

### **3. Über das Verhältnis der Heisenberg-Born-Jordanschen Quantenmechanik zu der meinen; von Erwin Schrödinger.**

#### § 1. Einleitung und Inhaltsübersicht.

Bei der außerordentlichen Verschiedenheit der Ausgangspunkte und Vorstellungskreise der Heisenbergschen Quantenmechanik<sup>1)</sup> einerseits und der neulich hier in ihren Grundzügen dargelegten und als „undulatorische“ oder „physikalische“ Mechanik bezeichneten Theorie<sup>2)</sup> andererseits, ist es recht seltsam, daß diese beiden neuen Quantentheorien hinsichtlich der bisher bekannt gewordenen speziellen Ergebnisse *miteinander* auch dort übereinstimmen, wo sie von der alten Quantentheorie abweichen. Ich nenne vor allem die eigentümliche „Halbzahligkeit“ beim Oszillator und beim Rotator. Das ist wirklich sehr merkwürdig, denn Ausgangspunkt, Vorstellungen, Methode, der ganze mathematische Apparat scheinen in der Tat grundverschieden. Vor allem aber scheint das Abgehen von der klassischen Mechanik in den beiden Theorien geradezu in diametral entgegengesetzter Richtung zu erfolgen. Bei Heisenberg werden die klassischen kontinuierlichen Variablen durch Systeme diskreter Zahlengrößen (Matrizen) ersetzt, die, von einem ganzzahligen Indexpaar abhängig, durch *algebraische* Gleichungen bestimmt werden. Die Autoren selbst bezeichnen

1) W. Heisenberg, Ztschr. f. Phys. 33. S. 879. 1925; M. Born und P. Jordan, ebendort 34. S. 853. 1925 u. 35. S. 557. 1926 (letzteres *mit* Heisenberg). Ich erlaube mir im folgenden der Kürze halber die drei Autornamen im allgemeinen durch den Heisenbergs zu ersetzen und zitiere die zwei letztgenannten Abhandlungen mit „Quantenmechanik I u. II“. Interessante Beiträge zu der Theorie auch von P. Dirac, Proc. Roy. Soc. London 109. S. 642. 1925 u. ebendort 110. S. 561. 1926.

2) E. Schrödinger, Ann. d. Phys. 79. S. 361 (1. Mitteilung); 79. S. 489. 1926 (2. Mitteilung). Diese Mittellungsreihe wird, ganz unabhängig von der vorliegenden Note, welche nur das Verbindungsglied herstellen soll, fortgesetzt werden.

die Theorie als „wahre Diskontinuumstheorie“. <sup>1)</sup> Die Undulationsmechanik hingegen bedeutet gerade umgekehrt von der klassischen Mechanik aus einen Schritt *auf die Kontinuumstheorie zu*. Tritt doch an Stelle des durch endlich viele dependente Variable mittels endlich vieler totaler Differentialgleichungen beschreibbaren Geschehens ein kontinuierliches *feldmäßiges* Geschehen im Konfigurationsraum, das von einer einzigen, aus einem Wirkungsprinzip ableitbaren *partiellen* Differentialgleichung beherrscht wird. Dieses Wirkungsprinzip bzw. diese Differentialgleichung ersetzt die Bewegungsgleichungen *und* die Quantenbedingungen der älteren „klassischen Quantentheorie“. <sup>2)</sup>

Im folgenden soll nun der sehr intime *innere Zusammenhang* der Heisenbergschen Quantenmechanik und meiner Undulationsmechanik aufgedeckt werden. Vom formal mathematischen Standpunkt hat man ihn wohl als *Identität* (der beiden Theorien) zu bezeichnen. Der Gedankengang des Beweises ist folgender.

Die Heisenbergsche Theorie knüpft die Lösung eines Problems der Quantenmechanik an die Auflösung eines Systems von unendlich vielen algebraischen Gleichungen, deren Unbekannte — unendliche Matrizen — den klassischen Lage- und Impulskoordinaten des mechanischen Systems und Funktionen derselben zugeordnet sind und *eigenartige Rechengesetze* befolgen. (Die Zuordnung ist so: *einer* Lage-, *einer* Impulskoordinate oder *einer* Funktion derselben entspricht immer je *eine* unendliche Matrix.)

Ich werde nun zunächst (§§ 2 u. 3) zeigen, wie man jeder Funktion der Lage- und Impulskoordinaten eine Matrix zuordnen kann derart, daß diese Matrizen den Born-Heisenbergschen formalen Rechenregeln (zu denen ich auch die sogenannte „Quantenbedingung“ oder „Vertauschungsregel“

1) „Quantenmechanik I“, S. 879.

2) Angeregt wurde meine Theorie durch L. de Broglie, *Ann. de Physique* (10) 3. S. 22. 1925 (Thèses, Paris 1924) und durch kurze aber unendlich weitblickende Bemerkungen A. Einsteins, *Berl. Ber.* 1925. S. 9 ff. Eines genetischen Zusammenhanges mit Heisenberg bin ich mir durchaus nicht bewußt. Ich hatte von seiner Theorie natürlich Kenntnis, fühlte mich aber durch die mir sehr schwierig scheinenden Methoden der transzendenten Algebra und durch den Mangel an Anschaulichkeit abgeschreckt, um nicht zu sagen abgestoßen.

zähle; s. u.) *jedenfalls genügen*. Diese Zuordnung von Matrizen zu Funktionen ist *allgemein*, sie nimmt noch gar nicht bezug auf das *spezielle* mechanische System, das gerade vorliegt, sondern ist für alle mechanischen Systeme die nämliche. (Mit anderen Worten: die spezielle Hamiltonsche Funktion geht noch nicht in das Zuordnungsgesetz ein.) Die Zuordnung ist aber andererseits noch in hohem Grade *unbestimmt*. Sie erfolgt nämlich *durch Vermittlung* eines *beliebigen* vollständigen orthogonalen Funktionensystems mit dem Grundgebiet: *ganzer Konfigurationenraum*. (NB. *nicht „pq-Raum“*, sondern „*q*-Raum“.) Die vorläufige *Unbestimmtheit* der Zuordnung liegt eben darin, daß man die Vermittlerrolle einem *beliebigen* Orthogonalsystem übertragen kann.

Nachdem so in sehr allgemeiner Weise Matrizen konstruiert sind, welche den allgemeinen Rechenregeln genügen, werde ich im § 4 folgendes zeigen: die Auflösung des *speziellen*, für das *spezielle* Problem charakteristischen algebraischen Gleichungssystems, welches die *Matrizen* der Lage- und Impulskordinaten mit der *Matrix* der Hamiltonschen Funktion verknüpft und welches die Autoren als „Bewegungsgleichungen“ bezeichnen, wird restlos dadurch geleistet, daß man die Vermittlerrolle einem *bestimmten* Orthogonalsystem überträgt; nämlich dem System der *Eigenfunktionen* derjenigen partiellen Differentialgleichung, welche die Grundlage meiner Undulationsmechanik bildet. Die Lösung des natürlichen *Randwertproblems* dieser Differentialgleichung ist *vollständig äquivalent* mit der Auflösung des Heisenbergschen algebraischen Problems. *Alle* Heisenbergschen Matrizenelemente, für die man sich etwa in der Vermutung, daß sie die „Übergangswahrscheinlichkeiten“ oder „Linienintensitäten“ bestimmen, interessieren mag, lassen sich, sobald das *Randwertproblem* gelöst ist, *durch Differentiationen und Quadraturen* wirklich ausrechnen. Übrigens kommt diesen Matrizenelementen oder Größen, die mit ihnen eng verwandt sind, in der Undulationsmechanik eine vollkommen anschauliche Bedeutung zu als Amplituden der Partialschwingungen des elektrischen Momentes des Atoms. Die Intensität und Polarisation des emittierten Lichtes läßt sich also *auf dem Boden der Maxwell-Lorentzschen Theorie* verstehen. Eine kurze vorläufige Skizze dieses Zusammenhangs findet sich im § 5.

