

Die Randbedingungen (8) auf der Oberfläche der Wigner-Seitz-Kugel verlangen für das Verhalten der Schrödinger-Funktionen im Nullpunkt

$$\begin{aligned} \alpha_s &= - \sum_{k=0}^{\bar{k}_s} k C_{sk0} / \sum_{k=0}^{\bar{k}_s} C_{sk0}, \\ \alpha_d &= - \sum_{k=0}^{\bar{k}_d} k C_{dk0} / \sum_{k=0}^{\bar{k}_d} C_{dk0} \end{aligned} \quad (\text{A } 7)$$

und für das Verhalten in unmittelbarer Nähe des Nullpunkts

$$\begin{aligned} C_{s0q} &= - \sum_{k=1}^{\bar{k}_s} \left(1 + \frac{k}{\alpha_s}\right) C_{skq} \quad \text{für } q=1, 2, \dots, Q_s, \\ C_{d0q} &= - \sum_{k=1}^{\bar{k}_d} \left(1 + \frac{k}{\alpha_d}\right) C_{dkq} \quad \text{für } q=1, 2, \dots, Q_d. \end{aligned} \quad (\text{A } 8)$$

Hinzu kommt, daß man von s-Elektronen erwartet, daß für sie in genügender Entfernung vom Ionenrumpf die Wahrscheinlichkeitsdichte ziemlich konstant verteilt ist. Dieses physikalische Verhalten kann man durch eine Bedingung der Art erfassen, daß die Differenz $|\psi_0(r)|^2 - |\psi_0(\varrho)|^2$ als Funktion von $\varrho - r$ erst mit einer ziemlich hohen Potenz beginnt; unter Benutzung von (6 a) läßt sich dies leicht explizit formulieren.

(Abgeschlossen am 3. 1. 55.)

⁷ Auch der Fall von Koeffizienten B_{skp} und B_{dkp} , die von λ_s bzw. λ_d unabhängig sind, wurde diskutiert, jedoch der Kürze und Übersichtlichkeit halber werde hier darauf verzichtet.

Würfel-Brettspiele, deren Steine sich näherungsweise quantenmechanisch bewegen

Von FRITZ BOPP

Aus dem Institut für Theoretische Physik der Universität München

(Z. Naturforschg. 10 a, 783—789 [1955]; eingegangen am 27. Juli 1955)

In früheren Arbeiten haben wir die Schrödinger-Gleichung in stochastischer Form dargestellt, d. h. als lineare Differentialgleichung in der Zeit für Wahrscheinlichkeiten¹. Hier wollen wir sie mit gewöhnlichen stochastischen Gleichungen vergleichen. Zunächst bestätigt sich das wohlbekannte Ergebnis, daß man beide nicht identifizieren kann². Denn nach den quantenmechanischen stochastischen Gleichungen verhalten sich Gesamtheiten wie *ungedämpfte* gekoppelte Oszillatoren und nach den gewöhnlichen stochastischen Gleichungen im besten Falle wie *gedämpfte*. Es gibt wahrscheinlich auch keine gewöhnlichen stochastischen Gleichungen, die die quantenmechanischen gleichmäßig gut approximieren. Doch wird gezeigt, daß man gewöhnliche stochastische Gleichungen angeben kann, die mit den quantenmechanischen in jedem experimentell geprüften Bereich beliebig gut übereinstimmen, weil in diesem die Relaxationszeiten so groß gegen die Schwingungsdauern sein können, daß man von der Dämpfung absehen darf.

1. Formulierung der Aufgabe

Wir betrachten folgendes Brettspiel: Das Spielbrett bestehe aus Z Feldern, die sich zu einem einfach zusammenhängenden Ring zusammenschließen. Auf diesen Feldern bewege sich eine Gibbs'sche Gesamtheit von N Spielsteinen, deren Vorrücken einzeln erwürfelt wird.

Die Spielregeln seien denkbar einfach und für ein wirkliches Spiel wenig abwechslungsreich. Jeder Sechser-Wurf gebe das Recht, ein Feld vorzurücken. Jeder andere Wurf bedeute, daß der Stein einmal

aussetzt. Danach hat jedes Feld das gleiche Recht. Der Raum ist homogen. Es gibt kein ausgezeichnetes Feld, auch kein Zielfeld.

Daher geht das Spiel nicht zu Ende. Unsere Frage ist darum höchst akademisch: Wie ändert sich die Verteilung einer Gibbs'schen Gesamtheit von Spielsteinen über die Felder von Zug zu Zug? Diese einfache Aufgabe ist in der stochastischen Literatur behandelt³.

