsweise angedeutet, die Indizes  $n$  entsprechend den bisherigen quantentheoretischen Rechenregeln als  $f$ -dimensionale Mannigfaltigkeit von „Quantenzahlen“  $n_k (n_1 \dots n_f)$  geordnet.

<sup>8)</sup> Vgl. z. B. A. Sommerfeld, *Atombau und Spektrallinien*. 4. Aufl. Braunschweig, Vieweg, 1924. M. Born, *Vorlesungen über Atommechanik*. Berlin, Springer, 1924.

Dann ergibt sich:

$$(19) \quad x(n, n - \alpha) y(n - \alpha, n - \alpha - \beta) - y(n, n - \beta) x(n - \beta, n - \alpha - \beta) \\ = \{x(n, n - \alpha) - x(n - \beta, n - \alpha - \beta)\} y(n - \alpha, n - \alpha - \beta) \\ - \{y(n, n - \beta) - y(n - \alpha, n - \alpha - \beta)\} x(n - \beta, n - \alpha - \beta) \\ \approx h \cdot \sum_k \left\{ \beta_k \frac{\partial x(J)_{\alpha_k}}{\partial J_k} y(J)_{\beta_k} - \alpha_k \frac{\partial y(J)_{\beta_k}}{\partial J_k} \cdot x(J)_{\alpha_k} \right\}.$$

Nun ist aber

$$(20) \quad 2\pi i \beta_k \cdot y(J)_{\beta_k} \cdot e^{2\pi i w_k \beta_k} = \frac{\partial}{\partial w_k} \{y(J)_{\beta_k} e^{2\pi i w_k \beta_k}\},$$

wo die  $w_k$  wieder die zu den  $J_k$  kanonisch konjugierten Winkelvariablen bedeuten.

Daraus folgt mit (19):

$$(21) \quad \lim(\mathbf{x}\mathbf{y} - \mathbf{y}\mathbf{x}) = \frac{h}{2\pi i} \sum_k \left( \frac{\partial x}{\partial J_k} \frac{\partial y}{\partial w_k} - \frac{\partial y}{\partial J_k} \frac{\partial x}{\partial w_k} \right)$$

im Grenzfall „hoher Quantenzahlen“ oder  $\lim h = 0$ . In den  $x, y$  der rechten Seite ist durch die Schreibweise ausgedrückt, daß man hier von den Matrizen der Quantentheorie zu den Fouriergliedern der klassischen Mechanik übergehen kann. Denn im eben betrachteten Grenzfall entspricht je ein Glied der Matrix einem Fourierglied der klassischen Mechanik und kann näherungsweise diesem gleich gesetzt werden.

Die Summe der rechten Seite von (21) stellt das Jacobische Klammer-symbol dar:

$$(22) \quad [x, y] = \sum_k \left( \frac{\partial x}{\partial J_k} \frac{\partial y}{\partial w_k} - \frac{\partial y}{\partial J_k} \frac{\partial x}{\partial w_k} \right) = \sum_k \left( \frac{\partial x}{\partial p_k} \frac{\partial y}{\partial q_k} - \frac{\partial y}{\partial p_k} \frac{\partial x}{\partial q_k} \right),$$

wo  $p_k, q_k$  irgendwelche kanonische Variable bedeuten. Führen wir nun als quantentheoretische Klammersymbole die Ausdrücke

$$(23) \quad (\mathbf{x}, \mathbf{y}) = \frac{2\pi i}{h} (\mathbf{x}\mathbf{y} - \mathbf{y}\mathbf{x})$$

ein, so läßt sich Gleichung (21) schreiben:

$$(21a) \quad \lim(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = [x, y] \text{ für hohe Quantenzahlen.}$$

In der klassischen Theorie gelten für die  $[x, y]$  die Beziehungen:

$$(24) \quad \begin{aligned} \text{a) } [x + y, z] &= [x, z] + [y, z], \\ \text{b) } [x, y] &= -[y, x], \\ \text{c) } [xy, z] &= [x, z]y + x[y, z]. \end{aligned}$$

Ferner gilt

$$(25) \quad [q_r, q_s] = 0; \quad [p_r, p_s] = 0; \quad [p_r, q_s] = \delta_{rs} = \begin{cases} 1 & \text{für } r = s. \\ 0 & \text{für } r \neq s. \end{cases}$$

Wegen der Gleichungen (24) läßt sich klassisch das Symbol  $[x, y]$  ausdrücken durch  $[q_r, q_s]$ ,  $[p_r, p_s]$ ,  $[p_r, q_s]$ , wenn  $x$  und  $y$  als Potenzreihen in  $p$  und  $q$  darstellbar sind.

Die quantentheoretischen Klammersymbole zeigen nun eine weitgehende Analogie zu den Jacobischen Symbolen der klassischen Theorie.

Es gilt nämlich wegen (14) und (15):

$$(26) \quad \begin{aligned} \text{a)} \quad & (\mathbf{x} + \mathbf{y}, \mathbf{z}) = (\mathbf{x}, \mathbf{z}) + (\mathbf{y}, \mathbf{z}), \\ \text{b)} \quad & (\mathbf{x}, \mathbf{y}) = -(\mathbf{y}, \mathbf{x}), \\ \text{c)} \quad & (\mathbf{x}\mathbf{y}, \mathbf{z}) = (\mathbf{x}, \mathbf{z})\mathbf{y} + \mathbf{x}(\mathbf{y}, \mathbf{z}). \end{aligned}$$

Wieder kann hier, wenn  $\mathbf{x}$  und  $\mathbf{y}$  nach Potenzen der  $p$  und  $q$  entwickelt werden können,  $(\mathbf{x}, \mathbf{y})$  ausgedrückt werden durch die elementaren Symbole

$$(\mathbf{p}_r, \mathbf{p}_s), (\mathbf{q}_r, \mathbf{q}_s), (\mathbf{p}_r, \mathbf{q}_s).$$

Diese enge Verwandtschaft der klassischen Symbole  $[x, y]$  und der quantentheoretischen  $(\mathbf{x}, \mathbf{y})$ , zusammen mit Gleichung (21 a) legt die für alles folgende fundamentale Annahme nahe (l. c. <sup>2</sup>), <sup>3</sup>), <sup>4</sup>):

$$(27) \quad (\mathbf{p}_r, \mathbf{p}_s) = 0; \quad (\mathbf{q}_r, \mathbf{q}_s) = 0; \quad (\mathbf{p}_r, \mathbf{q}_s) = \delta_{rs}.$$

Durch diese Hypothese ist die Korrespondenzbeziehung (21 a) gesichert und eine vollkommene Analogie der  $(\mathbf{x}, \mathbf{y})$  zu den  $[x, y]$  hergestellt.

