Ein statistisches Modell für den Grundprozeß in der Quantentheorie der Teilchen

Von Fritz Bopp

Aus dem Institut für theoretische Physik der Universität München

(Z. Naturforschg. **8a**, 228—233 [1953]; eingegangen am 15. November 1952)

Der Grundprozeß der Quantentheorie der Teilchen kann quantenstatistisch und korrelationsstatistisch beschrieben werden. Im letzten Fall handelt es sich um die Korrelation zwischen zwei (bzw. drei) Zeitreihen mit alternativen Merkmalen.

Eine Reihe unserer Untersuchungen[1] über die Statistik in der Quantentheorie geht von folgenden Antithesen aus:

1. Die Unschärferelation zieht nach verbreiteter, fast allgemein angenommener Auffassung Unanschaulichkeit und Nichtobjektivierbarkeit nach sich.
2. Die Unschärferelation enthält begrifflich nichts, was man sich nicht anschaulich und gegenständlich vorstellen könnte; denn sie macht nur eine Aussage über mittlere Schwankungsquadrate.

Wir zweifeln an der Endgültigkeit dieser Antithese und fragen darum: Gibt es Vorstellungen, die für die Quantentheorie spezifisch sind und dieser in ähnlicher Weise zugrunde liegen wie die Vorstellung des Massenpunktes der Newtonschen Mechanik?

Die Vergleichbarkeit, die wir mit dem Wort „ähnlich" heraufbeschwören, besteht nur in der erkenntnistheoretischen Relation zwischen unseren Vorstellungen von den Dingen und den Dingen selbst. Wir wollen keineswegs ein klassisches Modell der Quantentheorie entwickeln. Es ist von zahlreichen Autoren gezeigt worden, daß dies nicht möglich ist, ohne die Quantentheorie abzuändern. Wir zitieren diese Beweise, weil wir uns überzeugt haben, daß sie auch in unserem Zusammenhang kritischer Analyse standhalten.

Weder diese Beweise, noch unsere Untersuchung berühren die Frage, ob es klassische Theorien gibt, die zwar von der Quantentheorie verschieden sind, ihr aber so nahe kommen, daß die Unterschiede in den geläufigen Experimenten unterhalb der Grenze des Beobachtbaren liegen. Gegenstand unsrer Untersuchung ist allein die Quantentheorie in ihrer gegenwärtigen Form.

[1] Z. Naturforschg. **2a**, 202 [1947]; **7a**, 82 [1952].

In der Diskussion beschränken wir uns auf ein sehr *elementares* und fundamentales Problem, den *Grundprozeß*.

Darunter verstehen wir einen, auf den alle andern zurückgeführt werden können. Auf den Beweis, daß es einen solchen gibt, brauchen wir hier nicht einzugehen, weil es zur Behandlung des Themas genügt, einen beliebigen speziellen Quantenprozeß zu analysieren. Doch sei bemerkt, daß die Struktur der Quantentheorie der Wellenfelder oder der Quantentheorie der Teilchen, wie wir lieber sagen wollen, auf einen solchen Grundprozeß hinweist.

Nach der Graphenmethode von Feynman kann man das Rechenverfahren zur Behandlung von Quantenprozessen durch Liniennetze kennzeichnen.

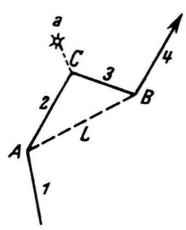

Abb. 1. Spezieller Graph.

Abb. 1 zeigt als Beispiel den berühmten Graph zur Berechnung der Mikrowellen-Feinstruktur des H-Atoms. Ein Elektron kommt aus der Richtung 1 an. Es emittiert im Punkt A ein (virtuelles) Lichtquant L und fliegt selbst in der neuen Richtung 2 weiter. Im Punkt C findet eine Wechselwirkung mit dem Kern statt, eine Art Photonenaustausch, in der Figur a genannt. Nach dem Akt fliegt das Elektron in der Richtung 3 weiter und absorbiert im Punkt B das von A kommende Lichtquant wieder. Der Vektor 4 stellt die Richtung des Elektrons nach allen Prozessen dar.