Die Wahrscheinlichkeit, nach dem ν -ten Zug einen Spielstein im Felde n zu finden, bezeichnen wir mit

¹ F. Bopp, Z. Naturforschg. 2 a, 202 [1947], 7 a, 82 [1952], 8 a, 6, 228 [1953], 9 a, 579 [1954]; Z. angew. Phys. 6, 235 [1954]; Optik 11, 255 [1954]; S. B. Bayr. Akad. Wiss., Math. Naturw. Kl. 2, 1954; Z. Phys., im Druck.

² J. v. Neumann, Mathematische Grundlagen der Quantenmechanik, Berlin 1932, hier Kap. IV 2.

³ J. L. Doob, Stochastic Processes, New York—London 1953.



$w_n(\nu)$. Da sich jeder Stein stets in einem und nur in einem Felde befindet, muß die Summe

$$\sum_{n=1}^Z w_n(\nu) = 1 \quad (1)$$

sein. Durch das Würfeln erfahren die Wahrscheinlichkeiten eine lineare Transformation⁴:

$$w_m(\nu+1) = \sum_{n=1}^Z U_{mn} w_n(\nu). \quad (2)$$

Es ist die das Spiel kennzeichnende stochastische Transformation.

Da Gl. (1) vor und nach dem Prozeß gelten muß, sind die Elemente der Transformationsmatrix

$$U = (U_{mn})$$

nicht unabhängig voneinander. Es gelten vielmehr die Gleichungen

$$\sum_{m=1}^Z U_{mn} = 1. \quad (3)$$

Da ferner die Wahrscheinlichkeiten w_n wesentlich positive Größen sind und da sie in beliebigem Verhältnis stehen können, müssen außerdem die Ungleichungen bestehen:

$$U_{mn} \geq 0. \quad (4)$$

Die Gln. (3) und (4) enthalten die Bedingungen, welche gewöhnliche stochastische Transformationen charakterisieren. Sie besagen, daß die Matrixelemente U_{mn} ebenfalls als Wahrscheinlichkeiten aufgefaßt werden können; es sind die Übergangswahrscheinlichkeiten. Ein spezielles Element U_{mn} der Matrix $U = (U_{mn})$ bezeichnet die Wahrscheinlichkeit, einen Spielstein nach dem Zuge im Felde m zu finden, wenn er vorher in n gewesen ist.

In unserem Beispiel können nur die Matrixelemente U_{nn} und $U_{n+1,n}$ von 0 verschieden sein. Die Wahrscheinlichkeiten, daß ein Spielstein nach einem Wurf weiterwandert oder sitzen bleibt, sind nach den Spielregeln bzw.

$$p = 1/6, \quad q = 5/6. \quad (5)$$

Wir erhalten also die Transformationsgleichungen:

$$w_n(\nu+1) = q w_n(\nu) + p w_{n-1}(\nu). \quad (6)$$

⁴ Die Linearität ergibt sich aus der Annahme, daß die Gesamtheit vor und nach jedem Wurf eine statistische sein soll. Der Buchstabe U erinnere an „Übergangswahrscheinlichkeit“.

⁵ Speziell ist der Entropiesatz für beliebige Prozesse mit doppelt normierter Matrix bewiesen: K o d i H u s u m i nach Mitt. v. W a t a n a b e in einem jap. Lehrbuch: Theory of Probability and Statistics, Tokyo 1942; E. C. G. S t u e k -

Bei zyklischer Auffassung der Bezeichnungen bleibt sie auch für die Endpunkte richtig, weil dann $Z \equiv 0$ und $Z+1 \equiv 1$ (modulo Z) ist. Die Transformationsmatrix lautet also:

$$U = \begin{pmatrix} q & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & p \\ p & q & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 \\ 0 & p & q & 0 & \dots & 0 & 0 \\ 0 & 0 & p & q & \dots & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & q & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & p & q \end{pmatrix}. \quad (7)$$

Hierin ist nicht nur die Spaltensumme gleich 1, wie es nach Gl. (3) sein muß, sondern auch die Zeilensumme:

$$\sum_n U_{mn} = 1. \quad (8)$$

Solche doppelt normierten Matrizen spielen in der Physik eine besondere Rolle⁵. Sie haben die Eigenschaft, daß sie Gleichverteilungen stets in Gleichverteilungen überführen, und weiter, falls das System einfach ergodisch ist (s. Ziff. 2), daß alle Verteilungen asymptotisch der Gleichverteilung zustreben. Im folgenden wollen wir nur stochastische Prozesse vom Typus (8) betrachten.

2. Geometrische Darstellung stochastischer Prozesse

Zur Veranschaulichung des durch Z Wahrscheinlichkeiten definierten „Zustands einer Gesamtheit“ führen wir im $(Z-1)$ -dimensionalen Raum R_{Z-1} Z symmetrisch liegende Einheitsvektoren ein, die miteinander lauter gleiche Winkel einschließen. Sie spannen ein polydimensionales reguläres Tetraeder⁶ auf.