§ 2. Die Zuordnung eines Operators und einer Matrix zu einem wohlgeordneten Funktionssymbol und die Bestätigung der Produktregel.

Der springende Punkt bei der Konstruktion der Matrizen besteht in der einfachen Bemerkung, daß die eigenartigen Heisenbergschen Rechengesetze für Funktionen der zweimal  $n$  Größen:  $q_1, q_2, \dots, q_n; p_1, p_2, \dots, p_n$  (Lage- und kanonisch konjugierte Impulskoordinaten) genau übereinstimmen mit den Rechengesetzen, die nach der gewöhnlichen Analysis für die linearen Differentialoperatoren im Gebiete der einmal  $n$  Variablen  $q_1, q_2, \dots, q_n$  gelten. Dabei hat die Zuordnung so zu geschehen, daß man in der Funktion jedes  $p_i$  durch den Operator  $\partial/\partial q_i$  ersetzt. — In der Tat ist der Operator  $\partial/\partial q_i$  mit  $\partial/\partial q_m$  für beliebiges  $m$  vertauschbar, mit  $q_m$  dagegen nur, wenn  $m \neq i$ . Der für  $m = i$  durch Vertauschung und Subtraktion erhaltenen Operator

$$(1) \quad \frac{\partial}{\partial q_i} q_i - q_i \frac{\partial}{\partial q_i},$$

ausgeführt an einer beliebigen Funktion der  $q_k$ , reproduziert die Funktion, d. h. dieser Operator ist die Identität. Diese einfache Tatsache wird sich im Gebiete der Matrizen als die Heisenbergsche Vertauschungsregel abbilden.

Gehen wir nach dieser orientierenden Vorbemerkung zum systematischen Aufbau. Wegen der eben angemerkten „Nichtimmervertauschbarkeit“ entspricht nicht eindeutig einer bestimmten „Funktion im gewöhnlichen Sinne“ der  $q_k, p_k$  ein bestimmter Operator, sondern einem „in bestimmter Weise geschriebenen Funktionssymbol“. Außerdem muß, da wir mit den Operatoren  $\partial/\partial q_k$  keine anderen Rechenoperationen vornehmen können, als Addition und Multiplikation, die Funktion der  $q_k, p_k$  als reguläre Potenzreihe wenigstens in den  $p_k$  geschrieben sein, damit wir den Ersatz von  $p_i$  durch  $\partial/\partial q_i$  vornehmen können. Es genügt, die Überlegungen für ein einzelnes Glied einer solchen Potenzreihe durchzuführen, also für eine Funktion von folgendem Bau

$$(2) \quad \begin{cases} F(q_k, p_k) f = \\ = (q_1 \dots q_n) p_r p_s p_t g(q_1 \dots q_n) p_{r'} h(q_1 \dots q_n) p_{r''} p_{s''} \dots \end{cases}$$

Wir wollen dies als ein „wohlgeordnetes Funktionssymbol“ bezeichnen und ordnen ihm den folgenden Operator zu

$$(3) \quad \left\{ \begin{array}{l} [F, \cdot] = f(q_1 \dots q_n) K^3 \frac{\partial^3}{\partial q_r \partial q_s \partial q_t} \\ g(q_1 \dots q_n) K \frac{\partial}{\partial q_r} h(q_1 \dots q_n) K^2 \frac{\partial^2}{\partial q_{r'} \partial q_{s'}} \dots, \end{array} \right.$$

wobei etwas allgemeiner als in der orientierenden Vorbemerkung  $p_r$  nicht einfach durch  $\partial/\partial q_r$ , sondern durch  $K \frac{\partial}{\partial q_r}$  ersetzt ist und  $K$  eine universelle Konstante bedeuten soll. Als Abkürzung für den aus der wohlgeordneten Funktion  $F$  entspringenden Operator habe ich vorübergehend (d. h. nur für den Zweck des vorliegenden Beweises) das Zeichen  $[F, \cdot]$  eingeführt. Mit  $[F, u]$  werde ich diejenige Funktion (im gewöhnlichen Sinne) von  $q_1 \dots q_n$  bezeichnen, die man erhält, wenn man den Operator auf eine Funktion (im gewöhnlichen Sinne)  $u(q_1 \dots q_n)$  ausübt. Ist  $G$  eine andere wohlgeordnete Funktion, so wird  $[GF, u]$  bezeichnen die Funktion  $u$ , nachdem an ihr zuerst der Operator von  $F$ , sodann derjenige von  $G$  ausgeübt ist; oder, was definitionsgemäß dasselbe ist, der Operator von  $GF$ . Natürlich ist das im allgemeinen nicht dasselbe wie  $[FG, u]$ .

Nun ordnen wir einer wohlgeordneten Funktion, wie  $F$ , durch Vermittelung ihres Operators (3) und eines beliebigen vollständigen Orthogonalsystems mit dem Grundgebiet: ganzer  $q$ -Raum, eine *Matrix* zu, und zwar in folgender Weise. Zur Abkürzung werden wir für die Variablengruppe  $q_1, q_2 \dots q_n$  einfach  $x$  schreiben, wie es aus der Theorie der Integralgleichungen geläufig ist, und  $\int dx$  für ein über den ganzen  $q$ -Raum erstrecktes Integral. Es sollen nun die Funktionen

$$(4) \quad u_1(x) \sqrt{\varrho(x)}, \quad u_2(x) \sqrt{\varrho(x)}, \quad u_3(x) \sqrt{\varrho(x)} \dots \text{ in inf.}$$

ein vollständiges, auf 1 normiertes Orthogonalsystem bilden. Es sei also jedenfalls

$$(5) \quad \left\{ \begin{array}{l} \int \varrho(x) u_i(x) u_k(x) dx = 0 \text{ für } i \neq k, \\ = 1 \text{ für } i = k. \end{array} \right.$$

Ferner wird vorausgesetzt, daß diese Funktionen auf dem natürlichen *Rand* des  $q$ -Raums (im allgemeinen das Unendliche)

genügend stark verschwinden, um die bei gewissen später vorzunehmenden Integrationen per partes als Nebenprodukte auftretenden Randintegrale zum Verschwinden zu bringen.

Der durch (2) dargestellten Funktion  $F$  mit dem Operator (3) ordnen wir nun die folgende *Matrix* zu

$$(6) \quad F^{ki} = \int \rho(x) u_k(x) [F, u_i(x)] dx.$$

(Die Schreibweise der Indizes linker Hand soll nicht den Nebengedanken „kontravariant“ erwecken; von diesem Gesichtspunkt aus, den wir hier beiseitelassen, wäre eher ein Index oben, der andere unten zu schreiben; wir schreiben die Matrizenindizes *oben*, weil wir nachher auch die den  $q_k, p_k$  selbst entsprechenden Matrixelemente anzuschreiben haben, wo der untere Platz besetzt ist.) — In Worten: ein Matrixelement wird berechnet, indem man die durch den *Zeilenindex* bezeichnete Funktion des Orthogonalsystems (worunter wir stets die  $u_i$ , nicht die  $u_i \sqrt{\rho}$  verstehen wollen) mit der „Dichtefunktion“  $\rho$  und mit dem Operator, ausgeübt an der durch den *Kolonnenindex* bezeichneten Orthogonalfunktion, *multipliziert* und über das Grundgebiet *integriert*.<sup>1)</sup>