Die Gleichungen (27) entsprechen korrespondenzmäßig den „Quantenbedingungen“ der bisherigen Quantentheorie. Daß die Hypothesen (27) wirklich als neue unabhängige Annahmen erlaubt sind, daß sie also keine Widersprüche enthalten und die Lösungen des gestellten Problems eindeutig bestimmt machen, soll in § 5 gezeigt werden.

Man könnte auch quantentheoretisch die Symbole  $[\mathbf{x}, \mathbf{y}]$  gemäß Gleichung (22) einführen. Diese Symbole genügen dann den Gleichungen (24 a, b) und (25); Gleichung (24 c) ist wegen der Nichtgültigkeit des kommutativen Gesetzes in der Quantentheorie nur dann erfüllt, wenn  $\mathbf{z}$  eine lineare Funktion der  $p$  und  $q$  ist.

Es folgt aus dieser Überlegung ohne weiteres der Satz: Ist  $\mathbf{z}$  eine lineare Funktion der  $p$  und  $q$ , so gilt:

$$(28) \quad [\mathbf{x}, \mathbf{z}] = (\mathbf{x}, \mathbf{z}).$$

Es stellen aber, wie schon oben betont, die quantentheoretischen  $[\mathbf{x}, \mathbf{y}]$  nur künstliche Bildungen dar (was z. B. aus der allgemeinen Nichtgültigkeit von (24 c) hervorgeht); das sinngemäße Analogon zu den klassischen  $[x, y]$  sind die Symbole  $(\mathbf{x}, \mathbf{y})$ .

Den Gleichungen (27) (l. c. <sup>2</sup>), <sup>3</sup>), <sup>4</sup>), die man als quantenmechanische Vertauschungsrelationen bezeichnen kann, muß in der Quantenmechanik

eine viel allgemeinere Bedeutung zukommen, als den „Quantenbedingungen“ der bisherigen Theorie. Die Quantenbedingungen der bisherigen Theorie waren nur auf mechanische Probleme von bedingt-periodischem Charakter anwendbar und dienten dort dazu, aus der kontinuierlichen Mannigfaltigkeit möglicher Lösungen eine diskrete Anzahl quantentheoretischer Lösungen auszusondern. In der hier darzustellenden Theorie sind die Relationen (27) notwendig, um dem Problem der Integration der Bewegungsgleichungen einen eindeutigen Sinn zu geben, sie sollen für alle denkbaren Lösungen erfüllt sein, unabhängig davon, ob die Lösungen selbst periodischen oder nichtperiodischen Charakter tragen. Zugleich erscheinen die Gleichungen (27) als die exakte Formulierung des Bohrschen Korrespondenzprinzips. Übrigens lassen die Relationen (27) noch vom Standpunkt der Dispersionstheorie aus eine einfache physikalische Interpretation zu (l. c. <sup>1</sup>) und <sup>5</sup>).

### § 3.

#### Die kanonischen Bewegungsgleichungen; Energiesatz und Frequenzbedingung.

Zur Definition eines mechanischen Problems genügt in der klassischen Theorie die Angabe der Hamiltonschen Funktion  $H(p, q)$ . Die Bewegungsgleichungen lauten dann:

$$(29) \quad \dot{p}_k = -\frac{\partial H}{\partial q_k}; \quad \dot{q}_k = \frac{\partial H}{\partial p_k} \quad \text{oder} \quad \dot{p}_k = [H, p_k]; \quad \dot{q}_k = [H, q_k].$$

Es scheint die einfachste Annahme, diese Gleichungen direkt in die Quantenmechanik zu übernehmen (vgl. l. c. <sup>1-4</sup>):

$$(30) \quad \dot{p}_k = -\frac{\partial H}{\partial q_k} = [H, p_k]; \quad \dot{q}_k = \frac{\partial H}{\partial p_k} = [H, q_k]$$

oder vgl. (28):

$$(30a) \quad \dot{p}_k = (H, p_k); \quad \dot{q}_k = (H, q_k).$$

Auch hier ist zu betonen, daß der Gleichung (30a) vor (30) der Vorzug gegeben werden muß, da (30a) keine Differentialquotienten nach  $p$  und  $q$  enthält. In (30) und (30a) wurde außerdem bisher noch die Zusatzannahme gemacht (l. c. <sup>1</sup>), daß für ein gegebenes Problem die Energiefunktion  $H$  in kartesischen Koordinaten quantenmechanisch dieselbe Form haben solle, wie in der klassischen Theorie. Der physikalische Sinn dieser Zusatzannahme ist folgender: Die Form der Hamiltonschen Funktion ist im Prinzip durch Versuche mit freien Elektronen, durch Stoßversuche usw. unabhängig vom Spektrum experimentell prüfbar. Handelt es sich dabei z. B. um Versuche mit sehr schnellen Elektronen, so kann man, wie bisher, näherungsweise die Gesetze der klassischen Mechanik der Bestimmung von  $H$  zugrunde legen. Bei der Extrapolation der gefundenen Funktion  $H$

auf die Fälle, in denen die klassische Theorie nicht mehr näherungsweise gültig ist, wird die Form der Energiefunktion dann erhalten bleiben müssen (und daher gleich der Form der „klassischen“ Energiefunktion sein), wenn nur Produkte von vertauschbaren Größen in  $H$  vorkommen. Dies ist im allgemeinen in einem kartesischen Koordinatensystem der Fall, da in ihm die Energie additiv in zwei nur von den Variablen einer Sorte abhängige Teile  $H_1(\rho) + H_2(q)$  zerfällt.