Bezeichnen wir diese Vektoren mit

$$\begin{aligned} \mathbf{e}_n \quad (n=1, 2, \dots, Z), \\ \text{so gilt} \quad \mathbf{e}_n^2 = 1, \quad \sum_m \mathbf{e}_m = 0, \\ \mathbf{e}_m \mathbf{e}_n = -1/(Z-1) \quad \text{für } m \neq n. \end{aligned} \quad (9)$$

Mit den Gewichten w_n in den Enden der Vektoren \mathbf{e}_n erhalten wir als Schwerpunkt

$$\mathbf{w} = \sum_n w_n \mathbf{e}_n. \quad (10)$$

k e l b e r g, Helv. Phys. Acta 25, 577 [1952]; vgl. auch W. P a u l i s Anm. in dieser Arbeit. Übrigens überträgt sich der Beweis auch auf nicht doppelt normierte Prozesse, wenn sie nur einfach ergodisch sind.

⁶ Das Wort „Tetraeder“ ist hier sprachlich schlecht, aber nicht durch das mißverständliche Wort „Polyeder“ ersetzbar. Es ist analog zu dem eingebürgerten Begriff „polydimensionaler Würfel“ gebildet.

Er charakterisiert den Zustand der Gesamtheit vollständig. Denn aus Gl. (10) ergeben sich mit Rücksicht auf (1) umgekehrt auch die Wahrscheinlichkeiten. Wie man leicht verifiziert, ist

$$w_n = \frac{Z-1}{Z} (w e_n) + \frac{1}{Z}. \quad (11)$$

Die Gleichverteilung ist hiernach durch $w=0$ gegeben. Die Wahrscheinlichkeiten w_n sind die baryzentrischen Koordinaten des Zustandspunktes w . Darum kann w niemals außerhalb des Tetraeders liegen. Im allgemeinen stellt jeder Punkt im Innern auch eine mögliche Gesamtheit dar. Hierzu s. letzten Abs. in diesem Abschnitt.

Lineare Transformationen bilden die Punkte dieses Basistetraeders auf ein anderes, im allgemeinen nicht mehr reguläres Tetraeder ab. Solange alle Punkte des Basistetraeders realisierbare Gesamtheiten darstellen, darf kein Punkt des Bildtetraeders außerhalb der Basis liegen. Die durch die Gln. (3) und (4) gekennzeichneten gewöhnlichen stochastischen Transformationen umfassen alle Transformationen mit dieser Eigenschaft.

Unter den verschiedenen Klassen stochastischer Transformationen⁷ ist die am meisten umfassende die der „einfach ergodischen“ Transformationen. Sie ist dadurch gekennzeichnet, daß sich die Folge der auseinander hervorgehenden Bildtetraeder auf einen Punkt im Innern des Basistetraeders zusammenzieht, bei den gleichverteilungsinvarianten Prozessen (mit doppelt normierter Matrix) also auf das Zentrum. Das Kriterium, welches gestattet, dieses Ergebnis einer Folge von unendlich vielen Transformationen schon beim ersten Schritt zu erkennen, lautet:

Eine stochastische Transformation ist einfach ergodisch, wenn sie keinen Teil der Tetraederoberfläche in sich abbildet⁸.

Statt des Beweises geben wir ein Beispiel für den Fall $Z=3$ und ein Gegenbeispiel. In diesen Fällen haben wir ein zweidimensionales „Tetraeder“, also ein gleichseitiges Dreieck. Obwohl die Gestalt der Dreiecke $1'2'3'$ in den Abb. 1 und 2 dieselbe ist, verhalten sich beide Transformationen im weiteren ganz verschieden. In Abb. 1 decken sich zwei Seiten: $1'3'$ liegt auf 12 , $1''3''$ auf $1'2'$. Aber $1'3'$ und $1''3''$ sind nicht Teile von 13 bzw. $1'3'$. Ebenso ist $1'$ nicht Teil von 1 , $1''$ nicht von $1'$. Darum ist die Transformation einfach ergodisch. Schon die dritte,

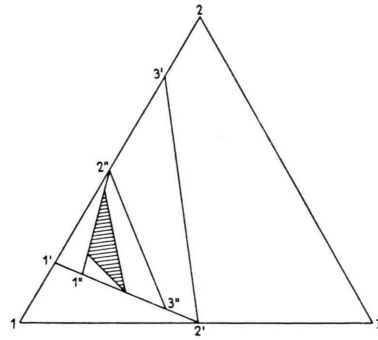


Abb. 1. Beispiel für eine Folge einfach ergodischer Transformationen.

nicht mehr numerierte Transformation führt von der Oberfläche weg. In Abb. 2 ist die Voraussetzung des Kriteriums offensichtlich nicht mehr erfüllt. Es gibt darum keinen inneren Konvergenzpunkt⁹.