Wir kommen zu dem Modell, das wir diskutieren wollen, wenn wir diese Linien nicht nur als Symbole, sondern als reelle Weltlinien betrachten, die wegen der Möglichkeit von Erzeugungs- und Vernichtungsprozessen die topologische Struktur von Liniennetzen haben. Wie schon erwähnt, brauchen wir auf eine kritische Analyse dieser realen Auffassung der Graphen nicht einzugehen. Wir wollen aus dieser Auffassung nur eine Folgerung ableiten, die allein durch das, was sie leistet, begründet sein möge. Wenn die Graphen Weltliniennetze sind, dann muß alles Geschehen durch die Knoten des Netzes bestimmt sein. *Es muß aus lokalen Vernichtungs- und Erzeugungsprozessen folgen.* Für eine solche Auffassung spricht auch, daß die Operatoren der Quantentheorie der Teilchen bei Verwendung von Lagekoordinaten nur solche Prozesse beschreiben.

Nach diesen Feststellungen können wir unsere Aufgabe ganz konkret formulieren. Es soll gezeigt werden, daß die Quantentheorie der lokalen Erzeugungs- und Vernichtungsprozesse aus statistischen Vorstellungen folgt. Natürlich brauchen wir hierzu spezielle Voraussetzungen, die die Quantentheorie implizieren. Das Kriterium dafür, ob wir unser Ziel erreicht haben, ist nicht die Voraussetzungslosigkeit, sondern die Verträglichkeit der Voraussetzungen mit der Grundvorstellung.

Wir fassen einen einzigen Raumpunkt ins Auge und beobachten, ob in ihm ein Teilchen vorhanden ist oder nicht. Im Laufe der Zeit wird sich der Zustand des Punktes, besetzt oder unbesetzt zu sein, ändern. Wir wollen uns überlegen, welche Voraussetzungen es ermöglichen, das Gesetz dieser Änderung zu erfassen.

Einige dieser Voraussetzungen haben wir bereits beiläufig genannt. Die erste lautet:

I: *Es ist möglich, einen einzigen Raumpunkt ins Auge zu fassen.* Ein solcher Punkt ist experimentell durch ein Zählrohr, durch ein Nebeltröpfchen oder durch feinere Indikatoren bestimmt. Wir machen die Annahme, daß die Festlegung dieses Punktes mit beliebiger Feinheit möglich sei. Angesichts des Singularitätenproblems in der Quantentheorie der Teilchen ist es äußerst zweifelhaft, ob diese Annahme der Wirklichkeit entspricht. Aber sie ist geboten, da wir nur die gegenwärtige Situation der Quantentheorie analysieren wollen.

Die zweite Voraussetzung besteht in der Annahme, entscheiden zu können, der Punkt ist leer oder besetzt. Was dies bedeutet, wenn wir den Punkt durch einen bestimmten Indikator definieren, ist evident. Von hier aus ergibt sich mit der bereits genannten Einschränkung die Möglichkeit, den Grenzübergang zu einem idealen Punkt im Euklidschen Sinne zu machen. Wir wollen die Annahme noch verschärfen und sie in folgender Form aussprechen:

II: *Existenzbeobachtung ist möglich. Andere Beobachtungen gibt es nicht.*

Eine determinierte Beschreibung des elementaren Vorgangs des Auftauchens und Verschwindens in unserem Punkt könnte darin bestehen, eine unstetige Funktion der Zeit $\varepsilon(t)$ anzugeben, die in verschiedenen Zeiten die Werte 0 oder 1 annehmen kann, je nachdem der Punkt leer oder besetzt ist. Welche experimentellen Fähigkeiten würde die Bestimmbarkeit einer solchen Funktion voraussetzen?