Wir werden im folgenden die Gestalt der Hamiltonschen Funktion  $H$  ganz offen lassen und annehmen, daß sie durch Experimente oder quantenmechanische Überlegungen irgendwie gefunden sei.

Dann kann aus den quantenmechanischen Gleichungen (30) die zeitliche Konstanz von  $H$  sowie die Bohrsche Frequenzbedingung abgeleitet werden, wie folgt (l. c. <sup>2</sup>, <sup>3</sup>, <sup>4</sup>):

Führt man eine quantentheoretische Größe  $W$  ein, die mit den Termen  $T_n$  der Gleichung (1) zusammenhängt nach der Formel

$$(31) \quad W(nm) = \begin{cases} T_n \cdot h & \text{für } n = m, \\ 0 & \text{für } n \neq m, \end{cases}$$

so folgt aus (1), (16) allgemein:

$$(32) \quad \dot{x} = \frac{2\pi i}{h} (Wx - xW) = (W, x).$$

Die Bewegungsgleichungen (30), (30 a) gehen also direkt über in

$$(33) \quad \begin{aligned} (W, q_k) &= (H, q_k); & (W - H, q_k) &= 0; \\ (W, p_k) &= (H, p_k); & (W - H, p_k) &= 0. \end{aligned}$$

Da  $H$  eine Funktion der  $p$  und  $q$  ist, so folgt

$$(W - H, H) = 0; \quad (W, H) = 0$$

oder wegen (32):

$$(34) \quad \begin{aligned} \dot{H} &= 0, \\ H &= \text{konst.} \end{aligned}$$

und wegen (33):

$$(H(nn) - H(mm))q(nm) = (W(nn) - W(mm))q(nm),$$

d. h. (vgl. (31))

$$(35) \quad \frac{H(nn) - H(mm)}{h} = \nu(nm).$$

Die Gleichungen (34) und (35) enthalten den Energiesatz und die Frequenzbedingung der Quantenmechanik (l. c. <sup>2</sup>, <sup>3</sup>, <sup>4</sup>). Diese Resultate bedeuten, daß die in der hier vorzutragenden Theorie enthaltenen quantenmechanischen Gesetze bereits eine sinngemäße mathematische Formulierung der Grundpostulate der Quantentheorie ermöglichten. Es muß noch der Beweis nachgeholt werden, daß die Werte  $H(nn)$  allgemein sowohl eine diskrete wie eine kontinuierliche Mannigfaltigkeit bilden können; dann sind

alle Aussagen der quantentheoretischen Grundpostulate in der hier zu beschreibenden Theorie enthalten.

## § 4.

**Kanonische Transformationen.**

In der klassischen Mechanik ist ein System neu einzuführender Variabler  $P, Q$  dann kanonisch, wenn für dieses System gilt:

$$[P_r, P_s] = 0; \quad [Q_r, Q_s] = 0; \quad [P_r, Q_s] = \delta_{rs}.$$

Ein ganz analoger Satz gilt in der Quantenmechanik (l. c. <sup>2</sup>) und <sup>4</sup>):

Wenn ein System neuer Variabler  $P, Q$  den Bedingungen genügt:

$$(36) \quad (P_r, P_s) = 0; \quad (Q_r, Q_s) = 0; \quad (P_r, Q_s) = \delta_{rs},$$

so gelten für dieses System die kanonischen Gleichungen (30), vorausgesetzt, daß die Energie  $H$  nach Potenzen der  $P, Q$  entwickelbar ist.

Zum Beweise bemerken wir, daß sich bei Gültigkeit von (36) das Symbol  $(H, P_k)$  bzw.  $(H, Q_k)$  einerseits gemäß (32), (34), (35) interpretieren läßt als  $\dot{P}_k$  bzw.  $\dot{Q}_k$ , andererseits nach (28) als

$$[H, P_k] = -\frac{\partial H}{\partial Q_k}; \quad [H, Q_k] = +\frac{\partial H}{\partial P_k}.$$

Es entsteht jetzt das Problem, die allgemeinste kanonische Transformation der Quantenmechanik anzugeben, welche die Variablen  $p_k, q_k$  in neue Variablen  $P_k, Q_k$  überführt.

Eine sehr allgemeine derartige Transformation, welche die Gleichungen (27) invariant läßt, lautet (l. c. <sup>4</sup>):

$$(37) \quad \begin{cases} P_k = S p_k S^{-1}, \\ Q_k = S q_k S^{-1}, \end{cases}$$

wo  $S$  eine ganz beliebige quantentheoretische Größe bedeutet. Aus der Gültigkeit von (27) und (37) folgt in der Tat (36). Daß (37) auch die allgemeinste kanonische Transformation darstellt, konnte bisher nicht bewiesen werden.

Aus (37) folgt noch, wenn  $f$  irgendeine nach Potenzen von  $p, q$  entwickelbare Funktion bedeutet:

$$(38) \quad f(PQ) = S f(pq) S^{-1},$$

wobei  $f(PQ)$  aus  $f(pq)$  dadurch hervorgeht, daß  $p, q$  unter Beibehaltung der Funktionsform  $f$  durch  $P, Q$  ersetzt werden.