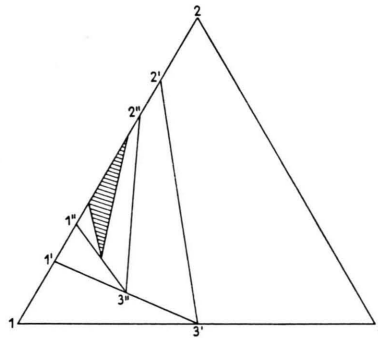


Abb. 2. Gegenbeispiel: Folge nicht einfach ergodischer Transformationen.

Das in Ziff. 1 definierte Spiel stellt ein einfach ergodisches System dar. Es führt im Falle $Z=3$ zu der in Abb. 3 angegebenen Transformationsfolge. Sie läßt erkennen, wie sich jede Gesamtheit zum Zentrum hinbewegt. Offensichtlich ist diese Bewegung mit einer Rotation verbunden. Denken wir uns diese aus zwei zueinander senkrechten Schwingungen zusammengesetzt, die in ihrer Phase gegeneinander um $\pi/2$ verschoben sind, so können wir das Ergebnis in einem Satz von allgemeiner Geltung formulieren: Jede statistische Gesamtheit, die einem gewöhnlichen stochastischen Prozeß unterworfen ist, gleicht einem System von gedämpften gekoppelten Oszillatoren.

⁷ J. L. Doob, l.c.³, s. Kap. V, 2.

⁸ Diese knappe Formulierung verdanke ich Herrn H. Richter.

⁹ Offensichtlich widerspricht Abb. 2 Gl. (10), da das Zentrum kein Fixpunkt ist. Auch Abb. 1 widerspricht ihr, aber in hebbarer Weise, wie Abb. 3 zeigt.

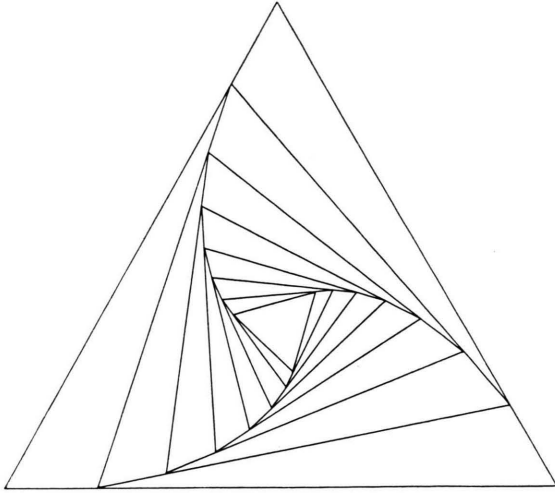


Abb. 3. Folge der stochastischen Transformationen des Brettspiels im Falle $Z=3$.

Rein aperiodische Fälle kommen vor¹⁰, ungedämpfte Oszillationen dagegen nicht, wie aus einem Satz von Gerschgorin hervorgeht¹¹. Für unsere gegenwärtige Untersuchung ist es wichtig, daß es bei gewöhnlichen stochastischen Prozessen im allgemeinen neben den Relaxationszeiten auch Schwingungsdauern gibt.

Andere Klassen stochastischer Prozesse spielen mit einer einzigen Ausnahme in der Physik keine Rolle. Bezüglich ihrer vollständigen Klassifizierung sei deshalb auf die Literatur verwiesen¹². Wenn ein Teil der Oberfläche in sich abgebildet wird und wenn dieser nicht mit der ganzen Oberfläche identisch ist, kann das Zentrum nur dann ein Fixpunkt sein, wenn es symmetrisch zum Zentrum liegende Teile gibt, die die der Symmetrie entsprechenden zugeordneten Transformationen erfahren, so daß die Welt in mehrere gleichartige und voneinander völlig isolierte Teile zerfällt. Es wäre müßig, von allen zu sprechen, um so mehr als wir nur in einem leben könnten.

Nur wenn die ganze Oberfläche auf sich abgebildet wird, also im Falle der Deckoperationen des polydimensionalen Tetraeders, haben wir einen weiteren, physikalisch wichtigen Fall vor uns, in dem

das Zentrum ein Fixpunkt ist; während alle andern Transformationen nur in einer Richtung möglich sind, weil die reziproke Transformation innere Punkte nach außen befördern würde, sind die Deckoperationen umkehrbar. Sie führen die Ecken des Tetraeders wieder in Ecken über, lassen also geordnete Gesamtheiten, bei denen nur eine Wahrscheinlichkeit von 0 verschieden ist, geordnet. Sie heißen darum „streuungsfrei“. Die Liouvillesche Gleichung der statistischen Mechanik liefert ein Beispiel für Transformationen dieses Typs, der bei endlicher Zellenzahl nur endlich viele Transformationen umschließt¹³.

