BAYERISCHE AKADEMIE DER WISSENSCHAFTEN
MATHEMATISCH-NATURWISSENSCHAFTLICHE KLASSE

SITZUNGSBERICHTE

JAHRGANG

1962

MÜNCHEN 1963

VERLAG DER BAYERISCHEN AKADEMIE DER WISSENSCHAFTEN

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

Verallgemeinerte stochastische Prozesse

Ein Beitrag zur Quantenmechanik mit indefiniter Metrik

Von Fritz Bopp in München

Vorgelegt am 5. Oktober 1962

Seinem verehrten Lehrer und Freund, Herrn Professor Dr. Erwin Fues, zum siebzigsten Geburtstag in Dankbarkeit gewidmet

Summar:

Die kürzlich [1] in Anlehnung an die Quantenmechanik entwickelte Theorie verallgemeinerter stochastischer Prozesse umschließt nicht nur die gewöhnliche mathematische Statistik und die quantenmechanische Statistik. Sie enthält auch Quantenmechaniken mit indefiniter Metrik [2]. Die Gleichungen in diesen veränderten Quantenmechaniken stimmen formal mit denen der gewöhnlichen Quantenmechanik überein. Doch sind die hermiteschen und unitären Operatoren durch A-hermitesche bzw. A-unitäre zu ersetzen [5]. Wesentlich für die Begründung einer Quantenmechanik mit indefiniter Metrik ist die Wahl des Konvexkörpers $\{G\}$ der statischen Matrizen G. Er wird von allen Matrizen (mit Z Zeilen und Z Spalten)

$$G = \varphi\varphi^\dagger\, A \tag{*}$$

mit positiver A-Norm der Vektoren φ

$$\varphi^\dagger\, A\varphi = +1 \tag{**}$$

aufgespannt. Darin ist A eine Diagonalmatrix mit Elementen $+1$ und -1. Die Beschränkung auf Vektoren φ mit positiver A-Norm (trotz indefiniter Matrix A) ist möglich, weil Schrödingergleichungen mit A-hermiteschen Operatoren nicht aus dem durch (*) und (**) bestimmten Konvexkörper herausführen.

1. Fragestellung

Wie kürzlich gezeigt [1], führt die Quantenmechanik zu stochastischen Prozessen von bisher unbekannter Art. Sie sind dadurch charakterisiert, daß man den Zustand des stochastischen Systems in keinem Augenblick genau kennen kann.

Hier wollen wir solche verallgemeinerten stochastischen Prozesse losgelöst von der Quantenmechanik untersuchen, vor allem um zu prüfen, ob man auf diese Weise zu einer Quantenmechanik mit indefiniter Metrik [2] gelangen kann und wie diese gegebenenfalls aussehen muß. Natürlich kann man auf diesem Wege nur Aussagen über die Möglichkeit verallgemeinerter Quantenmechaniken und über die dabei zu beachtenden Prinzipien machen. Es liegt außerhalb der Reichweite unserer Methode, etwas über konkrete Anwendungen zu sagen.

Einstweilen betrachten wir nur Systeme mit endlich vielen Merkmalen. So schwierig die Probleme sein mögen, die Merkmalkontinua von der in Quantenfeldtheorien auftretenden Art mit sich bringen, so ist es doch für die Quantenmechanik charakteristisch, daß sich die ihr zugrunde liegenden Prinzipien bereits im Finiten (d. h. bei Verwendung endlicher Matrizen als Operatoren) formulieren lassen. Wir werden sehen, daß dies in gleichem Umfang auch für Quantenmechaniken mit indefiniter Metrik gilt.

2. Mittelwerte und Mittelungsgewichte

Wenn Merkmale nicht mit Sicherheit bestimmbar sind, wie in der Theorie verallgemeinerter stochastischer Prozesse vorausgegesetzt wird, besteht am Anfang eine gewisse Unsicherheit, für welche Größe Wahrscheinlichkeiten angegeben werden können. Doch ist es ein gemeinsames Kennzeichen aller statistischen Theorien, daß Mittelwerte existieren. Darum beginnen wir die Analyse mit diesen und sagen: Eine statistische Gesamtheit von gleichartigen Systemen (hier mit N Merkmalen) liegt vor, wenn zu jeder Merkmalfunktion f_k ($k = 1, 2 \ldots N$) ein Mittelwert $\langle f_k \rangle$ mit folgenden Eigenschaften gehört:

$$\begin{aligned} \langle f_k' + f_k'' \rangle &= \langle f_k' \rangle + \langle f_k'' \rangle, \\ \langle \lambda f_k \rangle &= \lambda \langle f_k \rangle, \\ \langle 1 \rangle &= 1. \end{aligned} \tag{1}$$

Die Mittelwerte sind hiernach lineare und normierte Funktionen von $f_1, f_2 \ldots f_N$.