Es ist nicht sehr schwer, zu zeigen, daß additive und multiplikative Verknüpfung der wohlgeordneten Funktionen bzw. der zugehörigen Operatoren sich an den zugehörigen Matrizen als Matrizenaddition und Matrizenmultiplikation auswirkt. Für die Addition ist das trivial. Für die Multiplikation verläuft der Beweis wie folgt. Sei  $G$  irgendeine andere wohlgeordnete Funktion, wie  $F$ , und

$$(7) \quad G^{lm} = \int \rho(x) u_l(x) [G, u_m(x)] dx$$

die ihr zugeordnete Matrix. Wir wollen die Produktmatrix  $(FG)^{km} = \sum_l F^{kl} G^{lm}$  bilden. Bevor wir sie anschreiben, formen wir den Ausdruck (6) für  $F^{ki}$  folgendermaßen um. Durch eine Serie von Integrationen per partes wird der Operator  $[F, \cdot]$  von der Funktion  $u_i(x)$  auf die Funktion  $\rho(x) u_k(x)$  „hinübergewälzt“. Mit dem Ausdruck „wälzen“ (statt etwa „schieben“) will ich andeuten, daß die *Reihenfolge* der Operationen sich

1) Kürzer:  $F^{kl}$  ist der  $k^{\text{te}}$  „Entwicklungskoeffizient“ des an der Funktion  $u_l$  ausgeübten Operators.

dabei gerade umkehrt. Die als „Nebenprodukte“ auftretenden Randintegrale sollen verschwinden (s. o.). Der „gewälzte“ Operator, einschließlich des bei ungerader Anzahl der Differentiationen sich einstellenden Vorzeichenwechsels, werde mit  $[\bar{F}, \cdot]$  bezeichnet. Am Beispiel (3):

$$(3) \quad \left\{ \begin{aligned} [\bar{F}, \cdot] &= (-1)^x \dots K^2 \frac{\partial^2}{\partial q_{r'} \partial q_{r''}} h(q_1 \dots q_n) K \frac{\partial}{\partial q_r} \\ &g(q_1 \dots q_n) K^3 \frac{\partial^3}{\partial q_t \partial q_s \partial q_r} f(q_1 \dots q_n). \end{aligned} \right.$$

( $x$  = Anzahl der Differentiationen). Mit Verwendung dieses Zeichens ergibt sich

$$(6') \quad F^{kl} = \int u_l(x) [\bar{F}, \rho(x) u_k(x)] dx.$$

Berechnet man nun die Produktmatrix, so erhält man

$$(8) \quad \left\{ \begin{aligned} &\sum_l F^{kl} G^{lm} \\ &= \sum_l \left\{ \int u_l(x) [\bar{F}, \rho(x) u_k(x)] dx \cdot \int \rho(x) u_l(x) [G, u_m(x)] dx \right\} \\ &= \int [\bar{F}, \rho(x) u_k(x)] [G, u_m(x)] dx. \end{aligned} \right.$$

Die letzte Gleichsetzung ist nichts weiter als die sogenannte „Vollständigkeitsrelation“ unseres Orthogonalsystems<sup>1)</sup>, angewendet auf die „Entwicklungskoeffizienten“ der Funktionen

$$[G, u_m(x)] \quad \text{und} \quad \frac{1}{\rho(x)} [\bar{F}, \rho(x) u_k(x)].$$

Jetzt wälzen wir in (8) durch neuerliche Integrationen per partes den Operator  $[\bar{F}, \cdot]$  wieder von der Funktion  $\rho(x) u_k(x)$  fort auf die Funktion  $[G, u_m(x)]$ , wobei der Operator seine ursprüngliche Gestalt zurück gewinnt. Man erhält offenbar:

$$(9) \quad (FG)^{km} = \sum_l F^{kl} G^{lm} = \int \rho(x) u_k(x) [F G, u_m(x)] dx.$$

Links steht das  $km$ te Element der Produktmatrix, rechts, nach dem Zuordnungsgesetz (6), das  $km$ te Element der dem wohlgeordneten Produkt  $FG$  entsprechenden Matrix. W. z. b. w.

1) Siehe z. B. Courant-Hilbert, Methoden der mathematischen Physik I, S. 36. Es ist wichtig, daran zu erinnern, daß die Vollständigkeitsrelation für die „Entwicklungskoeffizienten“ auf jeden Fall gilt, auch wenn die Entwicklungen selbst *nicht* konvergieren. Konvergieren sie, so ist die Gleichsetzung (8) ganz unmittelbar evident.

§ 3. Die Heisenbergsche Quantenbedingung und die Regeln für partielle Differentiation.

Da die Operation (1) die Identität ist, so entspricht der wohlgeordneten Funktion

$$(10) \quad p_i q_i - q_i p_i$$

nach unserem Zuordnungsgesetz, in das wir, wie erinnerlich, noch eine universelle Konstante  $K$  aufgenommen haben, der Operator: Multiplikation mit  $K$ . Es entspricht der Funktion (10) also die Matrix:

$$(11) \quad (p_i q_i - q_i p_i)^{ik} = K \int \rho(x) u_i(x) u_k(x) dx = 0 \quad \text{für } i \neq k \\ = K \quad \text{für } i = k.$$

Das ist Heisenbergs „Quantenrelation“, wenn man setzt

$$(12) \quad K = \frac{h}{2\pi\sqrt{-1}},$$

was von nun an festgehalten werden möge. — Selbstverständlich hätten wir die Relation (11) auch so finden können, daß wir die den Funktionen  $q_i$  und  $p_i$  zugeordneten Matrizen

$$(13) \quad \begin{cases} q_i^{ik} = \int q_i \rho(x) u_i(x) u_k(x) dx \\ p_i^{ik} = K \int \rho(x) u_i(x) \frac{\partial u_k(x)}{\partial q_i} dx \end{cases}$$

in verschiedener Reihenfolge multiplizieren und die zwei Resultate subtrahieren.

Wenden wir uns nun zu den „Regeln für partielle Differentiation“. Eine wohlgeordnete Funktion, wie (2), partiell nach  $q_i$  differenzieren soll heißen<sup>1)</sup>, sie ohne Veränderung der Reihenfolge der Faktoren an jeder Stelle, wo  $q_i$  in ihr auftritt, nach  $q_i$  differenzieren und alle diese Resultate addieren. Dann ist leicht zu zeigen, daß folgende Gleichung zwischen Operatoren gilt

$$(14) \quad \left[ \frac{\partial F}{\partial q_i}, \cdot \right] = \frac{1}{K} [p_i F - F p_i, \cdot]$$

1) Mit all diesen Definitionen folgen wir natürlich getreu Heisenberg. Vom streng logischen Standpunkt ist der nachfolgende Beweis eigentlich überschüssig und wir könnten die Regeln (14) und (15) direkt hinschreiben, da sie bei Heisenberg bewiesen sind und nur auf der Summen-, Produkt- und auf der Vertauschungsregel (11) beruhen, welche wir bewiesen haben.



Der Gedankengang ist dieser. Anstatt wirklich nach  $q_i$  zu differenzieren, kann ich mir's bequemer machen und einfach  $p_i$  voranschreiben, das ja beim Übergang zu den Operatoren ohnedies durch  $K \frac{\partial}{\partial q_i}$  ersetzt wird. Ich muß nur erstens durch  $K$  fortdividieren. Zweitens wird aber der Operator  $\partial/\partial q_i$  hernach, wenn man den Gesamtoperator auf irgendeine Funktion  $u$  anwendet, nicht bloß auf diejenigen Teile von  $F$  wirken, die  $q_i$  enthalten (was er *soll*), sondern *fälschlich* auch auf die vom Gesamtoperator ergriffene Funktion  $u$ . *Diesen Fehler korrigiere ich gerade*, indem ich noch die Operation  $[F p_i, \cdot]$  subtrahiere!