Übrigens bilden diese Transformationen eine diskrete Untergruppe der Drehgruppe. Betrachten wir alle Transformationen der Drehgruppe oder auch nur einen kontinuierlichen Ausschnitt daraus, so sind die Transformationen nicht mehr stochastisch im gewöhnlichen Sinn. Denn nicht alle Punkte der Bildtetraeder liegen im Basistetraeder. Doch kann man diese Transformationen zulassen, wenn nicht alle Punkte im Basistetraeder realisierbare Gesamtheiten beschreiben und wenn die realisierbaren Gesamtheiten stets realisierbar bleiben. Als solche bieten sich z. B. die Punkte der dem Tetraeder einbeschriebenen Kugel an¹⁴.

Werden realisierbare Gesamtheiten nur durch Punkte dargestellt, die die Oberfläche der Inkugel nicht überschreiten, und bezeichnen alle Punkte der Inkugel realisierbare Gesamtheiten, so sind nicht nur die Deckoperationen, sondern alle Drehungen als stochastische Transformationen möglich. Wir sprechen in diesem Falle von „stochastischen Transformationen im weiteren Sinne“. An anderer Stelle haben wir gezeigt, daß die quantenmechanische Statistik Beispiele für solche verallgemeinerten stochastischen Prozesse liefert¹⁵.

Hier wollen wir einen möglichen Grund dafür angeben, warum in der Quantenmechanik nicht alle Gesamtheiten realisierbar sind. Während wir bei unsern früheren statistischen Betrachtungen den Boden der Quantenmechanik nicht verlassen haben, müssen wir bei der gegenwärtigen Frage einen

¹⁰ Symmetrische Matrizen und von ihnen nicht zu weit entfernte unsymmetrische Matrizen liefern stets den aperiodischen Fall.

¹¹ S. Gerschgorin, Bull. Acad. Sci. URSS, 7, 749 [1931]; A. Ostrowski, Compos. Math. 8, 219 [1951]; Herrn F. L. Bauer danke ich für den Hinweis auf diese Arbeiten und für Diskussionen über diesen Punkt.

¹² S. J. L. Doob, l.c. 3, 7.

¹³ Der Prozeß vom Liouvilleschen Typ ist ein spezieller zyklischer Prozeß. Andere zyklische Prozesse, s. Doob, Kap. V, 2, scheiden aus, weil sie zu einem ganz unrealistischen Hin- und Herspringen zwischen verschiedenen gleichartigen Welten führen.

¹⁴ Allgemein kommen nur solche Gebiete in Frage, die bei linearen Transformationen auf sich abgebildet werden können, also alle von Flächen zweiter Ordnung begrenzte.

¹⁵ l.c. 1, hier; Z. Naturforschg. 1954, Z. Phys. 1956.

Standpunkt einnehmen, der aus ihr herausführt. Dem entspricht, daß wir hier mit der Betrachtung gewöhnlicher stochastischer Prozesse begonnen haben.

3. Auflösung der stochastischen Gleichung und Diskussion der Lösung

Unter der Auflösung stochastischer Gleichungen verstehen wir die Berechnung der Wahrscheinlichkeiten $w_n(\nu)$ als Funktion der Anfangswerte $w_n(0)$, die im Falle des Spieles die Verteilung der Steine vor dem ersten Zug angeben. Hier behandeln wir speziell Gl. (6).

Es ist zweckmäßig, die Lösung nach den Eigenvektoren und Eigenwerten der stochastischen Matrix zu entwickeln¹⁶. Diese lauten

$$\psi_n^{(k)} = Z^{-1/2} \cdot \varepsilon^{kn}, \quad \lambda_k = q + p \varepsilon^{-k}, \quad (12)$$

$$\varepsilon = \exp(2\pi i/Z),$$

wie man leicht verifiziert. Die Eigenwerte liegen also in der komplexen λ -Ebene (s. Abb. 4) auf einem Kreis mit dem Mittelpunkt in p und dem Radius q , der die Ordinate $\Re \lambda = 1$ berührt. Auf diesem Kreis bilden die Eigenwerte ein reguläres Polygon mit Z Ecken, von denen eine im Punkte $\lambda = \lambda_0 = 1$ liegt.