Die Schwierigkeit der Bestimmung von $\varepsilon(t)$ besteht darin, daß einerseits sich diese Funktion auf den ungestörten Ablauf der Änderungen beziehen soll und daß andrerseits jede Beobachtung den Ablauf des sich selbst überlassenen Systems unkorrigierbar zerstört, in dem es einen neuen Vorgang an die Stelle des alten setzt. Oft sagt man, daß man Funktionen wie $\varepsilon(t)$ nur bestimmen kann, wenn man die Störungen beliebig klein zu halten vermag. Wenn diese Voraussetzung zutrifft, dann ist es offensichtlich, daß die Bestimmung keine Schwierigkeiten macht. Aber in der angegebenen Form ist die Aussage erstens nicht vollständig und zweitens nicht als Kriterium geeignet.

Letzteres ist nicht der Fall, weil vorausgesetzt wird, daß wir wissen, wie der ungestörte Ablauf der Änderungen aussieht. Die Unvollständigkeit ergibt sich daraus, daß eine determinierte Beschreibung unter geeigneten Voraussetzungen auch bei beliebig großer Störung möglich sein kann. Wir wollen deshalb von einer Voraussetzung auszugehen suchen, die unabhängig davon gilt, ob die Störungen klein oder groß sind.

III: *Der ungestörte Ablauf der Änderungen des Besetzungszustandes kann an demselben Vorgang nur in einem Augenblick beobachtet werden.*

Solange wir kein Kriterium für den ungestörten Ablauf haben, gilt diese Annahme nicht nur für das spezielle Problem der Quantentheorie. Sie ist vielmehr auch in der klassischen Physik zu beachten.

Weitergehende Aussagen hängen davon ab, ob es experimentell gelingt, vergleichbare individuelle Situationen herzustellen. Wenn wir solche Situationen reproduzieren können, läßt sich $\varepsilon(t)$ bestimmen, indem wir Einzelbeobachtungen zusammentragen, die zwar verschiedenen, aber vergleichbaren Situationen entstammen und darum wie von einer Situation herrührend behandelt werden können.

Wir gelangen so zu der Frage: Wie ist es möglich, die Reproduzierbarkeit zu erkennen? Wir stellen Situationen mit bestimmten Apparaten her, die wir in bestimmter Weise verwenden. Die Apparate und ihre Handhabung sind zur Reproduktion von Situationen geeignet, wenn gleichartige Beobachtungen in vergleichbaren Zeitpunkten stets das gleiche Ergebnis liefern. Das Charakteristikum der klassischen Physik ist, daß es in diesem Sinn reproduzierbare Situationen gibt und daß man darüber hinaus erkennt, was zwar für die Determinierung nicht wesentlich, aber für den Experimentalphysiker sehr angenehm ist, daß man die Störung durch die Beobachtung klein halten kann. Ob Reproduzierbarkeit besteht, kann nicht a priori gewiß sein. Für Elementarteilchen gilt als vierte Voraussetzung:

IV: *Individuelle Situationen sind nicht reproduzierbar.*

Diese Annahme ist für die Quantentheorie wesentlich und charakteristisch.

Hierauf beruht die Notwendigkeit einer statistischen Beschreibung. Sie besteht in der Synopsis einer Gesamtheit von Situationen. Wir beobachten in einem bestimmten Augenblick in jedem Punkt der Gesamtheit den Existenzzustand und können damit die relativen Häufigkeiten oder, was synonym ist, die Wahrscheinlichkeiten w_1 und w_2 für Nichtexistenz und Existenz in einem bestimmten Augenblick, etwa zur Zeit t angeben.