Die Wichtigkeit der kanonischen Transformationen beruht auf folgendem Satze: Sei  $p_k^0, q_k^0$  irgendein System von Variablen, das den Gleichungen (27) genügt, so kann das Problem der Integration der Bewegungsgleichungen (30) zurückgeführt werden auf das andere Problem (l. c. <sup>4</sup>):

Es ist eine Funktion  $S$  so zu bestimmen, daß

$$(39) \quad SH(\rho^0, q^0)S^{-1} = W = \text{konst.}$$

zu einer Diagonalmatrix wird; hierin soll  $H(\rho^0, q^0)$  aus  $H(\rho, q)$  hervorgehen, indem  $\rho, q$  durch  $\rho^0, q^0$  unter Beibehaltung der Funktionsform  $H$  ersetzt werden.

Ist eine solche Funktion  $S$  gefunden, so erhält man durch die Gleichungen:

$$(40) \quad \begin{cases} \rho_k = S \rho_k^0 S^{-1}, \\ q_k = S q_k^0 S^{-1} \end{cases}$$

direkt die Lösungen der Bewegungsgleichungen (30). (39) stellt das quantenmechanische Analogon dar zur Hamilton-Jacobischen partiellen Differentialgleichung.

$S$  entspricht in gewisser Weise der Wirkungsfunktion der klassischen Mechanik. Wir werden im folgenden (39) als die für das mechanische Problem „charakteristische Gleichung“ bezeichnen.

### § 5.

#### Lösung der charakteristischen Gleichung (l. c. 4)).

Wir nehmen im folgenden irgendwelche Matrizen  $\rho^0, q^0$ , die den Vertauschungsrelationen (27) genügen und sonst völlig willkürlich gewählt werden können, als gegeben an.

Es wird z. B. zunächst am einfachsten sein, für die  $\rho_k^0, q_k^0$  ( $k=1, \dots, f$ ) die Koordinaten eines Systems von  $f$  ungekoppelten harmonischen Oszillatoren zu nehmen. Dann sind die Gleichungen (27) sämtlich für die  $\rho^0, q^0$  erfüllt und wenn eine Transformation (39) angegeben werden kann, so ist dadurch auch der Beweis der Widerspruchsfreiheit von (27) nachträglich erbracht. Diese Wahl der Koordinaten von  $f$  ungekoppelten Oszillatoren als  $\rho^0, q^0$  entspricht in gewisser Weise der Einführung von Normalkoordinaten  $J, w$  in der klassischen Theorie; doch muß hier gleich hervorgehoben werden, daß ein direktes Analogon zu diesen Normalkoordinaten, also quantentheoretische Variable, bei denen die Variablen der einen Art konstant, die der anderen Art lineare Funktionen der Zeit sind, in der Quantenmechanik noch nicht gefunden ist.

Der eigentlichen Lösung von (39) soll eine kurze Diskussion der Eigenschaften der in der Quantentheorie gebrauchten Matrizen vorausgeschickt werden. Alle physikalischen Größen müssen reell sein. Dem entspricht es, daß die quantentheoretischen Größen stets durch Hermitesche Matrizen dargestellt werden. Eine Matrix  $q$  ist dann vom Hermiteschen Typus, wenn  $q(nm) = q^*(mn)$ . (\* bedeutet Übergang zur konjugiert komplexen Größe). Trotzdem wird sich gelegentlich die Einführung auch all-

gemeinerer Matrizen als nützlich erweisen. Jedenfalls aber müssen Größen wie  $\rho$ ,  $q$ ,  $H$  stets durch Hermitesche Matrizen dargestellt sein (l. c. <sup>2</sup>) u. <sup>4</sup>).

Die quantentheoretischen Matrizen sind stets unendlich; d. h. die Anzahl der durch Indizes  $n$ ,  $m$  charakterisierten Zustände ist stets unendlich. Dies folgt z. B. aus der Gleichung

$$(41) \quad \rho_r q_r - q_r \rho_r = \sum_k (p_r(nk) q_r(kn) - q_r(nk) p_r(kn)) = \frac{h}{2\pi i}.$$

Wäre die Anzahl der Zustände endlich, so würde die Summation über alle Zustände  $n$  der Gleichung (41) auf der linken Seite offenbar Null geben, da es bei einer endlichen Summe auf die Reihenfolge der Glieder nicht ankommt und sich daher die Glieder paarweise fortheben.

$$(42) \quad \sum_n \sum_k [p_r(nk) q_r(kn) - q_r(nk) p_r(kn)] = 0,$$

während die rechte Seite  $\sum_k \frac{h}{2\pi i}$  sicher einen endlichen Wert hat; also enthält die Annahme einer endlichen Anzahl „stationärer Zustände“ einen Widerspruch.

Zu jeder Matrix  $a: (a(nm))$  gehört eine bilineare Form (l. c. <sup>4</sup>):

$$(42) \quad A(st) = \sum_{nm} a(nm) s_n t_m$$

zweier Reihen von Variablen  $s_n, t_n$ .

Ist die Matrix von Hermiteschem Typus, d. h.

$$(44) \quad a(nm) = a^*(mn) \quad \text{oder} \quad a = \tilde{a}^*$$

(\* bedeutet Übergang zur konjugiert komplexen Größe; mit  $\tilde{\phantom{a}}$  bezeichnen wir diejenige Matrix, die aus der ursprünglichen durch Vertauschung der Indizes hervorgeht<sup>9)</sup>), so nimmt die Form  $A(st)$  reelle Werte an, wenn man für die  $t_n$  die zu  $s_n$  konjugiert komplexen Werte setzt.

$$(45) \quad A(ss^*) = \sum_{nm} a(nm) s_n s_m^*.$$

Nach diesen Vorbemerkungen behaupten wir: Das Problem der Auflösung der charakteristischen Gleichung (39) ist identisch mit dem Problem, die zu der Hermiteschen Matrix  $H(\rho^0 q^0): (H(nm))$  gehörige Form

$$\sum_{nm} H(nm) s_n s_m^*$$

auf Hauptachsen zu transformieren (l. c. <sup>4</sup>).