Nach dem Entwicklungssatz der Matrizenrechnung können wir U in folgender Form darstellen

$$U_{mn} = \frac{1}{Z} \sum_k \lambda_k \varepsilon^{+k(m-n)}. \quad (13)$$

Die ν -te Potenz dieser Matrix lautet

$$(U^\nu)_{mn} = \frac{1}{Z} \sum_k \lambda_k^\nu \varepsilon^{+k(m-n)}. \quad (14)$$

Somit folgt aus Gl. (2), wenn wir dafür vorübergehend

$$w(\nu+1) = U w(\nu)$$

schreiben und daraus

$$w(\nu) = U^\nu w(0)$$

ableiten,

$$w_m(\nu) = \frac{1}{Z} \sum_n \left(\frac{1}{Z} \sum_k \lambda_k^\nu \varepsilon^{+k(m-n)} \right) w_n(0). \quad (15)$$

Das Ergebnis ist leichter zu überblicken, wenn wir die Eigenwerte nach Betrag und Phase zerlegen gemäß

$$\lambda_k = \gamma \exp(-i\varphi_k). \quad (16)$$

¹⁶ Aber diese Entwicklung ist bei unsymmetrischen Matrizen nicht immer direkt möglich.

Darin ist

$$\gamma_k^2 = q^2 + p^2 + 2qp \cos \frac{2\pi k}{Z} = 1 - \frac{5}{9} \sin^2 \frac{\pi k}{Z}, \quad (17)$$

und φ_k folgt aus

$$\operatorname{tg} \varphi_k = + \sin \frac{2\pi k}{Z} / \left(5 + \cos \frac{2\pi k}{Z} \right). \quad (18)$$

Hiermit lautet Gl. (15)

$$w_m(\nu) = \sum_n \left(\frac{1}{Z} \sum_k \gamma_k^\nu \exp \left(\frac{2\pi i k(m-n)}{Z} - i\nu \varphi_k \right) \right) w_n(0). \quad (19)$$

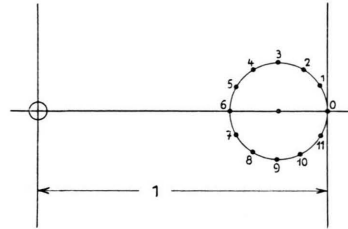


Abb. 4. Ebene mit Eigenwerten im Falle eines Spieles mit $Z=12$ Feldern.

Nach Abb. 4 sind alle γ_k außer γ_0 kleiner als 1, γ_0 ist gleich 1. Daraus folgt, daß im Limes $\nu \rightarrow \infty$ von der letzten k -Summe nur der Term $k=0$ übrig bleibt. Es ergibt sich also, da außerdem $\varphi_0 = 0$ ist,

$$\lim_{\nu \rightarrow \infty} w_m(\nu) = \frac{1}{Z} \sum_n w_n(0) = \frac{1}{Z}, \quad (20)$$

d. i., wie zu erwarten, die Gleichverteilung.

Für uns ist ein anderer Punkt wesentlicher. Betrachten wir die Anfangsverteilung

$$w_n(0) = \frac{1}{Z} \left(1 + \cos \frac{2\pi K n}{Z} \right), \quad (21)$$

in der $K=1, 2, \dots, Z-2$ oder $Z-1$ ist, so erhält man mit Rücksicht auf die Gleichung¹⁷

$$\sum_n \exp(-2\pi i k n/Z) w_n = \delta(k) + 1/2 \delta(k-K) + 1/2 \delta(k+K),$$

da $\gamma_{+k} = \gamma_{-k}$ und $\varphi_{+k} = -\varphi_{-k}$ ist,

$$w_m(\nu) = \frac{1}{Z} \left(1 + \gamma_K^\nu \cos \left(\frac{2\pi K m}{Z} - \varphi_K \nu \right) \right). \quad (22)$$

Es reproduziert sich also die Anfangsverteilung, nur daß sich die Cosinus-Welle um ein Stück fortbewegt hat und daß die Amplitude kleiner geworden ist.

¹⁷ $\delta(n) = 1$ oder 0, je nachdem $n \equiv 0$ oder $\neq 0$ (modulo Z) ist.

Identifiziert man die Zugnummer ν mit der Zeit, evtl. unter Einfügung einer hier allerdings unwesentlichen, aus Dimensionsgründen aber bequemen Zeitspanne τ , so daß $t = \nu\tau$ ist, so erhält man als Frequenz

$$\omega_K = \varphi_K / \tau \approx \pi K / 3 Z \tau, \text{ falls } K \ll Z \text{ ist, (23)}$$

und als Dämpfungskonstante (wiederum für den Fall $K \ll Z$)

$$\alpha_K = -\frac{1}{\tau} \ln \gamma_K \approx \frac{5 \pi^2 K^2}{18 Z^2 \tau}. \quad (24)$$