Betrachten wir nun die partielle Differentiation nach einem  $p_i$ . Ihre Bedeutung für eine wohlgeordnete Funktion wie (2) ist noch etwas einfacher als bei  $\partial/\partial q_i$ , weil die  $p_i$  ja nur als Potenzprodukte auftreten. Wir denken uns jede Potenz von  $p_i$  in einzelne Faktoren aufgelöst, z. B.  $p_i p_i p_i$  statt  $p_i^3$ , und können dann sagen: bei der partiellen Differentiation nach  $p_i$  ist jedes *einzelne*  $p_i$ , das in  $F$  auftritt, je einmal *fortzulassen* (wobei alle übrigen  $p_i$  stehen bleiben); alle erhaltenen Resultate sind zu addieren. Wie wirkt sich das am Operator (3) aus? „Jedes einzelne  $K \frac{\partial}{\partial q_i}$  ist je einmal fortzulassen, alle so erhaltenen Resultate sind zu addieren.“

Ich behaupte, nach dieser Überlegung gilt die Operatoren-gleichung:

$$(15) \quad \left[ \frac{\partial F}{\partial p_i}, \cdot \right] = \frac{1}{K} [F q_i - q_i F, \cdot].$$

In der Tat: ich denke mir den Operator  $[F q_i, \cdot]$  gebildet und versuche nun, in diesem Operator „ $q_i$  durch  $F$  von rechts nach links durchzuschieben“, das soll heißen, durch sukzessive Vertauschungen auf den Operator  $[q_i F, \cdot]$  zu kommen. Das Durchschieben begegnet einem Hindernis nur, so oft ich dabei auf ein  $\partial/\partial q_i$  stoße. Mit diesem darf ich  $q_i$  nicht einfach vertauschen, sondern habe im inneren des Operators zu ersetzen

$$(16) \quad \frac{\partial}{\partial q_i} \text{ durch } 1 + q_i \frac{\partial}{\partial q_i}.$$

Die von diesen „Einsern“ gelieferten Nebenprodukte der Vertauschung bilden, wie man leicht überblickt, gerade den ge-

wünschten „partiellen Differentialquotienten“. Nach Beendigung des Durchschiebens bleibt noch der Operator  $[q_l F, \cdot]$  übrig, welcher überschüssig wäre und deshalb in (15) explizite subtrahiert ist. Damit ist auch (15) bewiesen. Die für die Operatoren bewiesenen Gleichungen (14) und (15) gelten natürlich unverändert zwischen den zur rechten und linken Seite gehörigen Matrizen, da ja durch (6) einem linearen Operator eine und nur eine Matrix zugehört (natürlich bei vorab fest gewähltem Funktionssystem  $u_i(x)$ ).<sup>1)</sup>

1) Beiläufig bemerkt, gilt von diesem Satz auch die Umkehrung, wenigstens in dem Sinne, daß bei vorgegebenem Orthogonalsystem und Dichtefunktion zu einer gegebenen Matrix sicherlich nicht mehr als ein linearer Differentialoperator nach unserem Zuordnungsgesetz (6) gehören kann. Denn seien in (6) die  $F^{kl}$  vorgegeben, sei  $[F, \cdot]$  der gesuchte lineare Operator, dessen Existenz wir voraussetzen, und sei  $\varphi(x)$  eine stückweise stetige und nötigenfalls hinreichend oft differenzierbare, im übrigen aber ganz beliebige Funktion der  $q_1, q_2 \dots q_n$ . Dann liefert die Vollständigkeitsrelation, angewendet auf die Funktionen  $\varphi(x)$  und  $[F, u_k(x)]$  folgendes:

$$\int \varphi(x) \varphi(x) [F, u_k(x)] dx = \sum_l \left\{ \int \varphi(x) \varphi(x) u_l(x) dx \cdot \int \varphi(x) u_l(x) [F, u_k(x)] dx \right\}.$$

Die rechte Seite kann als eindeutig bekannt gelten, es treten in ihr nur die Entwicklungskoeffizienten von  $\varphi(x)$  und die vorgegebenen Matrixelemente  $F^{lk}$  auf. Durch „Wälzung“ (vgl. oben) kann man die linke Seite in den  $k$ ten Entwicklungskoeffizienten der Funktion

$$\frac{[F, \varphi(x) \varphi(x)]}{\varphi(x)}$$

verwandeln. Es sind also alle Entwicklungskoeffizienten dieser Funktion eindeutig festgelegt, mithin auch diese Funktion selbst („Courant-Hilbert“ S. 37). Da nun aber  $\varphi(x)$  fest vorgegeben und  $\varphi(x)$  eine ganz beliebige Funktion ist, so können wir sagen: das Resultat der Einwirkung des gewälzten Operators auf eine beliebige Funktion, welche nur so beschaffen ist, daß sie dem Operator überhaupt unterworfen werden kann, ist eindeutig durch die Matrix  $F^{kl}$  festgelegt. Das heißt aber nichts anderes als: der gewälzte Operator ist eindeutig festgelegt, denn der Begriff „Operator“ ist logisch identisch mit der Gesamtheit seiner Einwirkungsergebnisse. — Aus dem gewälzten Operator erhält man durch Wälzung den gesuchten selbst, eindeutig.

Man beachte, daß die Entwickelbarkeit der auftretenden Funktionen nicht vorausgesetzt werden mußte. — Daß zu einer beliebigen Matrix ein linearer Operator immer existiert, haben wir nicht bewiesen.

## § 4. Die Auflösung der Heisenbergschen Bewegungsgleichungen.

Wir haben jetzt gezeigt, daß die unter Vermittlung eines beliebigen vollständigen Orthogonalsystems (4) nach den Definitionen (3) und (6) aus wohlgeordneten Funktionen verfertigten Matrizen allen Heisenbergschen Rechenregeln, einschließlich der Vertauschungsregel (11), genügen. Jetzt erst betrachten wir ein spezielles mechanisches Problem, welches durch eine bestimmte Hamiltonsche Funktion

$$(17) \quad H(q_k, p_k)$$

charakterisiert sei. Die Autoren der Quantenmechanik übernehmen diese Funktion zunächst aus der *gewöhnlichen* Mechanik, welche dieselbe natürlich *nicht* in „wohlgeordneter“ Form liefert; denn in der gewöhnlichen Analysis kommt es ja auf die Reihenfolge der Faktoren nicht an. Sie „normalisieren“ oder „symmetrisieren“ die Funktion sodann in bestimmter Weise für die Zwecke der Quantenmechanik, indem z. B. die gewöhnliche mechanische Funktion  $q_k p_k^2$  ersetzt wird durch

$$\frac{1}{2}(p_k^2 q_k + q_k p_k^2)$$

oder auch durch  $p_k q_k p_k$  oder durch

$$\frac{1}{3}(p_k^2 q_k + p_k q_k p_k + q_k p_k^2),$$

was nach (11) alles dasselbe ist. Diese Funktion hat dann als „wohlgeordnet“, d. h. die Reihenfolge der Faktoren hat als unantastbar zu gelten. Ich will auf die allgemeine Symmetrisierungsregel<sup>1)</sup> hier nicht eingehen; die Gesichtspunkte sind, wenn ich recht verstehe:  $H^{ik}$  soll eine *Diagonalmatrix* sein, im übrigen soll die symmetrisierte Funktion, als Funktion der gewöhnlichen Analysis aufgefaßt, mit der ursprünglich gegebenen identisch sein.<sup>2)</sup> Wir werden diesen Forderungen auf direktem Wege genügen.

Alsdann fordern die Autoren, daß die Matrizen  $q_i^{ik}$ ,  $p_i^{ik}$  einem unendlichen Gleichungssystem als „Bewegungsgleichungen“ genügen sollen, welches sie ursprünglich wie folgt schreiben:

1) „Quantenmechanik I“ S. 873 f.