Sie lassen sich auf die Mittelwerte

(2) $$g_e = \langle \delta_{ke} \rangle$$

der speziellen Merkmalfunktionen

(2a) $$f_k^{(l)} = \delta_{kl} = \begin{cases} 1 \text{ für } k = l, \\ 0 \text{ für } k \neq l \end{cases}$$

zurückzuführen. Denn aus

$$f_k = \sum_l \delta_{kl} f_l \text{ und } \sum_l \delta_{kl} = 1$$

folgen nach (1) die Relationen

(3) $$\langle f_k \rangle = \sum_l g_l f_l$$

und

(4) $$\sum_l g_l = 1.$$

Die statistische Gesamtheit ist also durch die N Mittelwerte g_l vollständig bestimmt. Nach den Gl. (3) und (4) sind die speziellen Mittelwerte zugleich die ,,Mittelungsgewichte" zur Berechnung der Mittelwerte beliebiger Merkmalfunktionen f_k. Wir können sie als Vektor in einem N-dimensionalen Raum darstellen:

(5) $$\mathfrak{g} = (g_1, g_2, \cdots g_N).$$

3. Die Mittelungsgewichte als Wahrscheinlichkeiten

Wir haben nur nach den Eigenschaften der Mittelungsdichten zu fragen. Im wohlbekannten Fall unterscheidbarer Merkmale sind die g_k Wahrscheinlichkeiten, für die

(6) $$0 \leq g_k \leq 1$$

ist, und aus empirisch gegebenen relativen Häufigkeiten ableitbar.[1] Alle g_k dieser Art, für die außerdem Gl. (4) gilt, sind möglich.

Die zugehörigen Vektoren $\mathfrak{g}$ enden also auf der Hyperebene durch die Einheitspunkte auf den N Koordinatenachsen und speziell in dem von ihnen aufgespannten (N—1)-dimensionalen Tetraeder, dessen Oberflächenpunkte einschließlich der Ecken dazugehören. Sie bilden also einen Konvexkörper, den wir mit $\{\mathfrak{g}\}$ bezeichnen. Mit anderen Worten heißt das: Liegen

$$\mathfrak{g}', \mathfrak{g}'' \in \{\mathfrak{g}\}, \tag{7}$$

so liegt auch

$$\alpha\mathfrak{g}' + \beta\mathfrak{g}'' \in \{\mathfrak{g}\}, \tag{7a}$$

falls

$$\alpha \geq 0, \quad \beta \geq 0, \quad \alpha + \beta = 1 \tag{7b}$$

ist. Durch diese Relationen wird der Prozeß der Zusammenschau von zwei statistischen Gesamtheiten beschrieben, der der Mischung, wie man auch sagt. Darin sind α und β zu den Teilchenzahlen der Gesamtheiten $\mathfrak{g}'$ und $\mathfrak{g}''$ proportional.

Der Konvexkörper $\{\mathfrak{g}\}$ ist abgeschlossen. Er enthält auch seine Ecken $\mathfrak{e}_l = (\delta_{kl})$, da $g_k = \delta_{kl}$ für alle l den Bedingungen (4) und (6) genügt. Die Ecken sind dadurch definiert, daß einerseits aus ihnen alle Gesamtheiten durch Mischung entstehen und daß sie andererseits selbst nicht durch Mischung entstehen können. In unserem Fall ist das geometrisch einfach zu sehen. Es gibt keine Strecke, die ganz in $\{\mathfrak{g}\}$ liegt und eine Ecke als inneren Punkt hat. Algebraisch folgt die Unzerlegbarkeit der Ecken daraus, daß für $k \neq l$

$$\alpha g_k' + \beta g_k'' = \delta_{kl} = 0$$

sein müßte, also entweder eine der beiden Wahrscheinlichkeiten g_k', g_k'' oder eine der beiden Mischungszahlen α, β negativ im Widerspruch zu (6) oder (7b).

---

[1] Zur Problematik des Zusammenhangs zwischen relativen Häufigkeiten und Wahrscheinlichkeiten nehmen die modernen Lehrbücher Stellung, z. B. das von H. Richter [3].