Hier kommt es nun auf die Zahlenwerte an. Wir wollen sie unter extremen Bedingungen betrachten. Wenn Z sehr groß ist und K mäßige Werte hat, ist γ_K nahezu gleich 1 und α sehr klein, φ_K und ω_K sind aber bereits merklich von 0 verschieden. Die Bewegung der Steine auf dem Spielfeld erfolgt also verhältnismäßig rasch, während die Dämpfung außerordentlich schwach ist. Setzen wir folgende Zahlen ein:

$$Z = 1000, \quad \nu = 3000, \quad K = 1, \quad (25)$$

so ist

$$\alpha = (5 \pi^2 / 18 \tau) \cdot 10^{-6}, \quad \omega = (\pi / 3 \tau) \cdot 10^{-3}. \quad (26)$$

Das Maximum der Cosinus-Funktion hat sich also nach 3000 Zügen um

$$m = \frac{Z \varphi_K \nu}{2 \pi K} = 500$$

Felder verschoben. Es ist gerade um das halbe Spielfeld herumgelaufen entsprechend der Wahrscheinlichkeit $1/6$, mit einem Zug um ein Feld vorzurücken. Die Dämpfung der Amplitude beträgt auf diesem Weg

$$\gamma_K^\nu = \left(1 - \frac{5 \pi^2}{18} \cdot 10^{-6}\right)^{3000} \approx 1 - \frac{5 \pi^2}{6} \cdot 10^{-3},$$

also nur etwa 0,8%. Man erkennt hieraus, daß Z in analogen physikalischen Problemen so groß sein kann, daß die Dämpfung gegenüber der Oszillation vernachlässigbar ist.

Das gilt aber offensichtlich nicht für alle K . Sobald sich der Kreis in Abb. 4 merklich von der Tangente $\operatorname{Re} \lambda = 1$ löst, wird die Dämpfung beträchtlich. Das Übergangsgebiet liegt etwa bei $K = Z^{1/2}$. Extrem ist der Fall $K = Z/2$. Dafür erhalten wir

$$\gamma_K = 2/3, \quad \varphi_K = 0.$$

Bereits nach $\nu = 12$ Zügen ist die Amplitude gemäß

$$\gamma_K^\nu = (2/3)^{12} \approx 1/128$$

auf weniger als 1% abgeklungen. Auch hier könnten die Zahlen noch viel auffälliger sein.

Wir stehen also vor folgender Situation: Zerlegen wir eine beliebige Anfangsverteilung nach Eigenvektoren, so klingen die einzelnen Bestandteile verschieden schnell ab. Die Relaxationszeiten können bei kosmologischen Werten von Z (sagen wir, ohne über diese Zahl spekulieren zu wollen, für $Z = 10^{40}$) außerordentlich verschieden sein, so daß nach kurzer Zeit viele Eigenlösungen nicht mehr merklich sind, während andere so lange leben, daß sie innerhalb erreichbarer Beobachtungszeiten nicht merklich abklingen.

Im Tetraederbild bedeutet dies: Nach relativ kurzer Zeit kommen nicht mehr alle Punkte vor, die Gesamtheiten repräsentieren. In jedem Augenblick gibt es Gesamtheiten, die schon ausgestorben sind, und andere, die noch lange nicht aussterben werden. Kritisch sind solche, die gerade im Begriffe stehen auszusterben. Es liegt nahe zu vermuten, daß die ausgestorbenen Zustände innerlich verwandt sind mit den nicht realisierbaren verallgemeinerten stochastischen Prozesse. An die Stelle der nicht realisierbaren Gesamtheiten würden in diesem Fall solche treten, die in unmerklich kurzer Zeit völlig abgeklungen sind.

Der Zusammenhang wird deutlich, wenn wir in Gl. (19) alle $\gamma_k = 1$ setzen. In diesem Falle tritt an ihre Stelle die Gleichung

$$w_m(\nu) = \sum_n \left(\frac{1}{Z} \sum_k \exp \left(\frac{2 \pi i k (m-n)}{Z} - i \varphi_k \nu \right) \right) w_n(0). \quad (27)$$

Die elementare Transformation von einem Zug zum nächsten lautet danach

$$U_{mn} = \frac{1}{Z} \sum_k \exp(-i \varphi_k) \varepsilon^{k(m-n)}. \quad (28)$$

Sie ist offensichtlich eine unitäre Transformation, tatsächlich sogar eine orthogonale, denn sie ist reell. Die Gleichung für die konjugiert komplexen Matrixelemente

$$U_{mn}^* = \frac{1}{Z} \sum_k \exp(+i \varphi_{-k}) \varepsilon^{-k(m-n)}$$

ist mit (28) identisch und geht sichtbar in diese über, wenn wir eine andere Summationsreihenfolge wählen und k durch $Z - k$ ersetzen. Damit beschreiben die Transformationen (27) Tetraederdrehungen. Sie stellen also stochastische Transformationen im weiteren Sinne dar. Gl. (28) hat also denselben

Charakter wie bei einem typisch quantenmechanischen Problem.