2) Die *stärkere* Forderung: soll dieselben quantenmechanischen Bewegungsgleichungen liefern — halte ich für zu eng. Sie rührt m. E. daher, daß die Autoren sich *auch hinsichtlich der  $q_k$  auf Potenzprodukte* beschränken, was unnötig ist.

$$(18) \quad \left. \begin{aligned} \left(\frac{dq_l}{dt}\right)^{ik} &= \left(\frac{\partial H}{\partial p_l}\right)^{ik} \\ \left(\frac{dp_l}{dt}\right)^{ik} &= \left(-\frac{\partial H}{\partial q_l}\right)^{ik} \end{aligned} \right\} \begin{array}{l} l = 1, 2, 3 \dots n \\ i, k = 1, 2, 3 \dots \text{in inf.} \end{array}$$

Das obere Indexpaar meint, genau wie früher bei  $F^{ki}$ , das betreffende Element der zu der betreffenden wohlgeordneten Funktion gehörigen Matrix. Die Bedeutung der partiellen Differentialquotienten rechter Hand wurde ebenfalls schon erklärt, dagegen *nicht* das linker Hand auftretende  $d/dt$ . Damit meinen die Autoren folgendes: *es* soll eine Reihe von Zahlen

$$(19) \quad \nu_1, \nu_2, \nu_3, \nu_4 \dots \text{in inf.}$$

geben, derart, daß die obigen Gleichungen erfüllt sind, wenn man dem  $d/dt$  die Bedeutung beilegt: Multiplikation des  $ik^{\text{ten}}$  Matrixelementes mit  $2\pi\sqrt{-1}(\nu_i - \nu_k)$ . Also im besonderen

$$(20) \quad \left\{ \begin{aligned} \left(\frac{dq_l}{dt}\right)^{ik} &= 2\pi\sqrt{-1}(\nu_i - \nu_k)q_l^{ik}; \\ \left(\frac{dp_l}{dt}\right)^{ik} &= 2\pi\sqrt{-1}(\nu_i - \nu_k)p_l^{ik}. \end{aligned} \right.$$

Die Zahlenreihe (19) ist aber nicht etwa vorweg bestimmt, sondern bildet zusammen mit den Matrixelementen  $q_l^{ik}$ ,  $p_l^{ik}$  die numerischen Unbekannten des Gleichungssystems (18). Dieses nimmt mit der Zeichenerklärung (20), mit den Rechenregeln (14) und (15) und mit Beachtung von (12) folgende Gestalt an:

$$(18') \quad \left\{ \begin{aligned} (\nu_i - \nu_k)q_l^{ik} &= \frac{1}{h}(Hq_l - q_lH) \\ (\nu_i - \nu_k)p_l^{ik} &= \frac{1}{h}(Hp_l - p_lH) \end{aligned} \right.$$

(durch  $2\pi\sqrt{-1}$  ist fortgekürzt.)

Diesem Gleichungssystem haben wir also Genüge zu leisten und haben dazu kein anderes Mittel mehr verfügbar, als die geeignete Wahl des die Matrizenbildung vermittelnden Orthogonalsystems (4). Ich behaupte nun folgendes:

1. Den Gleichungen (18') wird allgemein dadurch genügt, daß man als Orthogonalsystem die *Eigenfunktionen* des natürlichen Randwertproblems der folgenden partiellen Differentialgleichung wählt:

$$(21) \quad -[H, \psi] + E\psi = 0.$$

$\psi$  ist die unbekannte Funktion von  $q_1, q_2 \dots q_n$ ;  $E$  ist der Eigenwertparameter. Als Dichtefunktion  $\rho(x)$  tritt selbstverständlich diejenige Funktion von  $q_1 \dots q_n$  auf, mit welcher man die Gleichung (21) multiplizieren muß, um sie zu einer selbstadjungierten zu machen. Die Größen  $v_i$  ergeben sich gleich den Eigenwerten  $E_i$  dividiert durch  $h$ .  $H^{kl}$  wird zu einer Diagonalmatrix, mit  $H^{kl} = E_k$ .

2. Hat man die Symmetrisierung der Funktion  $H$  in passender Weise vorgenommen — der Symmetrisierungsvorgang ist m. E. vorläufig nicht eindeutig definiert — dann ist (21) identisch mit der Wellengleichung, die meiner Undulationsmechanik zugrunde liegt.<sup>1)</sup>

Die Behauptungen 1. sind fast unmittelbar evident, wenn man sich vorläufig über die Fragen hinwegsetzt, ob denn die Gleichung (21) überhaupt zu einem vernünftigen Randwertproblem mit dem Grundgebiet: ganzer  $q$ -Raum, Anlaß gibt, ob sie immer durch Multiplikation mit einer passenden Funktion zu einer selbstadjungierten gemacht wird u. dgl. Diese Fragen finden ja in weitem Maße sub 2. ihre Erledigung. — Da nun nach (21) und nach Definition der Eigenwerte und Eigenfunktionen

$$(22) \quad [H, u_i] = E_i u_i,$$

so wird nach (6)

$$(23) \quad \begin{cases} H^{kl} = \int \rho(x) u_k(x) [H, u_l(x)] dx = E_l \int \rho(x) u_k(x) u_l(x) dx \\ = 0 \text{ für } l \neq k \\ = E_l \text{ für } l = k \end{cases}$$

und z. B.

$$(24) \quad \begin{cases} (H q_l)^{ik} = \sum_m H^{im} q_l^{mk} = E_i q_l^{ik}, \\ (q_l H)^{ik} = \sum_m q_l^{im} H^{mk} = E_k q_l^{ik}, \end{cases}$$

so daß die rechte Seite der ersten Gleichung (18') den Wert erhält:

$$(25) \quad \frac{E_i - E_k}{h} q_l^{ik}.$$

Ganz analoges gilt für die zweite Gleichung. Damit sind alle Behauptungen unter 1. bewiesen.

1) Ann. d. Physik 79. S. 510. 1926. (Gleichung 18'').

Wenden wir uns jetzt der Behauptung 2. zu, das ist: Übereinstimmung des negativ genommenen Operators der (passend symmetrisierten) Hamiltonschen Funktion mit dem Wellenoperator der Undulationsmechanik. Ich will vorerst an einem einfachen Beispiel erklären, weshalb mir der Symmetrisierungsvorgang *zunächst* nicht eindeutig zu sein scheint. Sei, bei *einem* Freiheitsgrad, die *gewöhnliche* Hamiltonsche Funktion

$$(26) \quad H = \frac{1}{2}(p^2 + q^2).$$

Dann kann man freilich erstens diese Funktion unverändert, so wie sie da steht, als „wohlgeordnete“ Funktion in die „Quantenmechanik“ übernehmen. Man kann aber auch, und zwar wie mir scheint *zunächst* mit demselben Recht, die wohlgeordnete Funktion

$$(27) \quad H = \frac{1}{2} \left( \frac{1}{f(q)} p f(q) p + q^2 \right)$$

verwenden, wo  $f(q)$  eine in weiten Grenzen willkürliche Funktion ist.  $f(q)$  würde in diesem Fall als „Dichtefunktion“  $\rho(x)$  auftreten. (26) ist ganz offenbar nur ein Spezialfall von (27) und es fragt sich, ob und wie es überhaupt möglich ist, den Spezialfall, den man meint, allgemein d. h. auch für kompliziertere  $H$ -Funktionen auszuzeichnen. Sich nur dem zuliebe auch in den  $q_k$  auf Potenzprodukte zu beschränken (wo man dann allerdings einfach die „Erzeugung von Nennern“ verbieten könnte), das ist gerade in den wichtigsten Anwendungsfällen doch gar zu unbequem. Außerdem führt das, wie ich glaube, *nicht* zur richtigen Symmetrisierung.