Dies gelingt durch Beobachtung der ungestörten Gesamtheit nur einmal. Genau wie im Fall individueller Situationen können wir den zeitlichen Ablauf nur bei Voraussetzung der Reproduzierbarkeit feststellen. Jetzt handelt es sich aber nicht mehr um die Reproduzierbarkeit individueller Situationen, sondern um die von Gesamtheiten. Objekt der Gesetzlichkeit in der Quantentheorie ist primär die Gesamtheit. Es tritt nur deshalb nicht die Gesamtheit an die Stelle des Individuums, weil Aussagen über die Gesamtheit nicht unmittelbar durch Beobachtung an der Gesamtheit, sondern durch Auszählung individueller Situationen in ihr gewonnen werden. Wir ergänzen daher Voraussetzung IV in folgender Weise:

V: *Gesamtheiten sind reproduzierbar. Es gibt Apparate und Handhabungen, die Gesamtheiten liefern, bei denen zu vergleichbarer Zeit ausgeführte, gleichartige Beobachtungen stets dieselben relativen Häufigkeiten oder Wahrscheinlichkeiten liefern.*

Reproduzierbare Gesamtheiten führen zu den Wahrscheinlichkeiten $w_1(t)$ und $w_2(t)$ als Funktionen der Zeit. Da $w_1 + w_2 = 1$ ist, genügt es, die Differenz

$$w(t) = w_1(t) - w_2(t) \tag{1}$$

zu betrachten. Wir nennen w „Wahrscheinlichkeitsspanne“ und betrachten fortan diese Wahrscheinlichkeitsspanne als eine experimentell bestimmte Funktion der Zeit.

Obwohl wir vorausgesetzt haben, daß es neben Existenzbeobachtungen keine andern gibt, ist mit $w(t)$ über die ungestörte Gesamtheit noch nicht alles gesagt, was wir sagen können. Denn neben der direkten Beobachtung kann es noch Beobachtungen mittels spezieller Instrumente geben, deren Funktion ist, daß sie den ungestörten Ablauf des Vorgangs, charakterisiert durch nebenstehende Horizontale, in definierter Weise durch einen modifizierten ersetzen, etwa derart, daß der ungestörte Ablauf bis zur Zeit t_0 oder bis zur Zeit t unverändert bleibt und von da an durch K_0 bzw. K in reproduzierbarer Weise ersetzt wird. Wir deuten das in Abb. 2 durch die Seitenwege K_0 und K an. Die Abbildung ist so zu verstehen, daß wir entweder den ungestörten Ablauf von $-\infty$ bis $+\infty$ betrachten oder nur bis zur Zeit t_0 und anschließend K_0 oder bis zur Zeit t und anschließend K. Nun beobachten wir zu den Zeiten $t_0 + \tau$ und $t + \tau$ die unveränderten Wahrscheinlichkeitsspannen

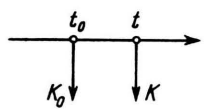

Abb. 2. Mittelbare Beobachtung.

$$w(t_0) = w, \; w(t) = w \tag{2}$$

und auf den Abwegen K_0 bzw. K zu den Zeiten t_0 bzw. t die veränderten Spannen

$$\overline{w}(t_0 + \tau) = w'(t_0) = \mathring{w}', \; \overline{w}(t+\tau) = w'(t) = w'. \tag{2a}$$

Wenn die Abänderungen definiert sind, die K_0 und K bewirken, können wir $\mathring{w}'$ und w' auf die Zeitpunkte t_0 und t zurückprojizieren [vgl. das erste Gleichheitszeichen in den beiden Gl. (2a)] und dürfen darum annehmen, daß diese Wahrscheinlichkeitsspannen selbst in gewisser Weise Aussagen über das ungestörte System machen. Wenn wir in t_0 und t die gleiche Apparatur verwenden und sie in derselben Weise handhaben, so müssen $\mathring{w}'$ und w' ähnlich wie $\mathring{w}$ und w in vergleichbarer Weise auf den ungestörten Vorgang bezogen sein. Wir sagen, daß wir in t_0 und t neben den Wahrscheinlichkeiten für die Existenz noch die für eine zweite Größe bestimmt haben, die wir mit Rücksicht auf ihre folgende Definition etwas formal „*Koexistenz*" nennen.