Hier müssen wir noch die Verwandtschaft zwischen den Transformationen (13) und (28) genauer beschreiben. Sicher kann man nicht davon sprechen, daß die Transformation (28) im Limes $Z \rightarrow \infty$ die stochastische Transformation (13) gleichmäßig gut approximiere. Denn es gibt immer Komponenten der Verteilung, für die die Relaxationszeiten mit den Schwingungsdauern vergleichbar werden. Aber es gibt weite Bereiche, in denen die Approximation sehr gut ist. Dazu gehören selbstverständlich die Verteilungen mit nicht zu großem K , das sind bei großen Werten Z noch durchaus respektable Werte, z. B. $K = Z^{1/2}$. Aber auch die Verteilungen, die bereits abgeklungen sind, können nicht zu Fehlern beitragen. Somit bleiben als Punkte, die merkliche Abweichungen ergeben können, nur

diejenigen übrig, die in dem Grenzgebiet zwischen den bereits abgeklungenen und den sehr langlebigen Zuständen liegen. Wir werden an anderer Stelle zeigen, daß deren Frequenzen immer noch so groß sein können, daß sie sich dem Zugriff des Experimentators entziehen.

4. Zusammenfassung

Wir haben gezeigt, daß stochastische Prozesse im allgemeinen Gleichungen für gedämpfte Schwingungen gekoppelter Oszillatoren genügen. Die Dämpfung kann für die praktisch vorkommenden Verteilungen so klein sein, daß wir von ihr absehen dürfen. In diesem Fall ergeben sich stochastische Gleichungen vom Oszillationstyp, dem wir sonst nur in der Quantenmechanik begegnen.

Quantenmechanische und stochastische Prozesse

Von FRITZ BOPP

Aus dem Institut für Theoretische Physik der Universität München

(Z. Naturforschg. 10 a, 789—793 [1955]; eingegangen am 27. Juli 1955)

Es wird gezeigt, daß es zu jedem quantenmechanischen Prozeß einen gewöhnlichen stochastischen Prozeß gibt, der zwar nicht mit jenem identisch ist, der sich aber von ihm in allen experimentell erreichbaren Bereichen nur unmerklich unterscheidet. Es ist also praktisch nicht möglich, experimentell zwischen einem in Strenge Quantengesetzen folgenden Prozeß und dem zugeordneten stochastischen Prozeß zu unterscheiden.

Wir betrachten eine Gibbs'sche Gesamtheit von Einzelteilchen in einem aus Z -Zellen bestehenden zyklischen Raum¹. In der Quantenmechanik wird eine solche Gesamtheit durch die statistische Matrix P beschrieben². Sie genügt der v. Neumann'schen Gleichung

$$i\dot{P} = HP - PH \quad (1)$$

in der H der Hamilton-Operator ist.

Hier wollen wir den quantenmechanischen Prozeß mit einem gewöhnlichen stochastischen Prozeß vergleichen. Dazu ist es zweckmäßig, die Quantenmechanik in vergleichbarer Form zu schreiben, also als ein System von Gleichungen für Wahrscheinlichkeiten. Wie kürzlich gezeigt³, eignen sich dazu die folgenden Observablen:

$$F_{mn} = a (\tilde{F}_m F_n + F_n \tilde{F}_m) + c (\tilde{F}_m + F_n). \quad (2)$$

¹ Betr. Wahl des Raums s. F. Bopp „Eine Art Phasenraum-Darstellung der Quantenmechanik“, Z. Physik, im Druck.

Darin definieren die Matrizen⁴

$$(F_n)_{\mu\nu} = \delta(n - \mu) \delta(n - \nu) \text{ gemäß} \quad (3)$$

$$w_n = \text{Spur}(PF_n)$$

die Ortswahrscheinlichkeiten und

$$(\tilde{F}_m)_{\mu\nu} = \frac{1}{Z} \varepsilon^{-m(\mu-\nu)} \text{ gemäß} \quad (4)$$

$$\tilde{w}_m = \text{Spur}(P\tilde{F}_m)$$

die Impulswahrscheinlichkeiten. Die Konstanten a und c berechnen sich aus Z gemäß:

$$a = 1/2(\sqrt{Z} + 1), \quad c = 1/2\sqrt{Z}(\sqrt{Z} + 1). \quad (5)$$

Die Matrizen ZF_{mn} sind idempotent und haben die Spur 1, so daß ihre Mittelwerte

$$W_{mn} = \text{Spur}(PF_{mn}) \quad (6)$$

wesentlich positiv sind. Auch sind alle kleiner als

² J. v. Neumann, Math. Grundl. d. Quantenmechanik, hier Kap. IV, s. auch l.c.¹, Anm. 1.

³ l.c.¹, Gl. (44).

⁴ $\varepsilon = \exp(2\pi i/Z)$.