Ich will nun zur Bequemlichkeit des Lesers die kurze Ableitung der Wellengleichung hier in der für den vorliegenden Zweck geeigneten Form wiederholen. Dabei beschränke ich mich auf den Fall der klassischen Mechanik (ohne Relativität und Magnetfeld). Sei also

$$(28) \quad H = T(q_k, p_k) + V(q_k)$$

und  $T$  eine quadratische Form der  $p_k$ . Dann kann die Wellengleichung gewonnen werden<sup>1)</sup> aus folgendem Variationsproblem:

1) Ann. d. Physik 79. S. 376. 1926. Gleichung (23) und (24).

$$(29) \quad \begin{cases} \delta J_1 = \delta \int \left\{ \frac{\hbar^2}{4\pi^2} T \left( q_k, \frac{\partial \psi}{\partial q_k} \right) + \psi^2 V(q_k) \right\} \Delta_p^{-\frac{1}{2}} dx = 0 \\ \text{mit der Nebenbedingung} \\ J_2 = \int \psi^2 \Delta_p^{-\frac{1}{2}} dx = 1. \end{cases}$$

$\int dx$  steht, wie oben, für  $\int \dots \int dq_1 \dots dq_n$ ;  $\Delta_p^{-\frac{1}{2}}$  ist die reziproke Quadratwurzel aus der Diskriminante der quadratischen Form  $T$ . Dieser Faktor darf durchaus nicht fortbleiben, weil der ganze Prozeß sonst gegen Punkttransformationen der  $q_k$  nicht invariant wäre! Dagegen könnte allerdings noch eine explizite Funktion der  $q_k$  als Faktor hinzutreten, d. h. eine Funktion, welche sich bei einer Punkttransformation der  $q_k$  als Invariante transformiert. (Für  $\Delta_p$  trifft dies bekanntlich nicht zu, sonst könnte man  $\Delta_p^{-\frac{1}{2}}$  ja fortlassen, indem man jener Zusatzfunktion den Wert  $\Delta_p^{\frac{1}{2}}$  erteilt.)

Deuten wir die Ableitung von  $T$  nach dem Argument, das ursprünglich  $p_k$  lautete, durch den Index  $p_k$  an, so erhalten wir als Ergebnis der Variation:

$$(30) \quad \begin{cases} 0 = \frac{1}{2} (\delta J_1 - E \delta J_2) \\ = \int \left\{ -\frac{\hbar^2}{8\pi^2} \sum_k \frac{\partial}{\partial q_k} \left( \Delta_p^{-\frac{1}{2}} T_{p_k} \left( q_k, \frac{\partial \psi}{\partial q_k} \right) \right) \right. \\ \quad \left. + (V(q_k) - E) \Delta_p^{-\frac{1}{2}} \psi \right\} \delta \psi dx; \end{cases}$$

die Eulersche Variationsgleichung lautet also:

$$(31) \quad \frac{\hbar^2}{8\pi^2} \Delta_p^{\frac{1}{2}} \sum_k \frac{\partial}{\partial q_k} \left\{ \Delta_p^{-\frac{1}{2}} T_{p_k} \left( q_k, \frac{\partial \psi}{\partial q_k} \right) \right\} - V(q_k) \psi + E \psi = 0.$$

Man erkennt unschwer, daß diese Gleichung die Gestalt (21) hat, wenn man sich an unser Operatorenzuordnungsgesetz erinnert und die Eulersche Gleichung für homogene Funktionen, angewendet auf die quadratische Form  $T$ , beachtet:

$$(32) \quad T(q_k, p_k) = \frac{1}{2} \sum_k p_k T_{p_k}(q_k, p_k).$$

In der Tat: wenn man von der linken Seite von (31), mit Ausschluß des Eigenwertglieder  $E\psi$ , den Operator ablöst und in ihm  $\frac{\hbar}{2\pi\sqrt{-1}} \frac{\partial}{\partial q_k}$  durch  $p_k$  ersetzt, so erhält man nach (32)

die negativ genommene Hamiltonsche Funktion (28). Dabei hat der Variationsprozeß ganz automatisch eine eindeutig bestimmte „Symmetrisierung“ des Operators ergeben, die ihn bis auf einen Faktor selbstadjungiert und gegen Punkttransformationen invariant macht und an der ich festhalten möchte, solange nicht ganz bestimmte Gründe für das Auftreten des oben<sup>1)</sup> als möglich erwähnten Zusatzfaktors unter den Integralen (29) und für eine bestimmte Form desselben sprechen.

Damit ist also die Auflösung des ganzen Systems der Heisenberg-Born-Jordanschen Matrixgleichungen zurückgeführt auf das natürliche Randwertproblem einer linearen partiellen Differentialgleichung. Hat man das Randwertproblem gelöst, so kann man jedes Matrizenelement, für das man sich interessiert, nach der Anweisung (6) durch Differentiationen und Quadraturen ausrechnen.

Zur Erklärung dessen, was dabei unter dem *natürlichen* Randwertproblem, d. h. unter den natürlichen Randbedingungen am natürlichen Rand des Konfigurationsraumes zu verstehen sei, verweise ich auf die durchgerechneten Beispiele.<sup>2)</sup> Es zeigt sich regelmäßig, daß der natürliche unendlichferne Rand eine Singularität der Differentialgleichung bildet und eindeutig nur die eine Randbedingung „Endlichbleiben“ zuläßt. Es dürfte das ein gemeinsamer Charakterzug der für die Anwendung der Theorie in erster Linie in Betracht kommenden mikromechanischen Probleme sein. Ist der Bereich der Lagekoordinaten künstlich beschränkt (Beispiel: Molekül in einem „Kasten“), so wird man diese Beschränkung grundsätzlich in der wohlbekanntesten Weise durch Einführung geeigneter potentieller Energien zu berücksichtigen haben. Auch das *Verschwinden* der Eigenfunktionen am Rand ist im allgemeinen in weitaus hinreichendem Maße erfüllt, wenn auch bei *gewissen* von den Integralen (6) Verhältnisse vorliegen, die eine besondere Überlegung nötig machen und auf die ich im Augenblick nicht eingehen möchte (es handelt sich um diejenigen Matrixelemente beim Keplerproblem, die nach Heisenberg dem Übergang von Hyperbelbahn zu Hyperbelbahn entsprechen).

1) Vgl. auch Ann. d. Phys. 79. S. 362 Anm. u. S. 510. 1926.

2) Vgl. die vorstehend zitierten Arbeiten!



Ich habe mich hier auf den Fall der klassischen Mechanik ohne Magnetfeld beschränkt, da mir die relativistisch-magnetische Verallgemeinerung noch nicht genügend abgeklärt scheint. Daß aber auch für sie der vollkommene Parallelismus der beiden neuen Quantentheorien bestehen bleiben wird, ist kaum zu bezweifeln.

Endlich noch eine allgemeine Bemerkung zu dem ganzen Formelapparat der §§ 2, 3 und 4. Es wurde in allen Formeln das zugrunde gelegte Orthogonalsystem als ein durchaus *diskretes* Funktionensystem angesehen. Das ist es nun in den wichtigsten Anwendungsfällen gerade *nicht*. Nicht nur beim Wasserstoffatom, sondern auch bei den höheren Atomen muß die Wellengleichung (31) außer einem Linienspektrum auch ein kontinuierliches Eigenwertspektrum besitzen, welches sich unter anderem in den kontinuierlichen *optischen* Spektren manifestiert, die an die Seriengrenze anschließen. Es schien besser, die Formeln und Gedankengänge vorläufig nicht mit dieser in Wahrheit unerläßlichen Verallgemeinerung zu belasten. Das Hauptziel dieser Note ist ja, die formalen Zusammenhänge der beiden Theorien möglichst klar herauszuarbeiten, und diese werden durch das Auftreten eines kontinuierlichen Spektrums sicher nicht wesentlich abgeändert. Eine wichtige Vorsicht: nicht ohne weiteres die Konvergenz der Entwicklung nach Eigenfunktionen vorauszusetzen, haben wir stets eingehalten. Diese Vorsicht ist durch die *Häufung der diskreten Eigenwerte im Endlichen* (an der Seriengrenze) ganz besonders geboten die ihrerseits mit dem Auftreten des kontinuierlichen Spektrums auf das engste zusammenhängt.

#### § 5. Vergleich der beiden Theorien.

Ausblick auf ein klassisches Verständnis der Intensität und Polarisation der emittierten Strahlung.