Der entscheidende Punkt ist, ob wir ein Kriterium dafür finden, daß K_0 und K dieselbe Messung liefern. Man muß irgendeine Relation zwischen K_0 und K herstellen. Diese kann sich nur in dem ausdrücken, was wir beobachten können. Das sind die Wahrscheinlichkeitsspannen in (2) und (2a). Wie diese Relation aussehen muß, kann nur die Erfahrung bestimmen. Wir behaupten, daß die folgende Forderung mit den Erfahrungen über Quantenvorgänge im Einklang ist:

VI: *In jedem Zeitpunkt gibt es zwei Beobachtungen, welche Wahrscheinlichkeitsspannen bestimmen, deren Quadratsumme eine Konstante der Bewegung ist. Die direkte Beobachtung liefert die Existenzspanne, diese mittels geeignetem Instrument die Spanne der Koexistenz.*

Bezeichnen wir die Spannen wie oben mit w und w', so gilt für die Zeiten t_0 und t:

$$k^2 = \mathring{w}^2 + \mathring{w}'^2 = w^2 + w'^2 = \text{const.} \tag{3}$$

Damit sind wir mitten in der Quantentheorie. Bilden wir nämlich die Matrizen:

$$\mathring{P} = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 1+\mathring{w} \,. & \mathring{w}' \\ \mathring{w}' & , \; 1-\mathring{w} \end{pmatrix}, \quad P = \begin{pmatrix} 1+w\,, & w' \\ w' & , \; 1-w \end{pmatrix}, \tag{4}$$

so haben diese gerade die Eigenschaften der statistischen Matrizen im Sinne v. Neumanns[2]. Sie sind symmetrisch, ihre Spur ist 1, und ihre Determinanten sind gleich. Es ist

$$\det \mathring{P} = \det P = \frac{1}{4}\,(1-k^2). \tag{4a}$$

Wir können sie daher durch eine orthogonale Transformation verbinden:

$$P = S\mathring{P}S^T, \; S = \begin{pmatrix} \cos\alpha\,, & \sin\alpha \\ -\sin\alpha\,, & \cos\alpha \end{pmatrix},$$

$$\sin 2\alpha = \frac{\mathring{w}'\,w - \mathring{w}\,w'}{\mathring{w}^2 + \mathring{w}'^2}. \tag{5}$$

Physikalische Größen werden nach Aussage der Quantentheorie durch symmetrische Matrizen F dargestellt. Es gibt in unserem Fall reeller Matrizen zwei unabhängige Größen:

$$F_1 = \begin{pmatrix} 1, & 0 \\ 0, & -1 \end{pmatrix}, \; F_2 = \begin{pmatrix} 0, & 1 \\ 1, & 0 \end{pmatrix}. \tag{6}$$

Ihre Mittelwerte zu den Zeiten t_0 und t berechnen sich quantentheoretisch aus den Gln.

$$\mathring{\bar{F}} = \text{Spur}\,(\mathring{P}F), \; \bar{F} = \text{Spur}\,(PF). \tag{7}$$

Hieraus folgt:

$$\mathring{\bar{F}}_1 = \mathring{w}, \; \mathring{\bar{F}}_2 = \mathring{w}'; \; \bar{F}_1 = w, \; \bar{F}_2 = w'. \tag{8}$$

Man erhält also gerade die oben angegebenen Wahrscheinlichkeitsspannen, so daß sich unser Modell den Gleichungen der Quantentheorie unterordnet.

Die Größen F_1 und F_2 sind *komplementär*. Das ergibt sich quantenmechanisch aus folgender Betrachtung. F_2 geht aus F_1 durch eine Orthogonaltransformation hervor: $F_2 = K^T F_1 K$ mit

$$K = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1, & 1 \\ -1, & 1 \end{pmatrix}. \tag{9}$$

Die Matrix K liefert mit Rücksicht auf $\Phi \to \Phi' = K\Phi$ als charakteristische Transformationen der Zustandsvektoren (Wahrscheinlichkeitsamplituden):

$$\begin{aligned} \Phi &= \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}; \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}; \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix}; \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}; \\ \Phi' = K\Phi &= \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix}; \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}; \begin{pmatrix} 0 \\ -1 \end{pmatrix}; \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}. \end{aligned} \tag{9a}$$

Zustände der Bestimmtheit gehen hiernach in solche völliger Unbestimmtheit über und umgekehrt. Somit stehen F_1 und F_2 in komplementärem Verhältnis.