4. Verallgemeinerte Mittelungsgewichte

Wenn die Merkmale nicht mehr sicher unterscheidbar sind, können die Gewichte g_k nicht mehr unmittelbar aus Häufigkeiten abgeleitet werden. Sie sind nur indirekt zu erschließen. Darum kann man nicht mehr garantieren, daß sie positiv sind. Man darf also nicht mehr an Ungl. (6) festhalten.

An anderer Stelle [4] ist gezeigt worden, daß wir höchstens die Unterscheidbarkeit der Merkmale einbüßen, wenn wir Ungl. (6) durch

$$\mathfrak{g}' \cdot \mathfrak{g}'' \geq 0, \quad \text{falls} \quad \mathfrak{g}', \mathfrak{g}'' \in \{\mathfrak{g}\}, \tag{8}$$

ersetzen. In der Tat folgt (6) aus (8), sobald wir die Unterscheidbarkeit der Merkmale voraussetzen und annehmen, daß $(\delta_{kl}) \in (\mathfrak{g})$ liege.

Darin stellt $\{\mathfrak{g}\}$ wiederum den Körper aller möglichen Gewichtsfunktionen dar. Er wird im allgemeinen von dem der Merkmalwahrscheinlichkeiten verschieden sein. Doch muß er wegen der Mischbarkeit der Gesamtheiten den Bedingungen (7), (7a, b) genügen und daher konvex sein, was mit (8) verträglich ist.

Auch im Folgenden sollen die Ecken zum Konvexkörper gehören. Sofern es kein $\bar{\mathfrak{g}}$ außerhalb $\{\mathfrak{g}\}$ gibt, derart daß für alle $\mathfrak{g} \in \{\mathfrak{g}\}$ die Ungleichung $\bar{\mathfrak{g}} \cdot \mathfrak{g} \geq 0$ gilt, nennen wir den Konvexkörper maximal.

5. Matrixdarstellung

Zur Untersuchung der verschiedenen möglichen Konvexkörper ist es bequem, den Mittelungsgewichten und Merkmalfunktionen Matrizen zuzuordnen. Dabei gehen wir von einem beliebigen Satz von N Basismatrizen

$$B_1, B_2 \ldots B_N \tag{9}$$

mit folgenden Eigenschaften aus:

$$\begin{aligned} \text{Spur}\, B_k &= 1, \\ \text{Spur}\, B_k B_l &= \delta_{kl}. \end{aligned} \tag{10}$$

Definieren wir damit die „statistische Matrix“

$$G = \sum_k g_k B_k \tag{11}$$

und die „Merkmalmatrix“

$$F = \sum_k f_k B_k, \tag{12}$$

so folgen mit Rücksicht auf (10) an Stelle der Bedingung (4) und (8):

$$\begin{gathered} \text{Spur } G = 1, \\ \text{Spur } G' G'' \geq 0, \quad \text{falls} \quad G', G'' \in \{G\}, \end{gathered} \tag{13}$$

und aus der Mittelwertgleichung (3) erhält man:

$$\langle f_k \rangle \equiv \langle F \rangle = \text{Spur } G F. \tag{14}$$

Die Gl. (11) und (12) sind nach g_k bzw. f_k auflösbar:

$$g_k = \text{Spur } G B_k, \; f_k = \text{Spur } F B_k, \tag{15}$$

so daß man die Gewichts- und Merkmalfunktionen aus G und F zurückgewinnen kann.

Offensichtlich ist die Matrixdarstellung nicht an die Quantenmechanik gebunden. Sie umschließt auch gewöhnlich statistische Gesamtheiten und, wie wir zeigen wollen, allgemeinere als die der Quantenmechanik.

6. Zwei bekannte Beispiele

1. Beispiel:

Nach Gl. (10) genügen sämtliche Basismatrizen B_k den Bedingungen (13), also auch der von ihnen aufgespannte Konvexkörper $\{G\}$. Da im Einklang mit dieser Definition aus (10)

$$\text{Spur } G B_k = g_k \geq 0$$

folgt, erhalten wir den Konvexkörper der gewöhnlichen mathematischen Statistik. Er ist maximal, wie aus der letzten Ungleichung und ihrer Ableitung hervorgeht.