Falls die beiden Theorien — ich könnte füglich auch den Singular setzen — sich in ihrer gegenwärtig ausgesprochenen Form als haltbar, d. h. schon als die richtige Verallgemeinerung auch für kompliziertere Systeme erweisen sollten<sup>1)</sup>, so hat jede

1) Es besteht ein spezieller Grund, dies für fraglich zu halten. Beide Theorien übernehmen vorläufig die Energiefunktion aus der gewöhnlichen Mechanik. Nun besteht die *potentielle* Energie in den bisher

Diskussion über den Vorzug der einen oder der anderen in gewissem Sinne nur ein Scheinobjekt. Denn vom rein mathematischen Standpunkt sind sie ja völlig äquivalent und es kann sich nur um die grundsätzlich untergeordnete Frage der Rechenbequemlichkeit handeln.

Es gibt heute nicht wenige Physiker, welche ganz im Sinne von Kirchhoff und Mach die Aufgabe der physikalischen Theorie lediglich in einer *möglichst sparsamen* mathematischen Beschreibung der empirischen Zusammenhänge zwischen beobachtbaren Größen erblicken, d. h. einer Beschreibung, welche den Zusammenhang möglichst ohne Vermittlung prinzipiell unbeobachtbarer Elemente wiedergibt. Bei einer solchen Einstellung ist mathematische Äquivalenz mit physikalischer Äquivalenz beinahe gleichbedeutend. Höchstens könnte im vorliegenden Fall ein gewisser Vorzug der Matrixendarstellung darin erblickt werden, daß sie wegen ihrer vollkommenen Unanschaulichkeit nicht dazu verleitet, räumlich-zeitliche Bilder des atomistischen Geschehens zu formen, die vielleicht prinzipiell unkontrollierbar bleiben müssen. In diesem Zusammenhang ist aber jedenfalls folgende *Ergänzung* des oben gelieferten Äquivalenzbeweises von Interesse: Die Äquivalenz besteht *wirklich*, sie besteht *auch in umgekehrter Richtung*. Nicht nur lassen sich, wie oben gezeigt, aus den Eigenfunktionen die Matrizen konstruieren, sondern auch umgekehrt aus den numerisch gegebenen Matrizen die Eigenfunktionen. Die letzteren bilden also nicht etwa eine *willkürliche* und *spezielle*, dem Bedürfnis nach Anschaulichkeit fröhnende „fleischliche Umkleidung“ des kahlen Matrizen skeletts; was in der Tat einen erkenntnistheoretischen Vorzug des letzteren begründen würde. Man denke in den Gleichungen

$$(33) \quad q_i^{ik} = \int u_i(x) u_k(x) dx$$

behandelten Fällen in der Wechselwirkung von Massenpunkten, von denen vielleicht wenigstens der *eine* wegen seiner großen Masse auch undulationsmechanisch als punktförmig gelten kann (vgl. A. Einstein, Berl. Ber. 1925. S. 10). Es muß mit der Möglichkeit gerechnet werden, daß die Übernahme des Ansatzes für die potentielle Energie aus der gewöhnlichen Mechanik nicht mehr erlaubt ist, wenn *beide* „Punktladungen“ in Wahrheit ausgedehnte Schwingungszustände sind, die einander durchdringen.

die *linken* Seiten numerisch gegeben und die Funktionen  $u_i(x)$  gesucht. (NB.: die „Dichtefunktion“ ist absichtlich fortgelassen, die  $u_i(x)$  sollen für den Augenblick *selbst* Orthogonalfunktionen sein.) Dann lassen sich durch Matrizenmultiplikation, wobei übrigens keinerlei „Wälzung“, d. h. Integration per partes nötig ist, die Integrale

$$(34) \quad \int P(x) u_i(x) u_k(x) dx$$

ausrechnen, worin  $P(x)$  *irgendein* Potenzprodukt der  $q_i$  bedeutet. Die Gesamtheit dieser Integrale, bei festgehaltenem  $i$  und  $k$ , bilden das, was man die Gesamtheit der „*Momente*“ der Funktion  $u_i(x) u_k(x)$  nennt. Und man weiß, daß unter sehr allgemeinen Voraussetzungen eine Funktion durch die Gesamtheit ihrer Momente eindeutig festgelegt ist. Somit sind sämtliche Produkte  $u_i(x) u_k(x)$  eindeutig festgelegt, darunter auch die Quadrate  $u_i(x)^2$ , mithin auch die  $u_i(x)$  selbst. Die einzige Willkür liegt in der nachträglichen Ablösung der Dichtefunktion  $\rho(x)$ , z. B.  $r^2 \sin \vartheta$  bei räumlichen Polarkoordinaten. Darin wird man jedenfalls keinen *erkenntnistheoretischen* faut pas zu befürchten haben.

Im übrigen läßt sich aber der These, daß mathematische Äquivalenz mit physikalischer Äquivalenz gleichbedeutend sei, überhaupt nur bedingte Gültigkeit zuerkennen. Man denke z. B. an die beiden Ausdrücke für die elektrostatische Energie eines Systems geladener Leiter, als Raumintegral  $\frac{1}{2} \int \mathcal{E}^2 d\tau$  und als Summe über die Leiter  $\frac{1}{2} \sum e_i V_i$ . Die beiden Ausdrücke sind für die Elektrostatik vollkommen äquivalent, der eine läßt sich durch eine Integration per partes aus dem anderen gewinnen. Gleichwohl ziehen wir den ersten bedeutend vor und sagen, daß *er* die Energie räumlich richtig lokalisiere. Auf dem Boden der Elektrostatik läßt sich diese Bevorzugung freilich niemals begründen, vielmehr nur dadurch, daß der erste Ausdruck auch in der Elektrodynamik brauchbar bleibt, der zweite nicht.

Welcher von den beiden neuen Quantentheorien unter *diesem* Gesichtspunkt der Vorzug gebührt, läßt sich heute wohl noch kaum mit Sicherheit entscheiden. Als dem natürlichen Anwalt der einen von ihnen, wird man es mir aber nicht ver-

argen, wenn ich rückhaltlos — und vielleicht ohne eine gewisse Einseitigkeit vermeiden zu können — die Argumente hervorhebe, die zu ihren Gunsten sprechen.

Die Probleme, die außer den eigentlich optischen Fragen für den weiteren Ausbau der Atomdynamik in Betracht kommen, werden uns von der Experimentalphysik in eminent anschaulicher Form gestellt, als z. B.: wie prallen zwei stoßende Atome oder Moleküle voneinander ab, wie wird ein Elektron oder ein  $\alpha$ -Partikel abgelenkt, wenn es mit gegebener Geschwindigkeit und Flächengeschwindigkeit („Perpendikel vom Kern auf die Anfangsbahn“) durch ein Atom hindurchgeschossen wird? Um solchen Problemen näher zu treten, ist es durchaus nötig, den kontinuierlichen Übergang zwischen der makroskopischen anschaulichen Mechanik und der Mikromechanik des Atoms klar zu überblicken. Ich habe neulich<sup>1)</sup> auseinandergesetzt, wie ich mir diesen Übergang denke. Die Mikromechanik stellt sich als eine Verfeinerung der Makromechanik dar, welche durch die geometrisch-mechanische Kleinheit der Objekte notwendig gemacht wird und von ganz derselben Art ist wie der Übergang von der geometrischen zur physikalischen Optik; welcher letzterer geboten ist, sobald die Wellenlänge nicht mehr sehr groß ist gegen die Dimensionen der untersuchten Objekte oder gegen diejenigen Raumabmessungen, innerhalb welcher man genauen Aufschluß über die Lichtverteilung zu erhalten wünscht. — Es scheint mir außerordentlich schwierig, Probleme der oben bezeichneten Art in Angriff zu nehmen, solange man sich aus erkenntnistheoretischen Gründen verpflichtet fühlt, in der Atomdynamik die Anschauung zu unterdrücken und nur mit abstrakten Begriffen wie Übergangswahrscheinlichkeiten, Energieniveaus u. dgl. zu operieren.