In der Tat, wenn eine orthogonale Transformation  $v$  der  $s_n$  in neue Variable  $t_n$  gefunden ist:

$$(46) \quad s_n = \sum_l v(ln) t_l,$$

<sup>9)</sup> Diese von der üblichen abweichende Bezeichnungsweise ist hier eingeführt, um mit den zugrunde liegenden Arbeiten (l. c. <sup>2</sup>) u. <sup>4</sup>) hinsichtlich der Bezeichnung in Übereinstimmung zu bleiben.

$$(47) \quad \begin{cases} \sum_l v(nl)v^*(nl) = 1, \\ \sum_l v(nl)v^*(ml) = 0 \quad \text{für } n \neq m, \end{cases}$$

$$\text{d. h.} \quad \mathbf{v} \cdot \tilde{\mathbf{v}}^* = 1,$$

derart, daß gilt:

$$(48) \quad \sum_{nm} H(nm) s_n s_m^* = \sum_n W(nn) t_n t_n^*,$$

so gibt die Annahme  $\mathbf{v} = \mathbf{S}$  direkt die Lösung von (39). Denn es gilt dann (vgl. (46), (47)):

$$(49) \quad \mathbf{v} = \mathbf{S}, \quad \tilde{\mathbf{v}}^* = \mathbf{S}^{-1},$$

$$(50) \quad \begin{cases} W(nn) = \sum_{lk} H(lk) v(nl)v^*(nk), \\ \text{d. h.} \\ \mathbf{W} = \mathbf{v} \cdot \mathbf{H} \cdot \tilde{\mathbf{v}}^* = \mathbf{S} \cdot \mathbf{H} \cdot \mathbf{S}^{-1}. \end{cases}$$

Die Energiewerte  $W_n = W(nn)$  der stationären Zustände erscheinen also direkt als die *Eigenwerte* der Hermiteschen Form  $H(nm)$ . Aus der Theorie dieser Formen kann man daher das Resultat entnehmen, daß zu einer unendlichen Hermiteschen Form — und mit einer solchen hat man es hier stets zu tun — im allgemeinen diskrete und kontinuierliche Folgen von Eigenwerten gehören. Das Termspektrum der Physik ist daher identisch mit dem mathematischen Spektrum der Hermiteschen Form, bestehend aus Punkt- und Streckenspektrum.

Was die Frage nach der Existenz der Lösungen (46), (47), (48) betrifft, so ist der Beweis hierfür geliefert nur für den Fall beschränkter Formen<sup>10)</sup>: Ist eine beschränkte unendliche Hermitesche Form:

$$\sum_{nm} H(nm) s_n s_m^*$$

gegeben, so gibt es stets eine orthogonale Transformation, welche diese Form überführt in:

$$(51) \quad \sum_{nm} H(nm) s_n s_m^* = \sum_n W t_n t_n^* + \int W(\varphi) t(\varphi) t^*(\varphi) d\varphi.$$

Für die genauere Diskussion der Frage, was zu verstehen sei unter einer orthogonalen Transformation für den Fall, daß ein Streckenspektrum auftritt<sup>11)</sup>, und für die Frage des Verhaltens der Lösungen  $\rho, q$  in solchen Fällen verweisen wir auf die betreffenden Arbeiten (l. c. <sup>4)</sup>).

Die in der Quantentheorie vorkommenden Formen  $H(nm)$  werden wohl im allgemeinen nicht zur Klasse der „beschränkten Formen“ ge-

<sup>10)</sup> Siehe z. B. D. Hilbert, Grundzüge einer allgemeinen Theorie der linearen Integralgleichungen.

<sup>11)</sup> Vgl. z. B. E. Hellinger, Crelles Journal 136 (1910), S. 1.

hören. Wir nehmen im folgenden an, daß sich die Resultate bei diesen allgemeinen Formen nicht wesentlich von den hier aus der Theorie der beschränkten Formen übernommenen Ergebnissen unterscheiden.

Die Hauptachsentransformation (51) kann prinzipiell durch folgende Methode aufgefunden werden:

Man sucht Lösungen der linearen Gleichungen mit unendlich vielen Unbekannten:

$$(52) \quad W v_k - \sum_l H(kl) v_l = 0.$$

Diejenigen Werte von  $W$ , für die solche Lösungen existieren, sind die Eigenwerte der Hermiteschen Form  $H(nm)$ . Seien  $W_n$  und  $W_m$  irgend zwei Eigenwerte, so gilt

$$(53) \quad \begin{cases} \text{a) } W_n v_{kn} - \sum_l H(kl) v_{ln} = 0, \\ \text{b) } W_m v_{km}^* - \sum_l H(kl) v_{lm}^* = 0. \end{cases}$$

Multipliziert man (53a) mit  $v_{km}^*$ , (53b) mit  $v_{kn}$  und summiert über  $k$ , so folgt wegen des Hermiteschen Charakters von  $H$ :

$$(54) \quad \begin{cases} (W_n - W_m) \sum_k v_{kn} v_{km}^* = 0. \\ \text{Normiert man dann die } v \text{ noch durch} \\ \sum_k v_{kn} v_{kn}^* = 1, \end{cases}$$

so gilt  $v \tilde{v}^* = 1$  und  $v$  stellt die Transformationsfunktion  $S$  dar (vgl. (49)).

Die Wichtigkeit der Gleichung (51) beruht wesentlich darauf, daß es Methoden gibt, die Eigenwerte der Form  $H(nm)$  zu bestimmen, ohne die Transformation  $v$  wirklich aufsuchen zu müssen. Im Falle Hermitescher Formen von endlich vielen Variablen sind die Eigenwerte Wurzeln einer algebraischen Gleichung. Bei Formen unendlich vieler Variablen kann man das Verfahren von Graeffe und Bernoulli<sup>12)</sup> benutzen. Die bisher nach den hier geschilderten Methoden behandelten Probleme, insbesondere die Paulische Theorie des Wasserstoffatoms (l. c. <sup>6)</sup>) scheinen allerdings zu zeigen, daß andere speziellere Methoden zum Aufsuchen der Eigenwerte erheblich dem eben angeführten allgemeinen Verfahren überlegen sind.