2. Beispiel:

Zum Konvexkörper der Quantenmechanik gelangen wir, wenn wir alle Matrizen

$$\varphi\,\varphi^\dagger \qquad \text{mit} \qquad \text{Spur}\,\varphi\,\varphi^\dagger = \varphi^\dagger\,\varphi = 1$$

als Ecken von $\{G\}$ betrachten. Er umschließt alle positiv definiten hermiteschen Matrizen mit der Spur 1. Denn einerseits ergeben sich diese aus den Ecken $\varphi\,\varphi^\dagger$ durch Mischung gemäß (7), (7a, b). Andererseits folgt aus

$$\text{Spur}\,\varphi\varphi^\dagger\,G = \varphi^\dagger G\,\varphi \geq 0,$$

daß es keine anderen statistischen Matrizen geben kann. Auch der Körper der positiv definiten hermiteschen Matrizen mit der Spur 1 ist abgeschlossen und maximal.[1]

Während der Ansatz im 1. Beispiel stets möglich ist, müssen wir im zweiten noch eine Bedingung beachten. Wenn alle $\varphi\,\varphi^\dagger$ mit $\varphi^\dagger\,\varphi = 1$ in $\{G\}$ enthalten sind, brauchen wir bei einer Zeilen- und Spaltenzahl Z in den Matrizen genau Z^2 linear unabhängige Basismatrizen, um alle G zu erfassen. Es muß also die Zahl N der Merkmale gemäß

$$N = Z^2$$

eine quadratische Zahl sein und sozusagen Z Orts- und Z Impulskoordinatenwerte liefern.

7. Konvexkörper mit indefiniter Metrik

Zu einem solchen gelangen wir, wenn wir von folgenden speziellen nichthermiteschen, sogenannten A-hermiteschen [6][2] Projektionsoperatoren als Ecken unseres Konvexkörpers ausgehen:

$$\varphi\,\varphi^\dagger\,A \in \{G\}, \quad \text{falls} \quad \varphi^\dagger\,A\,\varphi = +1. \tag{16}$$

[1] Daß wir mit diesem Konvexkörper die Quantenmechanik erhalten, zeigt sich u. a. darin, daß die Unschärferelation allein aus dem positiv definiten Charakter der statistischen Matrix folgt (l. c. [1]).

[2] Allgemein durch $F^\dagger = AFA$ definiert, so daß $(FA)^\dagger = (FA))$ ist.

Darin ist A eine hermitesche Diagonalmatrix[1] mit den Elementen $+1$ und -1:

$$(17) \qquad A = \mathrm{Diag}\,(+1 \cdot\cdot +1, -1 \cdot\cdot -1),$$

für die die selbstverständlichen, bei formalen Rechnungen aber bequemen Gleichungen gelten:

$$(18) \qquad A^\dagger = A^\mathsf{T} = A^* = A^{-1} = A.$$

Die Matrix A muß mindestens seinen Eigenwert -1 enthalten, sonst gelangen wir zur Quantenmechanik mit definiter Metrik.

Daß die Matrizen (16) Ecken sein können, folgt daraus, daß sie die Bedingungen (13) befriedigen. Einerseits ist nach Voraussetzung:

$$\mathrm{Spur}\; \varphi\,\varphi^\dagger A = \varphi^\dagger A\,\varphi = +1 > 0,$$

andererseits gilt für zwei beliebige Ecken:

$$\mathrm{Spur}\; \varphi_1\varphi_1^\dagger A\,\varphi_2\varphi_2^\dagger A = |\,\varphi_1^\dagger A\,\varphi_2\,|^2 \geq 0.$$

Damit sind die Bedingungen (13) auch für alle aus (16) durch Mischung entstehenden Matrizen erfüllt.

Neben den Vektoren $\varphi = \varphi_+$, für die die A-Norm $\varphi_+^\dagger A\,\varphi_+ = +1$ ist, gibt es auch $\varphi = \varphi_-$ mit $\varphi_-^\dagger A\,\varphi_- = -1$ und $\varphi = \varphi_0$ mit $\varphi_0^\dagger A\,\varphi_0 = 0$. Sie sorgen dafür, daß wir zu den Ecken in (16) noch in willkürlicher Weise Terme folgender Art hinzufügen können, ohne die Bedingungen (13) zu verletzen:

$$(16\text{a}) \qquad \varphi_+\varphi_+^\dagger A + a\,(\varphi_+'\varphi_+'^\dagger + \varphi_-''\varphi_-''^\dagger)\,A + b\,\varphi_0\varphi_0^\dagger A_\dagger \cdot\cdot \text{ mit } a, b \cdot\cdot \geq 0.$$

Da hierin die Koeffizienten a, $b \cdot\cdot$ beliebig groß sein können, wäre der Konvexkörper nicht mehr abgeschlossen. Es gäbe keine im Endlichen liegenden Ecken. Darum gehen wir von den wohl-

