8.C Nuclear Physics 12 (1959) 103—116; © North-Holland Publishing Co., Amsterdam

UNTERSUCHUNGEN ÜBER QUANTENTHEORIEN MIT INDEFINITER METRIK

A. UHLMANN
Theoretisch-Physikalisches Institut der Universität Jena

Eingegangen am 23. März 1959

Abstract: The conditions are examined under which a quantum theory with indefinite metric is equivalent to one with definite metric. The answer to this question depends on general properties of the physical states belonging to that theory. We call a physical state *proper*, if there exists at least one set of measurements the result of which individuates it completely; otherwise the physical state is called *improper*. It is necessary and sufficient for the existence of a physically equivalent quantum theory with definite metric, that there be proper physical states only. This result contains the theorem of Ascoli and Minardi [1]). There is no form with definite metric of a quantum theory having some improper states among its physical states. In such a theory, one finds, besides an effect already described in ref. [7]) that transition probability is not always symmetric.

1. Einleitung

Das mögliche Auftreten indefiniter Metrik in Quantentheorien wurde bereits 1942 von Dirac [2]) in Erwägung gezogen und wurde seitdem oft untersucht. Auf Grund der Möglichkeit, für das Modell von Lee [6]) exakte und geschlossene Lösungen zu finden, war dessen Analyse durch Källen und Pauli [5]) sowie durch Heisenberg [4]) besonders wichtig. Sie zeigte u.a., daß die von Lee gegebenen Operatorgleichungen mit Notwendigkeit auf eine indefinite Metrik führen.

Ascoli und Minardi [1]) waren wohl die ersten, die eine neue Seite des Problems zu untersuchen begannen, indem sie die allgemeine Frage stellten: Gegeben sei eine konsistente Quantentheorie mit nicht definiter Metrik. Kann man diese Theorie auf den Fall des Vorliegens definiter Metrik zurückführen? Ascoli und Minardi bejahen diese Frage. Andererseits wurde in Ref. [7]) ein noch sehr skizzenhafter Versuch des Aufbaus einer in diesem Sinne nicht "zurückführbaren" Quantentheorie unternommen. Die nähere Untersuchung, die in dieser Arbeit vorgenommen wird, zeigt, daß sich diese beiden Ergebnisse nicht widersprechen.

Tatsächlich sind die von Ascoli und Minardi gewählten Voraussetzungen scharf genug, um mit Hilfe eines genügend weit gefaßten Äquivalenzbegriffes die Zurückführbarkeit einer diesen Voraussetzungen genügenden Quantentheorie auf eine Theorie mit positiv definiter Metrik zu gewährleisten. Wir zeigen, daß erstens unter sehr allgemeinen Voraussetzungen die

Elimination der unphysikalischen Zustände stets möglich ist, und daß zweitens dieser Prozeß zu einer Quantentheorie mit definiter Metrik führt — vorausgesetzt, der Begriff des Zustandes eines Systems wird geeignet gefaßt.

Nennen wir einen physikalischen Zustand *eigentlich*, wenn mindestens ein System gleichzeitig meßbarer Observablen existiert, deren Messung diesen Zustand völlig charakterisiert, so können wir das erwähnte Resultat von Ascoli und Minardi wiefolgt charakterisieren: Beschreibt eine Quantentheorie nur eigentliche physikalische Zustände, so ist sie einer Quantentheorie mit definiter Metrik äquivalent.

Umgekehrt kann man *die* Quantentheorien mit indefiniter Metrik, die keine Rückführung auf eine Theorie mit definiter Metrik gestatten, durch das Auftreten uneigentlicher physikalischer Zustände völlig charakterisieren. Bei solchen Theorien treten neben einer schon in Ref. [7]) beschriebenen Abweichung Fälle von nichtsymmetrischer Übergangswahrscheinlichkeit auf. D.h. in solchen Theorien gibt es stets physikalische Zustände mit