Bei der Transformation (51) kann der Fall mehrfacher Eigenwerte  $W_n$  auftreten; d. h. zu einem bestimmten  $W_n$  gibt es mehrere linear unabhängige Lösungssysteme  $v_{kn}$  der Gleichung (53). Dieser Fall ist analog zum Problem der Entartung in der klassischen Theorie; in der klassischen Theorie tritt Entartung ein, wenn eins oder mehrere der  $\nu_k$  verschwinden;

<sup>12)</sup> Vgl. z. B. Courant-Hilbert, Methoden der math. Physik. Berlin, Springer, 1925, S. 15.

dem entspricht hier nach (33), daß zwei oder mehrere  $W_n$  einander gleich werden.

Sei bei einem  $r$ -fachen Eigenwert ein System  $v_{kn}^{(1)} \dots v_{kn}^{(r)}$  von Lösungen der Gleichung (53) gegeben, so kann man durch lineare Kombinationen der  $v_{kn}^{(s)}$  beliebige neue Lösungssysteme  $v_{kn}^{(s)'}$  erzeugen, die nur der Bedingung (54) (Invarianz der Summe  $\sum_{s=1}^r v_{kn}^{(s)} v_{kn}^{(s)*}$  gegen die oben geschilderten Transformationen) unterworfen sind. Dem entspricht es, daß die Lösungen  $p, q$  (vgl. (40))

$$(55) \quad \begin{cases} p_k = \nu \rho_k^0 \tilde{\nu}^*, & p_k(ln)^{(s)} = \sum_{h,i} v_{ih} p_k^0(hi) v_{ni}^{*(s)} \\ q_k = \nu q_k^0 \tilde{\nu}^*, & q_k(ln)^{(s)} = \sum_{h,i} v_{ih} q_k^0(hi) v_{ni}^{*(s)} \end{cases}$$

unbestimmt werden. Durch Wahl eines anderen Systems linear unabhängiger  $v_{ni}^{*(s)}$  kann man von (55) wesentlich verschiedene Lösungen erhalten.

Dagegen sind die Quadratsummen

$$(56) \quad \begin{cases} \sum_{s=1}^r p_k(ln)^{(s)} p_k^*(ln)^{(s)} \\ \sum_{s=1}^r q_k(ln)^{(s)} q_k^*(ln)^{(s)} \end{cases}$$

wieder invariant gegen diese genannten Transformationen der  $v_{kn}^{(s)}$  unter sich (I. c. 4)).

Die eben geschilderte Unbestimmtheit der Lösungen (55) beim Auftreten mehrfacher Eigenwerte entspricht ganz der Unbestimmtheit, die in der klassischen Theorie bei Entartung stets auftritt. Die Invarianz der Quadratsummen (56) hat empirisch bei der Diskussion der sogenannten spektroskopischen Stabilität eine wichtige Rolle gespielt.

Die Vielfachheit eines Eigenwertes  $W_n$  bestimmt das statistische Gewicht des zu dem betreffenden Energiewerte gehörigen stationären Zustandes.

Durch die Gleichungen (53), (54) werden auch bei nicht entarteten Systemen (Nichtauftreten mehrfacher Eigenwerte) die Lösungen  $v_{kn}$  nur bis auf einen Faktor vom Absolutbetrage 1 der Form  $e^{i(\varphi_k - \varphi_n)}$  bestimmt sein. Ebenso sind auch die Lösungen  $p(nm), q(nm)$  nur bis auf Faktoren der Form  $e^{i(\varphi_k - \varphi_m)}$  bestimmt. Es bleibt also für jeden stationären Zustand eine Phasenkonstante willkürlich. Aus Analogie zur klassischen Theorie kann man vermuten, daß, abgesehen von dieser Unbestimmtheit, die Lösungen  $p, q$  bei nichtentarteten Systemen eindeutig durch die Bewegungsgleichungen und die Bedingungen (27) bestimmt sind. Ein Beweis für diese Vermutung ist bisher nicht erbracht worden.

## § 6.

## Störungstheorie (1. c. 4)).

Die Möglichkeit der Lösung der Bewegungsgleichungen durch Lösung der charakteristischen Gleichung (39) führt auch zu einer Störungstheorie, die der Störungstheorie der Hamilton-Jacobischen Mechanik weitgehend analog ist.

Nehmen wir an, die Energiefunktion  $H$  sei gegeben als Potenzreihe nach einem Parameter  $\lambda$ :

$$(57) \quad H(pq) = H_0(pq) + \lambda H_1(pq) + \lambda^2 H_2(pq) + \dots$$

Sei ferner eine Lösung  $p^0, q^0$  des durch  $H_0$  charakteristischen ungestörten Problems gegeben derart, daß  $H_0(p^0 q^0) = W_0$  eine Diagonalmatrix wird und für  $p^0, q^0$  die Gleichungen (27) erfüllt sind.