---

[1] Allgemeiner könnte man sagen: $A^\dagger = A$, $\det A \neq 0$, $A \neq 1$. Doch gelangt man von hier durch geeignete Transformationen, die die A-*Norm* $\varphi^\dagger A\varphi$, nicht aber A invariant lassen, zu (17) und (18). Wenn $\det A = 0$ ist, muß $A = \mathrm{Diag}\,(+ \cdots + 1, 0 \cdots 0, -1 \cdots -1)$ sein. Im wesentlichen gelten die weiteren Ergebnisse auch in diesem Falle, wenn man die Ecken des Konvexkörpers wieder durch Gl. (16) definiert. Natürlich muß man dann bei Umrechnungen berücksichtigen, daß es zu A keine reziproke Matrix gibt.

definierten Ecken (16) aus, welche analog zu denen der Quantenmechanik gebildet sind, müssen dabei aber darauf verzichten, daß unser Konvexkörper maximal ist.

Zum Schluß fragen wir: Wann gehört eine A-hermitesche Matrix G mit der Spur 1 zu unserem Konvexkörper? Nach dem Entwicklungssatz für hermitesche Matrizen gilt:

$$GA = \sum \gamma_n \psi_n \psi_n^\dagger \tag{19}$$

mit

$$GA\, \psi_n = \gamma_n \psi_n, \qquad \psi_m^\dagger \psi_n = \delta_{mn}, \qquad \gamma_n^* = \gamma_n. \tag{19a}$$

Hieraus folgt nach Gl. (18) für G:

$$G = \sum \gamma_n \psi_n \psi_n^\dagger A. \tag{20}$$

Die hermitesche Matrix vor dem Faktor A muß im Konvexkörper positiv definit sein:

$$\gamma_n \geq 0, \tag{21}$$

und GA darf nur Eigenlösungen enthalten, deren A-Norm gemäß

$$\psi_n^\dagger A \psi_n > 0 \quad \text{für alle } n \text{ in (20)} \tag{22}$$

positiv ist. Mit

$$N_n^2 = \psi_n^\dagger A \psi_n, \; N_n > 0, \tag{23}$$

und

$$\varphi_n = \frac{1}{N} \psi_n, \; g_n = N_n^2 \gamma_n \geq 0 \tag{24}$$

gelangen wir zur Normalform unseres Konvexkörpers

$$G = \sum_n g_n \varphi_n \varphi_n^\dagger A \tag{25}$$

mit

$$\varphi_n^\dagger A \varphi_n \approx +1, \; \sum g_n = 1, \; g_n \geq 0. \tag{26}$$

8. Schrödingersche und v. Neumannsche Gleichung

Der A-hermitesche Charakter von G darf durch die Bewegung nicht verändert werden. Ferner müssen die A-Normen invariant bleiben, damit die Ecken (16) stets in Ecken übergehen.

Bei Bewegungen müssen sich die statistischen Matrizen G linear transformieren, weil es zwischen den nur gedachten Systemen[1] in einer statistischen Gesamtheit keine Wechselwirkung geben kann. Da dabei Ecken etets Ecken bleiben sollen, erfahren auch die φ lineare Transformationen (l. c. [1]):

$$\varphi \to \varphi' = S\varphi. \tag{27}$$

Dabei muß die A-Norm invariant bleiben:

$$\varphi'^{\dagger} A \varphi' = \varphi^{\dagger} S^{\dagger} A S \varphi = \varphi^{\dagger} A \varphi$$

muß identisch in φ gelten, so daß

$$S^{\dagger} = A S^{-1} A, \tag{27a}$$

d. h. S A-unitär [5] sein muß. Für infinitesimale Transformationen $S = 1 + i\,\delta S$ folgt daraus:

$$\delta S^{\dagger} = A\,\delta S A, \tag{27b}$$

wonach δS A-hermitesch ist, im übrigen aber beliebig angenommen werden kann. Insbesondere kann $\delta S\,A$ negative Eigenwerte und Eigenvektoren mit nicht mehr positiver A-Norm haben.

Damit wird die in Ziff. 7 festgestellte Beschränkung in der Wahl von G zu einer Sache der Anfangsbedingungen. Liegt G zu irgendeinem Zeitpunkt in dem von (16) aufgespannten Konvexkörper, so bleibt es ständig in diesem. Und Ecken bleiben Ecken, Punkte auf der Oberfläche des Tetraeders verlassen diese nicht.

Nach (27) lautet die Schrödingergleichung wie gewöhnlich:

$$i\hbar\dot{\varphi} = H\psi. \tag{28}$$

---

[1] Die Glieder einer statistischen Gesamtheit sind Repräsentanten der verschiedenen mit unseren Informationen verträglichen Zustände eines einzigen wirklichen Systems.