Eine besonders wichtige Frage, ja vielleicht die Kardinalfrage der ganzen Atomdynamik, ist bekanntlich die Frage nach der *Koppelung* zwischen dem atomdynamischen Geschehen und dem elektromagnetischen Feld oder dem, was etwa an die Stelle des letzteren zu treten hat. Nicht nur gehört hierher der ganze Fragenkomplex der Dispersion, der Resonanz- und Sekundärstrahlung und der natürlichen Linienbreite; sondern

1) Ann. d. Phys. 79. S. 489. 1926.

die Bezeichnung gewisser atomdynamischer Größen als Emissionsfrequenzen, Linienintensitäten usw. erhält eine mehr als dogmatische Bedeutung überhaupt erst dann, wenn die Koppelung in irgendeiner Form mathematisch beschrieben ist. Hier hat nun die Matrizendarstellung der Atomdynamik auf die Vermutung geführt, daß in der Tat auch das elektromagnetische Feld anders, nämlich matrisenmäßig, dargestellt werden muß, um die Koppelung mathematisch formulieren zu können. Die Undulationsmechanik zeigt, daß hiezu jedenfalls kein Zwang besteht, denn der mechanische Feldskalar (von mir mit  $\psi$  bezeichnet) besitzt völlig die Eignung, sogar in die unveränderten Maxwell-Lorentzschen Gleichungen zwischen den elektromagnetischen Feldvektoren, als „Quelle“ derselben einzugehen; so wie umgekehrt die elektrodynamischen Potentiale in die Koeffizienten der Wellengleichung eingehen, welche den mechanischen Feldskalar bestimmt.<sup>1)</sup> Es verlohnt jedenfalls, die Darstellung der Koppelung einmal so zu *versuchen*, daß man in die unveränderten Maxwell-Lorentzschen Gleichungen als *Viererstrom* einen in passender Weise aus dem mechanischen Feldskalar  $\psi$  der Elektronenbewegung (vielleicht unter Vermittlung der Feldvektoren selbst oder der Potentiale) abgeleiteten Vierervektor einträgt. Es besteht sogar eine gewisse Hoffnung, daß man dann die Wellengleichung für  $\psi$  gleichfalls als Folge der Maxwell-Lorentzschen Gleichungen hinstellen könnte, nämlich als Kontinuitätsgleichung der Elektrizität. — Die Schwierigkeit, welche für das *Mehrelektronenproblem* zunächst darin liegt, daß  $\psi$  ja eine Funktion im *Konfigurationen-*

1) Ähnliche Gedanken äußert K. Lanczos in einer kürzlich erschienenen interessanten Note (Ztschr. f. Phys. 35. S. 812. 1926), welche gleichfalls schon die wertvolle Erkenntnis enthält, daß die Heisenbergsche Atomdynamik auch einer kontinuierlichen Deutung fähig ist. Im übrigen hat aber die Lanczossche Arbeit mit der vorliegenden weniger direkte Berührungspunkte, als man im ersten Augenblick meinen sollte. Die Determinierung des vorläufig noch ganz unbestimmt gelassenen Lanczos-schen Formelsystems ist *nicht* in der Richtung zu suchen, daß etwa Lanczosens symmetrischer Kern  $K(s, \sigma)$  mit der *Greenschen Funktion* unserer Wellengleichung (21) oder (31) zu identifizieren sei. Denn diese Greensche Funktion, wenn sie existiert, hat zu Eigenwerten die Quantenniveaus selbst. Von dem Lanczosschen Kern dagegen wird verlangt, daß er die *reziproken* Quantenniveaus zu Eigenwerten haben soll.

raum, nicht im wirklichen Raum ist, soll nicht unerwähnt bleiben. Immerhin möchte ich am Einelektronenproblem etwas näher erläutern, daß es möglich sein dürfte, auf diese Weise eine außerordentlich anschauliche Deutung der Intensität und Polarisation der Strahlung zu geben.

Betrachten wir das undulationsmechanische Bild des Wasserstoffatoms in einem Zustand, wo der mechanische Feldskalar  $\psi$  durch eine Reihe von diskreten Eigenfunktionen gegeben ist:

$$(35) \quad \psi = \sum_k c_k u_k(x) e^{\frac{2\pi \sqrt{-1} E_k t}{h}}$$

( $x$  steht hier für drei Variable, etwa  $r, \vartheta, \varphi$ ; die  $c_k$  denken wir reell und es ist rechts der reelle Teil zu nehmen.) Wir machen nun die Annahme, die Raumdichte der Elektrizität sei durch den reellen Teil von

$$(36) \quad \psi \frac{\partial \bar{\psi}}{\partial t}$$

gegeben. Der Querstrich soll hier das konjugiert Komplexe bedeuten. Man berechne dann für die Raumdichte

$$(37) \quad \left\{ \begin{array}{l} \text{Raumdichte} = 2\pi \sum_{(k,m)} c_k c_m \frac{E_k - E_m}{h} u_k(x) u_m(x) \\ \sin \frac{2\pi t}{h} (E_m - E_k), \end{array} \right.$$

wo die Summe über jede Kombination ( $k, m$ ) nur einmal zu erstrecken ist. Als Frequenzen treten in (37) nur mehr die Termdifferenzen auf. Diese sind so niedrig, daß die entsprechende Ätherwellenlänge groß ist gegen die Atomdimensionen, das heißt gegen denjenigen Bereich, innerhalb dessen (37) überhaupt merklich von Null verschieden ist.<sup>1)</sup> Die Ausstrahlung kann daher einfach nach dem Dipolmoment beurteilt werden, welches das ganze Atom nach (37) besitzt. Wir multiplizieren (37) mit einer kartesischen Koordinate  $q_i$  und mit der „Dichtefunktion“  $\rho(x)$  (im vorliegenden Fall  $r^2 \sin \vartheta$ ) und integrieren über den ganzen Raum. Nach (13) erhalten wir für die Komponente des Dipolmoments in der Richtung  $q_i$

$$(38) \quad M q_i = 2\pi \sum_{(k,m)} c_k c_m q_i^{k,m} \frac{E_k - E_m}{h} \sin \frac{2\pi t}{h} (E_m - E_k).$$

1) Ann. d. Phys. 79. S. 371. 1926.

Es ergibt sich also tatsächlich eine „Fourierentwicklung“ des elektrischen Moments des Atoms, in der bloß die Term-differenzen als Frequenzen vorkommen. In den Koeffizienten treten die Heisenbergschen Matricelemente  $q_i^{km}$  in solcher Weise auf, daß ihr mitbestimmender Einfluß auf die Intensität und Polarisation des betreffenden Teiles der emittierten Strahlung auf Grund der klassischen Elektrodynamik vollkommen verständlich wird.

Die vorstehende Skizze des Strahlungsmechanismus ist noch lange nicht voll befriedigend und keinesfalls endgültig. Der Ansatz (36) macht vom komplexen Rechenapparat in etwas freier Weise Gebrauch zur Beseitigung mißliebiger Schwingungskomponenten, deren Ausstrahlung überhaupt nicht auf dem einfachen Weg über das Dipolmoment des Gesamtatoms untersucht werden kann, weil die entsprechenden Ätherwellenlängen (etwa 0,01 Å.) weit unterhalb der Atomdimensionen liegen. Ferner ergibt die Raumdichte (37), wenn man über den ganzen Raum integriert, nach (5) Null, und nicht, wie man verlangen muß, einen endlichen, von der Zeit unabhängigen Wert, der auf die Elektronenladung normiert werden müßte. Schließlich wäre, ergänzend, der magnetischen Ausstrahlung Rechnung zu tragen, da ja bei räumlicher Verteilung der Elektrizitätsströmung Ausstrahlung möglich ist, auch ganz ohne daß ein elektrisches Moment auftritt, z. B. bei einer Rahmenantenne.

Immerhin erscheint die Hoffnung wohl berechtigt, daß auf Grund eines dem hier skizzierten sehr ähnlichen analytischen Mechanismus ein wirkliches Verständnis der Beschaffenheit der emittierten Strahlung sich wird erzielen lassen.

(Eingegangen 18. März 1926.)