In unserm Zusammenhang ist die direkte Analyse der Komplementärität von größerem Interesse. Abb. 3 zeigt eine Ebene, in der man die beiden Kennzahlen der Gesamtheit w und w' als Punkt

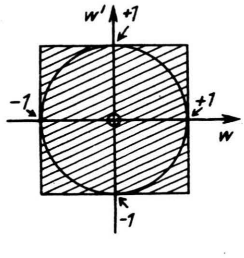

Abb. 3. Zustandsbereich.

darstellen kann. Da jede Wahrscheinlichkeitsspanne im Intervall $(-1, +1)$ variieren kann, ist der Definitionsbereich durch das schraffierte Quadrat bestimmt. Wenn wir annehmen, daß das Geschehen in der Gesamtheit durch w und w' vollständig defi-

[2] J. v. Neumann, Die mathematischen Grundlagen der Quantentheorie, Springer-Verlag 1932; vgl. auch M. Delbrück u. G. Molière, S.-B. preuß. Akad. Wiss., physik. math. Kl. 1936, Nr. 1.

niert ist, wie es Gl. (5) entspricht, sind die Koordinaten w, w' zur Zeit t Funktionen von $\mathring{w}, \mathring{w}'$ zur Zeit t_0. Diese Funktionen sind nach Gl. (5) linear. Beliebige lineare Transformationen

$$w = a + b\mathring{w} + c\mathring{w}', \qquad w' = a' + b'\mathring{w} + c'\,\mathring{w}' \tag{10}$$

bilden das Quadrat in ein Parallelogramm ab. Beide Flächen werden sich im allgemeinen überschneiden. Dabei gehen wohldefinierte, d. h. im Quadrat liegende Punkte in undefinierte, d. h. außerhalb liegende Punkte über und umgekehrt. Wenn anfangs alle Punkte des Quadrates, d. h. wenn alle denkbaren Zustände der Gesamtheit auch realisierbar sind, müssen alle Punkte des Quadrates in diesem bleiben. Das Bildparallelogramm muß also ganz im Innern des Quadrates liegen. Hieraus folgt, daß solche statistischen Prozesse notwendig *nichtumkehrbar* sind.

Umgekehrt folgt daraus bei linearer Transformation, wenn ein statistischer Prozeß umkehrbar ist, können nicht alle Gesamtheiten vorkommen. Nach Gl. (3) werden in Abb. 3 Kreise um den Ursprung in sich übergeführt. Dabei bleiben nur die Punkte, die innerhalb des Einheitskreises liegen, stets in dem Quadrat. Punkte innerhalb der Eckzwickel können aus dem Quadrat herauswandern und sind daher nicht realisierbar. Wiederum gilt, daß sich diese Aussage auf die Gesamtheit bezieht, nicht auf das Individuum.

Speziell folgt, daß die Eckpunkte des Quadrates, definiert durch $w = \pm 1$ und $w' = \pm 1$ keine möglichen Gesamtheiten darstellen. Da $|w| = 1$ Gewißheit bedeutet, gibt es keine Gesamtheiten, in denen die Zustände der Existenz und Koexistenz im ganzen System einheitlich bestimmt wären. Realisierbar können nur Punkte sein, für die

$$k^2 = w^2 + w'^2 \leq 1 \tag{11}$$

ist. Da wir Gesetze nur für die Gesamtheit und nicht für individuelle Systeme haben, ist es nicht nur *unvorstellbar,* sondern *unmöglich,* diese auf das Individuum anzuwenden. Es wäre daher völlig sinnlos, aus obiger Feststellung zu schließen, daß der individuelle Punkt im Raum nicht genau wisse, ob er besetzt oder leer sei.