$$W_{A\to B} \neq W_{B\to A}.$$

Methodisch schließt sich unsere Arbeit an die Grundidee von Minardi und Ascoli an, daß die Quantentheorien mit indefiniter Metrik axiomatisch in ihrer Grundstruktur zu erfassen sind und somit einer einheitlichen Axiomatik unterliegen müssen. Ein bemerkenswerter Schluß von Ascoli und Minardi ermöglicht es, dieses Programm im Sinne der berühmten Diracschen Axiomatik [3]) in Angriff zu nehmen: Bei der Formulierung einer Feldquantentheorie hat man im allgemeinen nicht nur Operatoren, die Observablen zugeordnet sind, zu berücksichtigen. Solche nichthermitischen Operatoren (z.B. Erzeugungsoperatoren) spielen beim Aufbau des Hilbert-Raumes eine entscheidende Rolle. Um jedoch die Theorie mit dem Experiment zu vergleichen, benötigen wir nur Operatoren, die Observablen entsprechen und deshalb ist für die Verbindung Theorie—Experiment nur wichtig, daß die Wirkung *dieser* Operatoren auf die Zustandsvektoren erklärt ist. Eine Quantenfeldtheorie mag deshalb in Bezug auf die Gesamtheit aller betrachteten Operatoren irreduzibel (siehe Abschnitt 3) sein, aber reduzibel bei Beschränkung auf die den beobachtbaren Größen zugeordneten Operatoren. Für die allgemeine Untersuchung können wir also gleich annehmen, daß der Hilbert-Raum der Zustände eine Darstellung derjenigen Operatoren ist, die den Observablen entsprechen ("physikalische Operatoren"), ohne uns darum zu kümmern, ob die Wirkung anderer Operatoren auf diesen Hilbert-Raum erklärt bezw. erklärbar ist. Wir stellen uns deshalb auf den Standpunkt, daß das physikalisch Wichtige einer Quantentheorie die *physikalischen* Operatoren und ihre Darstellung in einem Hilbert-Raum, der die möglichen Zustände des Systems beschreibt, sind.

2. Das mathematische Gerüst einer Quantentheorie

Das mathematische Gerüst einer Quantentheorie besteht aus zwei Bestandteilen.

Der erste Bestandteil ist ein System von Operatoren $\alpha, \alpha_1, \ldots, \beta, \beta_1, \ldots$, die den beobachtbaren Größen zugeordnet sind und zwischen denen gewisse Beziehungen bestehen, die wir durch

$$\begin{aligned} f_1(\alpha, \alpha_1, \ldots, \beta, \ldots) &= 0, \\ f_2(\alpha, \alpha_1, \ldots, \beta, \ldots) &= 0, \text{ usw.} \end{aligned} \tag{1}$$

andeuten wollen. Hierdurch ist eine Operatoralgebra R über den komplexen Zahlen gegeben, die von den Operatoren α, $\alpha_1, \ldots, \beta, \ldots$ erzeugt und durch die Relationen (1) bestimmt (definiert) ist. Die den beobachtbaren Größen zugeordneten Operatoren $\alpha, \ldots$ nennen wir *physikalische* Operatoren, zum Unterschied zu irgendwelchen anderen Elementen von R.

Da wir die physikalischen Operatoren später als hermitesche Operatoren deuten wollen, muß in R die durch

$$\text{a)} \quad (\gamma_1\gamma_2)^* = \gamma_2^*\gamma_1^*, \quad (c_1\gamma_1+c_2\gamma_2)^* = c_1^*\gamma_1^*+c_2^*\gamma_2^* \tag{2}$$

für beliebige $\gamma_1, \gamma_2 \in \mathrm{R}$

$$\text{b)} \quad \alpha = \alpha^* \text{ für jeden physikalischen Operator}$$

bestimmte Involution existieren (was den Relationen (1) gewisse Beschränkungen auferlegt). Hierbei sind die c_k komplexe Zahlen und die c_k^* die zu ihnen konjugierten.