Darin müssen wir nur für den Schrödingeroperator[1] H gemäß

$$H^\dagger = A H A \tag{28a}$$

einen A-hermiteschen Operator wählen. Entsprechend erhält man als Gleichung vom v. Neumannschen Typ

$$i \hbar \dot{G} = H G - G H. \tag{29}$$

9. Mittelwerte physikalischer Größen

Physikalische Größen sind als Merkmalfunktionen oder als Merkmalmatrizen gegeben. Sie müssen hier wie Schrödingeroperatoren A-hermitesch sein:

$$F^\dagger = A F A. \tag{30}$$

Das folgt u. a. daraus, daß Vorgänge in Meßapparaturen zur Bestimmung von F durch Schrödingeroperatoren, die mit F zusammenhängen, beschreiben werden.

Hier wollen wir nicht so weit ausholen und begnügen uns daher mit der Feststellung, daß wir nur bei Annahme von Gl. (30) zur selben Meßtheorie gelangen wie in der Quantenmechanik mit definiter Metrik. In diesem Fall folgt aus der Mittelwertgleichung

$$\langle F \rangle = \mathrm{Spur}\, G F, \tag{31}$$

wenn wir F ähnlich wie G in Gl. (20) gemäß

$$F = \sum_n F_n \psi_n \psi_n^\dagger A \quad \text{mit} \quad \psi_m^\dagger \psi_n = \delta_{mn} \tag{32}$$

nach den Eigenvektoren und Eigenwerten von $F A$ entwickeln, der Ausdruck

$$\langle F \rangle = \sum_n F_n \psi_n^\dagger A G \psi_n.$$

Dafür können wir schreiben:

$$\langle F \rangle = \sum_n F_n W_n. \tag{33}$$

---

[1] Von Hamiltonoperatoren sprechen wir nur im Heisenbergbild.

Die Eigenwerte F_n von FA sind die möglichen Meßwerte F, und die Gewichte

$$W_n = \psi_n^\dagger \, A G \, \psi_n \tag{33a}$$

sind stets positiv, weil AG wie GA eine positiv definite hermitesche Matrix ist. Tatsächlich sind die W_n Wahrscheinlichkeiten; denn es gilt neben

$$W_n \geq 0 \quad \text{auch} \quad \sum_n W_n = 1\,. \tag{33b}$$

Letzteres folgt durch Summation aus Gl. (33a) unter Verwendung der Vollständigkeitsrelation

$$\sum_n \psi_n \, \psi_n^\dagger = 1,$$

die unmittelbar aus (32) folgt. Zunächst erhält man

$$\sum_n W_n = \text{Spur}\, A G,$$

d. i. nach den Gl. (25) und (26) gleich:

$$\sum_n g_n \, \psi_n^\dagger \, A \, \psi_n = \sum g_n = 1\,.$$

10. Stationäre Lösungen

Statt das Anfangswertproblem zu lösen, kann man auch, sobald H zeitunabhängig ist, nach den Quantenzuständen fragen, für die

$$\psi \sim e^{-\frac{i}{\hbar} E t} \tag{34}$$

ist. Damit folgt aus (28) die zeitunabhängige Schrödingergleichung:

$$H \, \psi_n = E_n \, \psi_n\,. \tag{34a}$$

Neu ist, daß nicht alle Eigenlösungen mögliche Quantenzustände des Systems beschreiben können. Nach (16) sind nur diejenigen zugelassen, für die die A-Norm positiv ist:

$$\psi_n^\dagger \, A \, \psi_n > 0\,. \tag{35}$$

Daraus folgt, daß die Eigenwerte wie in der Quantenmechanik mit definiter Metrik reell sein müssen. Denn aus (34a) und der hermitesch konjugierten Gleichung

$$\psi_n^\dagger H^\dagger = \psi_n^\dagger AHA = E_n^* \psi_n^\dagger$$

folgt:

$$\psi_n^\dagger AH\psi_n = E_n \psi_n^\dagger A\psi_n = E_n^* \psi_n^\dagger A \psi_n, \tag{36}$$

woraus wegen der Ungl. (35) unsere Behauptung

$$E_n^* = E_n \tag{36a}$$

hervorgeht. Es ist durchaus möglich [5], daß Gl. (34a) komplexe Eigenwerte hat. Doch muß für die zugehörigen Eigenvektoren ψ_n nach Gl. (36) die A-Norm verschwinden, so daß die ψ_n nicht in unserem Konvexkörper liegen.