Dann suchen wir eine Funktion  $S$

$$(58) \quad \begin{cases} p_k = S p_k^0 S^{-1} \\ q_k = S q_k^0 S^{-1} \end{cases}$$

so zu bestimmen, daß

$$(59) \quad SH(p^0, q^0)S^{-1} = W$$

eine Diagonalmatrix wird. Wir versuchen den Ansatz

$$(60) \quad \begin{cases} S = 1 + \lambda S_1 + \lambda^2 S_2 + \dots, & \text{also} \\ S^{-1} = 1 - \lambda S_1 + \lambda^2 (S_1^2 - S_2) + \dots \end{cases}$$

und

$$(61) \quad W = W_0 + \lambda W_1 + \lambda^2 W_2 + \dots$$

Dann ergibt (59) durch Vergleichung der einzelnen Koeffizienten von  $\lambda, \lambda^2, \dots$  auf beiden Seiten die Näherungsgleichungen zur Bestimmung von  $S$ :

$$(62) \quad \begin{cases} H_0(p^0 q^0) = W_0 \\ S_1 H_0 - H_0 S_1 + H_1 = W_1 \\ S_2 H_0 - H_0 S_2 + H_0 S_1^2 - S_1 H_0 S_1 + S_1 H_1 - H_1 S_1 + H_2 = W_2 \\ \dots \\ S_r H_0 - H_0 S_r + F_r(H_0 \dots H_r, S_0 \dots S_{r-1}) = W_r. \end{cases}$$

Für den Fall, daß das Ausgangssystem nicht entartet ist, lassen sich diese Gleichungen ohne weiteres auflösen: Die erste Gleichung (62) ist von selbst erfüllt. Für die anderen bildet man den zeitlichen Mittelwert

$$(63) \quad \bar{F}_r = W_r \quad \text{oder} \quad F_r(nn) = W_r(nn),$$

und findet dann ohne weiteres die Lösung:

$$(64) \quad S_r(mn) = \frac{F_r(mn)}{h\nu_0(mn)} (1 - \delta_{mn}).$$



Zur Bestimmung der übrigen  $W_1(n+1, n+1)$  bis  $W_1(n+r, n+r)$  kann man wieder das Verfahren der Hauptachsentransformation (§ 5) anwenden.

Man suche die Lösungen der linearen Gleichungen mit  $r$  Unbekannten  $S_i$ :

$$(71) \quad W_1 S_k - \sum_l \bar{H}_1(kl) S_l = 0 \quad \begin{cases} k = n+1, \dots, n+r \\ l = n+1, \dots, n+r \end{cases}$$

auf. Dieses System wird lösbar sein für  $r$  Werte von  $W$ , die sich aus der Gleichung  $r$ -ten Grades

$$(72) \quad \begin{vmatrix} [W_1 - \bar{H}_1(n+1, n+1)] & -\bar{H}_1(n+1, n+2) \dots -\bar{H}_1(n+1, n+r) \\ -\bar{H}_1(n+2, n+1) [W - H_1(n+2, n+2)] & \dots -\bar{H}_1(n+2, n+r) \\ \dots & \dots \\ -\bar{H}_1(n+r, n+1) & \dots [W_1 - \bar{H}_1(n+r, n+r)] \end{vmatrix} = 0$$

bestimmen.

Die zu diesen  $r$  Werten  $W_1$  gehörigen Lösungen  $S_i$  geben dann analog zu (50) die noch fehlenden Komponenten von  $S_0$  und die Lösung von (69) an.

Ist die Bestimmung von  $W_1$  und  $S_0$  durchgeführt, so geschieht die Berechnung von  $S_1$  ganz analog zu Gleichung (64); verschwindende Nenner treten in der rechten Seite von (64) jetzt nicht auf, da wir in (69) nur über die Frequenzen der ungestörten Bewegung gemittelt und die zu den verschwindenden Frequenzen  $\nu(n+1, n+2)$  usw. gehörigen Glieder in (69) getrennt behandelt haben.

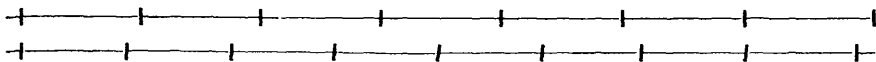
Das wesentlichste Ergebnis der quantentheoretischen Störungstheorie scheint uns, daß die bekannten Konvergenzeigenschaften der klassischen störungstheoretischen Reihen, die zu den berüchtigten Schwierigkeiten des Dreikörperproblems Anlaß geben, sich in den entsprechenden quantentheoretischen Reihen (64) wahrscheinlich nicht wiederfinden. Zwar tritt auch in (64) die Frequenz  $\nu(nm)$  im Nenner auf. Aber diese Frequenzen können im allgemeinen nicht durch Wahl hinreichend hoher geeigneter  $n, m$  beliebig klein gemacht werden.

Das Termspektrum wird ja im allgemeinen, wie beim Wasserstoffproblem, eine Häufung der Terme und Grenze im Endlichen haben. Daher wird es zwar möglich sein, durch Wahl zweier Terme in der Nähe der Grenze die  $\nu(n, m)$  klein zu machen, doch dies entspricht nur der bekannten Tatsache, daß die Perioden der weit außen liegenden Bahnen sehr lange werden und hat mit jener Konvergenzschwierigkeit nichts zu tun. Um den Unterschied zwischen klassischer und Quantentheorie deut-

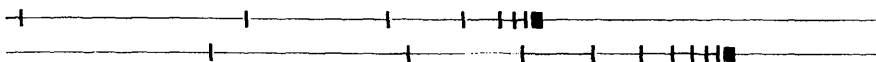
lich zu machen, zeichnen wir jeweils zwei die Terme bzw. die Frequenzen repräsentierende Punktreihen untereinander.

Der klassischen Theorie entspricht es, wenn die Punkte der Reihe äquidistant gewählt werden, da die Frequenzen der Oberschwingungen ganzzahlige Vielfache der Grundfrequenz sind.

### 1. Klassisch:



### 2. Quantentheoretisch:



Quantentheoretisch tragen wir die Punkte in einer etwa den Wasserstofftermen entsprechenden Reihe auf. Das Auftreten sehr kleiner Nenner, d. h. kleiner Kombinationsfrequenzen wird dann in der Figur dadurch veranschaulicht, daß zwei Punkte entsprechender Reihen sehr genau übereinander stehen. Nun leuchtet es anschaulich ein, daß man in der Reihe 1, wenn man die Reihe beliebig weit nach rechts verfolgt, immer wieder Punktpaare finden wird, deren Punkte sehr genau übereinander liegen, und zwar bei Nichtkommensurabilität der Grundfrequenzen beliebig genau. In der Reihe 2 aber ist es ebenso anschaulich evident, daß nirgends zwei Punkte sehr genau übereinander liegen. Es gibt hier eine *kleinste* Kombinationsfrequenz.