Da $w = 0$ Gleichverteilung bedeutet, ist k ein Maß für den Ordnungszustand der Gesamtheit. Tatsächlich ist k aufs engste mit der Entropie[3] verwandt, die für eine quantenstatistische Gesamtheit, wenn man die Boltzmann-Konstante als Einheit wählt, durch

$$\eta = -\operatorname{Spur} P \log P \tag{12}$$

definiert ist. Da die Spur einer Matrix gleich der Summe ihrer Eigenwerte ist, folgt hieraus

$$\eta = \log 2 - \frac{1}{2}\left[(1+k)\log(1+k) + (1-k)\log(1-k)\right]. \tag{12a}$$

Forderung VI besagt hiernach, das Ordnungsmaß k (die Entropie η) ist eine Konstante der Bewegung. Diese Forderung ist offenbar mit dem Liouvilleschen Satz der statistischen Mechanik identisch. Das Maximum der Entropie tritt im Falle völliger Unordnung, also bei Gleichverteilung ein. Diese Übereinstimmung mit einem Satz der statistischen Mechanik kann natürlich nicht zu der Annahme verleiten, daß unser Modell sich doch auf ein klassisches reduzieren ließe. Es kann sich hier nur darum handeln, daß die Thermodynamik auch in der Quantentheorie gilt, eine Voraussetzung, die ja bekanntlich zu den historischen Grundlagen der Quantentheorie gehört.

Die Ordnungsmaße der Einzelgrößen $|w|$ und $|w'|$ sind gegenläufig. Wenn $|w|$ wächst, nimmt $|w'|$ ab und umgekehrt. Sie bezeichnen also komplementäre Größen, wie hier ganz unmittelbar ersichtlich ist. Der Zustand maximaler Ordnung ist durch $k = 1$ $(\eta = 0)$[4] definiert. In diesem Fall zieht vollständige Ordnung bei einer Größe Gleichverteilung bei der andern nach sich; denn aus $|w| = 1$ folgt im Falle $k = 1$, daß $w' = 0$ ist. Wieder erkennen wir die Komplementärität. Wenn $k = 1$ ist, gilt ferner

$$\det P = 0, \tag{13}$$

d. h. wir erhalten die statistische Matrix für einen reinen Fall. Die Punkte im Innern des Einheitskreises stellen Gemenge dar.

Zum Schluß erwähnen wir noch ein etwas allgemeineres Problem. Wir nehmen an, daß wir in jedem Zeitpunkt drei unabhängige Wahrscheinlichkeitsspannen w, w' und w'' bestimmen können, eine direkt und zwei mit Instrumenten, die wahlweise einschaltbar sind. Es soll möglich sein, die Apparate so auszuwählen, daß stets

$$k^2 = w^2 + w'^2 + w''^2 = \text{const} \tag{14}$$

[3] J. v. Neumann, l. c.[2].

[4] Nernstsches Theorem.

eine Konstante ist. Dann kann man den drei Wahrscheinlichkeitsspannen eine hermitesche Matrix zuordnen:

$$P = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 1+w, & w'+iw'' \\ w'-iw'', & 1-w \end{pmatrix}, \qquad (15)$$

aus der die Quantentheorie in komplexer Form genau so wie oben in reeller folgt. Wir begnügen uns mit diesem Hinweis; denn es genügt uns gezeigt zu haben, daß die Modellfähigkeit nicht auf die klassische Physik beschränkt ist.

Übergang von der mikrokanonischen zur kanonischen Gesamtheit mittels δ-Funktion

Von Fritz Bopp

Aus dem Institut für theoretische Physik der Universität München

(Z. Naturforschg. 8a, 233—234 [1953]; eingegangen am 10. Februar 1953)

Im folgenden wird gezeigt, daß die Diracsche δ-Funktion ein brauchbares Hilfsmittel ist zur Behandlung mikrokanonischer Gesamtheiten. Sie wird zur Ableitung der kanonischen Verteilung eines Makrosystems in einem Wärmebad aus einatomigen Molekülen benutzt.