Der zweite Bestandteil des mathematischen Gerüstes ist ein Hilbert-Raum Z, der die Algebra R involutionstreu darstellt und die möglichen physikalischen Zustände eines quantentheoretischen Systems beschreibt. Wir verstehen dabei den Begriff "Hilbert-Raum" in jenem erweiterten Sinn, der die Möglichkeit einer indefiniten Metrik einschließt. Das Wort „involutionstreu" bedeutet, daß mit der in R erklärten Involution (2)

$$\langle \mathrm{A}|\gamma^*|\mathrm{B}\rangle = \langle \mathrm{B}|\gamma|\mathrm{A}\rangle^*$$

für beliebige γ aus R und Vektoren $|\mathrm{A}\rangle$, $|\mathrm{B}\rangle$ aus Z gilt.

3. Reduzible und irreduzible Quantentheorien

Wir nennen eine Quantentheorie, die die Operatoralgebra R und den Darstellungsraum Z als mathematisches Gerüst besitzt *reduzibel*, wenn ein Teilraum Z_0 von Z folgender Beschaffenheit existiert:

a) Z_0 ist eine Darstellung von R, d.h. $\mathrm{R} \cdot \mathrm{Z}_0 = \mathrm{Z}_0$, die nicht nur aus der Null von Z besteht.

b) Ist Z_1 die Menge aller zu Z_0 orthogonalen Vektoren, so gibt es Vektoren $|\mathrm{A}\rangle$, $|\mathrm{B}\rangle$ in Z_1 mit

$$\langle \mathrm{A}|\mathrm{B}\rangle \neq 0.$$

Erfüllt nun Z_0 diese Bedingungen, so gilt auch für den Teilraum Z_1 die Formel $R \cdot Z_1 = Z_1$; denn ist $\langle A|B\rangle = 0$ für alle $|B\rangle \in Z_0$ und $\gamma \in R$ beliebig, so ist auch $\langle A|\gamma^*|B\rangle = 0$ wegen a) und deshalb ist

$$\langle B|\gamma|A\rangle = \langle A|\gamma^*|B\rangle^* = 0 \quad \text{für alle } |B\rangle \in Z_0,$$

d.h. $\gamma|A\rangle \in Z_1$.

Es folgt hieraus, daß mit Z_0 und Z_1 auch ihr mengentheoretischer Durchschnitt $Z_0 \cap Z_1$ eine involutionstreue Darstellung von R ist. Eine weitere involutionstreue Darstellung erhält man deshalb, wenn man in Z_1 modulo $Z_1 \cap Z_0$ rechnet. Es entsteht dann durch Restklassenbildung eine Darstellung †

$$Z_1 / Z_1 \cap Z_0$$

die in gewissem Sinn „weniger" reduzibel ist als Z_1 oder gar Z.
Man wird also erwarten, daß durch den eben skizzierten Prozeß aus einer reduziblen eine irreduzible Theorie gewinnbar ist. Wir wollen im Folgenden stets nur irreduzible Theorien betrachten ††.

Die Metrik des Hilbert-Raumes Z einer irreduziblen Theorie ist nicht entartet (nicht singulär); denn die Menge Z_0 aller $|B\rangle$, für die $\langle A|B\rangle = 0$ für alle $|A\rangle$ aus Z ist, erfüllt die Bedingungen a) und b) dieses Abschnittes †††.

4. Die Zuordnung der Vektoren des Hilbert-Raumes zu den physikalischen Zuständen

Sei R die Operatoralgebra und Z der Dastellungsraum einer irreduziblen Quantentheorie. Wir wollen uns mit der Frage beschäftigen, auf welche Weise den Vektoren aus Z physikalische Zustände zugeordnet werden können.