Unter den Eigenlösungen mit reellen Eigenwerten kommen stets solche mit positiver und mit negativer A-Norm vor (vgl. Ziff. 11). Sie sind wechselseitig A-orthogonal. Denn ähnlich wie (36) folgt:

$$\psi_m^\dagger AH \psi_n = E_n \psi_m^\dagger A \psi_n = E_m \psi_m^\dagger A \psi_n. \tag{37}$$

Wenn im Falle $m \neq n$ auch $E_m \neq E_n$ ist, ergibt sich unmittelbar, sonst nach Orthogonalisierung mit dem Schmidtschen Verfahren:

$$\psi_m^\dagger A \psi_n = 0 \text{ für } m \neq n. \tag{37a}$$

Unter den Eigenlösungen mit reellem Energiewert gehören nur diejenigen unserem Konvexkörper an, deren A-Norm positiv definit ist, die sich also gemäß

$$\psi_n^\dagger A \psi_n = 1 \tag{37b}$$

normieren lassen. In Quantenmechaniken mit indefiniter Metrik ist also das System der physikalisch zulässigen Eigenlösungen sicher nicht immer vollständig und tatsächlich, wie wir gleich sehen werden, stets unvollständig.

11. Unvollständigkeit der Eigenfunktionen

An einfachen Beispielen kann man sehen, daß es A-hermitesche Matrizen gibt, die lauter reelle Eigenwerte haben. Sie können aber nicht alle eine positive A-Norm haben. Denn wäre für alle ψ_n:

$$\psi_m^\dagger A \psi_n = \delta_{mn}, \tag{38}$$

so ergäbe sich bei Verwendung der zu ψ_n orthogonalen Vektoren φ_n, für die

$$\psi_m^\dagger \varphi_n = \varphi_n^\dagger \psi_m = \delta_{mn}, \quad \sum_n \varphi_n \psi_n^\dagger = \sum_n \psi_n \varphi_n^\dagger = 1$$

gilt, wenn wir (38) von links mit φ_m und von rechts mit φ_n multiplizieren und über m und n summieren:

$$A = \sum \varphi_m \varphi_m^\dagger. \tag{38a}$$

Das ist ein Widerspruch; denn links steht eine indefinite und rechts eine definite Matrix.

Auf ganz entsprechende Weise erhält man aus der stets möglichen Gleichung

$$\psi_m^\dagger A \psi_n = \sigma_m \delta_{mn}, \quad \sigma_m = \pm 1, \tag{39}$$

analog zu (38a):

$$A = \sum_m \sigma_m \varphi_m \varphi_m^\dagger. \tag{39a}$$

Somit ist die Zahl der Eigenlösungen mit positiver A-Norm, (wenn in (39) keine $\sigma_m = 0$ vorkommen), gleich der Zahl der Eigenwerte $+1$ von A. Gl. (37a) führt also auf jeden Fall zu einer Einschränkung der Lösungsmannigfaltigkeit.

Doch ist diese Mannigfaltigkeit größer als die der Vektoren aus dem sogenannten Hilbertraum I [6], für die $A\psi = +\psi$ wäre. Sei $\psi'^\dagger \psi' = 1$, $\psi''^\dagger \psi'' = 1$, $A\psi' = +\psi'$, $A\psi'' = -\psi''$, so führt

$$\psi = a\psi' + b\psi''$$

zu der *A-Norm*

$$\psi^\dagger A \psi = (a^* \psi'^\dagger + b^* \psi''^\dagger)(a \psi' - b \psi'') = a^* a - b^* b,$$

die auch für $b \neq 0$ positiv ist, wenn nur

$$|a| > |b|$$

ist. Die Vektoren aus dem Hilbertraum II spielen darum im allgemeinen mit.

12. Ergebnis

Hiernach ist eine Quantenmechanik mit indefiniter Metrik mathematisch möglich. Formal lauten alle Gleichungen genau wie in der gewöhnlichen Quantenmechanik. Nur treten an die Stelle gewöhnlicher hermetischer Operatoren A-hermitesche und die unitären sind durch A-unitäre zu ersetzen.

Aus jedem A-hermiteschen Operator F geht durch Rechtsmultiplikation mit A ein gewöhnlicher hermitescher Operator hervor, nämlich FA, und e^{iF} ist A-unitär.