Allerdings sind auch quantentheoretisch die Verhältnisse in Wirklichkeit komplizierter, als die Figur sie darstellt, da wegen des kontinuierlichen Termspektrums Kommensurabilitäten auftreten können; auch werden neue Komplikationen entstehen, wenn die Häufungsstellen der beiden Punktreihen 2. zusammenfallen. Obwohl wir also von einer strengen Theorie der Konvergenzeigenschaften der quantentheoretischen Reihen (59), (60), (61) weit entfernt sind, scheint es doch wohl nicht zu kühn, wenn wir die Vermutung aussprechen, daß alle im Endlichen verlaufenden Bahnen der Quantentheorie auch periodischen Charakter tragen und daß die Schwierigkeiten des Dreikörperproblems in der quantentheoretischen Mechanik unbekannt sind.

## § 7.

### Die Impulssätze der Quantenmechanik; Kritik der Theorie.

Sei ein aus  $f$  Massenpunkten bestehendes System gegeben, wobei die kartesischen Koordinaten der Punkte mit  $x_k, y_k, z_k; p_{x_k}, p_{y_k}, p_{z_k}$ , be-

zeichnet werden sollen ( $k = 1, \dots, f$ ), so folgt aus den Bewegungsgleichungen (30), daß für ein abgeschlossenes System gilt:

$$(73) \quad \dot{p}_x = \dot{p}_y = \dot{p}_z = 0,$$

wobei

$$p_x = \sum_{k=1}^f p_{x_k}; \quad p_y = \sum_{k=1}^f p_{y_k}; \quad p_z = \sum_{k=1}^f p_{z_k}.$$

Denn auch in der Quantentheorie kann die potentielle Energie bei abgeschlossenen Systemen nur von den relativen Koordinaten  $x_i - x_k \dots$  abhängen.

Ein analoger Satz läßt sich für die Komponenten des Drehimpulses  $\mathfrak{M}$ :

$$(75) \quad \left\{ \begin{array}{l} M_x = \sum_k (y_k p_{z_k} - z_k p_{y_k}) \\ M_y = \sum_k (z_k p_{x_k} - x_k p_{z_k}) \\ M_z = \sum_k (x_k p_{y_k} - y_k p_{x_k}) \end{array} \right.$$

aufstellen. Da nämlich die Energiefunktion in kartesischen Koordinaten additiv in zwei Teile  $H = H_1(\rho) + H_2(q)$  zerfällt, die jeweils nur von den Variablen der einen Sorte abhängen, so wird nach (30) jedes Glied  $\dot{p}$  eine Funktion der  $q$  allein, jedes Glied  $\dot{q}$  eine Funktion der  $\rho$  allein. Also zerfällt der Wert von  $\dot{M}_x, \dot{M}_y, \dot{M}_z$ , wenn wir die  $\dot{p}, \dot{q}$  aus (30) einsetzen, nach (75) additiv in zwei Teile

$$(76) \quad \dot{M}_x = f_1(\rho) + f_2(q) \quad \text{usw.}$$

Da aber alle  $\rho$  untereinander, sowie alle  $q$  untereinander nach (27) vertauschbar sind, so wird der Ausdruck (76) Null unter denselben Bedingungen, wie der entsprechende Ausdruck in der klassischen Theorie. Daher sind bei abgeschlossenen Systemen die  $M_x, M_y, M_z$  zeitlich konstant.

Es kann wohl als ein wichtiger Erfolg der hier kurz dargestellten Theorie angesehen werden, daß sie einerseits durch alleinige Benutzung der beobachtbaren Frequenzen, Amplituden und Phasen eine enge Analogie ermöglicht zur klassischen wellentheoretischen Beschreibung der Strahlungsvorgänge (vgl. die Bohr-Kramers-Slatersche Theorie der Strahlung), daß sie andererseits wegen der Gültigkeit der Erhaltungssätze (Energie und Impulssatz vgl. § 3 und § 7) auch mit der Einsteinschen Lichtquantentheorie nicht in Widerspruch zu stehen scheint; es ist ferner befriedigend, daß die Grundpostulate der Quantentheorie im formalen Schema dieser Theorie einen sinngemäßen mathematischen Ausdruck finden<sup>13)</sup>.

<sup>13)</sup> Es mag hier darauf hingewiesen werden, daß die Theorie auch eine Reihe von Erfahrungstatsachen zu beschreiben gestattet, die nach der bisherigen Theorie nicht gedeutet werden konnten. Vgl. l. c. 4); 6).

Doch muß die hier beschriebene Theorie noch als unvollständig angesehen werden. Der eigentliche geometrische oder kinematische Sinn der Grundannahme (5) ist noch nicht restlos geklärt. Eine erhebliche Schwierigkeit liegt besonders darin, daß die Zeit in der Theorie scheinbar eine andere Rolle spielt und formal anders behandelt wird als die räumlichen Koordinaten. Der formale Charakter der Zeitkoordinate in dem mathematischen Gebäude der Theorie geht besonders deutlich aus der Tatsache hervor, daß in der Theorie bis jetzt die Frage nach dem zeitlichen Ablauf eines Ereignisses keinen unmittelbaren Sinn hat und daß der Begriff des früher oder später kaum exakt definiert werden kann. Trotzdem wird man diese Schwierigkeiten nicht als Einwand gegen die Theorie aufzufassen brauchen, da das Auftreten eben solcher Schwierigkeiten nach dem Wesen der für Atomsysteme gültigen Raum-Zeitverhältnisse durchaus zu erwarten war.

Göttingen, den 21. Dez. 1925, Institut für theor. Physik.

(Eingegangen am 21. 12. 1925.)