Wir denken uns einen makrophysikalischen Körper, der, isoliert betrachtet, durch die Hamilton-Funktion $H_0(\Phi_0)$ beschrieben werde. Darin stehe Φ_0 für sämtliche kanonischen Koordinaten des Makrosystems. W. Gibbs hat eine Gesamtheit aus lauter solchen Makrokörpern untersucht und die Gleichgewichtsverteilung angegeben, die sich einstellt, wenn die Partner der Gesamtheit Energie austauschen und wenn dabei die Wechselwirkungsenergie nicht ins Gewicht fällt. Er erhält die kanonische Verteilung. Sie gibt also die Wahrscheinlichkeit der verschiedenen Zustände in einem Makrokörper an, der sich in einem Wärmebad befindet, welches in der Rechnung ein ideales Gas aus Makrokörpern ist. Aus thermodynamischen Gründen ist das Ergebnis für Makrosysteme in beliebigen Wärmebädern gültig, obgleich das Gibbssche Wärmebad nur in Gedanken existiert.

Wenn man die Partikel des Wärmebads mit in die Rechnung einführt, ist die Gesamtheit mikrokanonisch. Es entsteht die Aufgabe, die kanonische Verteilung für ein Makrosystem aus der mikrokanonischen Verteilung für Makrosystem + Wärmebad abzuleiten. Das soll mittels Diracscher δ-Funktion geschehen. Dabei wollen wir insofern etwas weniger formal als Gibbs vorgehen, als wir ein Wärmebad annehmen, welches aus einem idealen Gas aus einatomigen Molekülen bestehen möge.

Wenn $H'(\Phi_1)\ldots H'(\Phi_N)$ die Hamilton-Funktionen der Moleküle sind, in denen Φ_i die kanonischen Koordinaten des i-ten Moleküls bezeichnet, so erhalten wir als Verteilungsfunktion für das Makrosystem:

$$f(H_0) = C_1 \int \delta\big(E - H_0(\Phi_0) - H'(\Phi_1) - \ldots - H'(\Phi_N)\big)\, \mathrm{d}\Phi_1 \ldots \mathrm{d}\Phi_N. \qquad (1)$$

Der Faktor C_1 bestimmt sich aus $\int f(H_0)\,\mathrm{d}\Phi_0 = 1$ und braucht hier nicht angegeben zu werden.

Zur Auswertung dieses Integrals benützen wir die Fourier-Zerlegung der δ-Funktion

$$\delta(E) = \frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{+\infty} e^{ikE}\,\mathrm{d}k.$$

Hiernach lautet (1)

$$f(H_0) = \frac{C_1}{2\pi}\int_{-\infty}^{+\infty} \mathrm{d}k\, e^{ik(E-H_0)} \int e^{-ikH'(\Phi_1)}\,\mathrm{d}\Phi_1 \ldots \int e^{-ikH'(\Phi_N)}\,\mathrm{d}\Phi_N. \qquad (2)$$

Die Integrale über die Phasenvolumen $\mathrm{d}\Phi_1 \ldots \mathrm{d}\Phi_N$ hängen mit der Zustandssumme zusammen. Für einatomige Gase gilt:

$$Z(\beta) = \int e^{-\beta H'(\Phi)}\,\mathrm{d}\Phi \sim \beta^{-3/2}.$$

Damit lautet Gl. (2) mit einer neuen Konstante

$$f(H_0) = \frac{C_2}{2\pi}\int (ik)^{-3N/2}\, e^{ik(E-H_0)}\,\mathrm{d}k. \qquad (3)$$

Der Integrand ist im Nullpunkt extrem singulär. Der Integrationsweg ist unterhalb vorbeizuführen, damit $f(H_0)$ für $E - H_0 < 0$ verschwindet.