Der wesentliche Unterschied zwischen Quantenmechaniken mit definiter und mit indefiniter Metrik besteht darin, daß der Konvexkörper der statistischen Matrizen G im letzten Fall nicht mehr alle positiv definiten Matrizen GA enthält, sondern nur diejenigen, deren Eigenvektoren sämtliche eine positive A-Norm haben. Nur unter dieser Voraussetzung sind alle Wahrscheinlichkeiten in (33a) positiv.

So entscheidend dieser Unterschied auch sein mag, so harmlos ist er in der Anwendung, weil die A-Normen bewegungsinvariant sind. Die richtige Wahl von G ist hiernach allein Sache der Anfangsbedingungen.

Es ist zu beachten, daß diese Beschränkung nur für die statistischen Matrizen G gilt. Die Operatoren F können beliebig A-hermitesch sein.

Zusammenfassend kann man feststellen: Mindestens bei finiten Problemen bestehen keine mathematischen Bedenken gegen den Ansatz von Quantentheorien mit indefiniter Metrik.

Sie ordnen sich zwanglos in die allgemeine Theorie stochastischer Prozesse ein. Der Konvexkörper der statistischen Matrizen ist nicht mehr wie in den beiden bisher bekannten Theorien maximal. Doch ist er wie in diesen abgeschlossen. Die Preisgabe der Maximalität entspringt nicht einem willkürlichen Akt. Sie erweist sich notwendig, wenn man an der Abgeschlossenheit des Konvexkörpers festhält. Bis zu einem gewissen Grade willkürlich ist die Wahl der Ecken in Gl. (16). Sie ist durch die Analogie zur Quantenmechanik mit definiter Metrik bestimmt. Für die Koeffizienten $a, b \ldots$ in Gl. (16a) andere Werte als 0 zu wählen, wäre weit weniger naheliegend. –

Die statistischen Betrachtungen zur Quantenmechanik reichen mit ihren Anfängen in ein Seminar von Fues und Schaefer in Breslau zurück, in dem wir einige fundamentale Arbeiten zur Quantenmechanik gemeinsam gelesen und besprochen haben. Aus dem Wunsche zu zeigen, warum die Quantenmechanik nicht auf die klassische Mechanik zurückgeführt werden kann, hat Fues eine Dichteverteilung im Phasenraum angegeben – eine Verteilung der Mittelungsgewichte, wie wir sie hier genannt haben –, die, soweit man das nach so langer Zeit noch sagen kann, im wesentlichen mit der auf Wigner [7] zurückgehenden übereingestimmt haben muß, und die wir später neu abgeleitet haben [8].

Inzwischen hat sich herausgestellt [1], daß diese statistische Betrachtungsweise den Graben, der die klassische Physik von der Quantenphysik trennt, zwar nicht einebnet – das kann man nicht erwarten –, aber doch überbrückt, und daß sie geeignet ist, die Gedanken, die Born [9] mit seiner statistischen Deutung der Quantenmechanik hat anklingen lassen, konsequent weiterzuführen. Daß es nun mit dieser Methode möglich ist, über die Quantenmechanik im engeren Sinne hinauszugehen und zu einer Quantenmechanik mit indefiniter Metrik zu gelangen, und daß der Beweis dafür dem Jubilar zu seinem siebzigsten Geburtstag als angemessenes Geschenk dargeboten werden kann, erfüllt den Autor mit besonderer Freude.

Literaturhinweise

[1] F. Bopp, W. Heisenberg und die Physik unserer Zeit, Vieweg-Verlag, Braunschweig 1961, S. 128–149.

[2] W. Heisenberg, Rev. Mod. Phys. 29, 269 (1957). – E. C. G. Sudershan, Rochester N. Y. 09538, Phys. Rev. 123, 2183 (1961).

[3] H. Richter, Wahrscheinlichkeitstheorie, Berlin 1956.

[4] F. Bopp, l. c. [1], S. 137.

[5] H. A. Kastrup, Ann. d. Phys., (7) 9, 388 (1962).

[6] W. Heisenberg, K. Kortel, H. Mitter, Z. Naturforschung 10a, 425 (1955).

[7] E. Wigner, Phys. rev. 40, 49 (1932), Gl. (8).

[8] F. Bopp, Z. Naturforschung 2a, 202, (1947).

[9] M. Born, Z. f. Physik 38, 803 (1926).

Zeitschrift/Journal: Sitzungsberichte der mathematisch-physikalischen Klasse der Bayerischen Akademie der Wissenschaften München

Jahr/Year: 1963

Band/Volume: 1962

Autor(en)/Author(s): Bopp Fritz

Artikel/Article: Verallgemeinerte stochastische Prozesse. Ein Beitrag zur Quantenmechanik mit indefiniter Metrik 27-43