Sei $S = (\alpha_1, \alpha_2, \ldots)$ ein System kommutierender physikalischer Operatoren. Wir nennen es genau dann *vollständig*, wenn folgender Sachverhalt vorliegt: Sind $\lambda_1, \lambda_2, \ldots$ reelle Zahlen, so gibt es höchstens einen physikalischen Zustand, der bei simultaner Messung der $\alpha_1, \alpha_2, \ldots$ genau die Werte $\lambda_1, \lambda_2, \ldots$ liefert. Diesen durch S und die Werte $\lambda_1, \lambda_2, \ldots$ eindeutig bestimmten physikalischen Zustand bezeichnen wir mit $S(\lambda_1, \lambda_2, \ldots)$, vorausgesetzt, daß ein solcher überhaupt existiert *. Für den Sachverhalt „S ist ein vollständiges System kommutierender physikalischer Operatoren" sagen wir kürzer „S ist ein *vollständiger Satz.*"

† Für zwei Vektoren aus Z_1 setzen wir also genau dann $|A\rangle = |B\rangle$, wenn $|A\rangle - |B\rangle$ in $Z_1 \cap Z_0$ liegt. Die Metrik verschwindet auf $Z_1 \cap Z_0$ identisch; denn $Z_1 \cap Z_0$ ist zu sich selbst orthogonal. Kongruente Vektoren aus Z_1 besitzen deshalb gleiche Norm.

†† Es gibt somit keinen echten Teilraum von Z, der bereits eine Darstellung von R wäre.

††† Die Metrik $\langle A|B\rangle$ heißt *entartet*, wenn ein $|A\rangle$ mit $|A\rangle \neq 0$ existiert mit $\langle A|B\rangle = 0$ für alle $|B\rangle$.

* Hierdurch soll nicht gesagt werden, daß sich *jeder* physikalische Zustand auf diese Weise charakterisieren läßt (siehe Abschnitt 7).

Axiom I: Ist S ein vollständiger Satz, so existiert zu jedem physikalischen Zustand $S(\lambda_1, \lambda_2, \ldots)$ ein Vektor $|A\rangle$ in Z mit

$$\alpha_K|A\rangle = \lambda_K|A\rangle, \qquad \alpha_K \in S.$$

Ist $|B\rangle$ ein zweiter Vektor dieser Beschaffenheit, so ist

$$|B\rangle = c \cdot |A\rangle$$

mit einer komplexen Zahl c.
Die gemäß Axiom I zu den physikalischen Zuständen $S(\lambda_1, \lambda_2, \ldots)$ gehörenden Vektoren aus Z mögen die *physikalischen* S-*Eigenvektoren* genannt werden.

Satz 1: Sei S ein vollständiger Satz und $|A\rangle$ ein physikalischer S-Eigenvektor. Dann ist $\langle A|A\rangle \neq 0$. Ist $|B\rangle$ ein anderer (nicht notwendig physikalischer) Eigenvektor von S, so ist entweder $\langle A|B\rangle = 0$ oder es ist $|B\rangle = c \cdot |A\rangle$ mit einer komplexen Zahl c.
Zum Beweis nehmen wir $|B\rangle \neq c \cdot |A\rangle$ an. Es gibt dann einen zu S gehörenden Operator α mit

$$\alpha|A\rangle = \lambda \cdot |A\rangle, \quad \alpha|B\rangle = \mu \cdot |B\rangle, \quad \lambda \neq \mu.$$

Aus $\langle A|\alpha|B\rangle = \langle B|\alpha|A\rangle^*$ folgt dann $(\mu - \lambda^*)\ \langle A|B\rangle = 0$. Da $|A\rangle$ nach Voraussetzung ein physikalischer S-Eigenvektor sein sollte, ist λ reell und somit folgt $\langle A|B\rangle = 0$.

Jeder Vektor $|C\rangle$ besitzt nun eine Entwicklung

$$|C\rangle = c \cdot |A\rangle + \sum |B_k\rangle,$$

wobei die $|B_k\rangle$ von $|A\rangle$ unabhängige S-Eigenvektoren (nicht notwendig physikalische) sind. Es folgt $\langle A|C\rangle = c \cdot \langle A|A\rangle$. Wäre $\langle A|A\rangle = 0$, so wäre die Metrik auf Z entartet. Dies aber widerspricht der Voraussetzung, daß es sich um eine irreduzible Quantentheorie handelt.

5. Das Superpositionsprinzip

Ist S ein vollständiger Satz, so bezeichnen wir mit Z(S) den von den physikalischen S-Eigenvektoren aufgespannten Teilraum von Z und mit $Z_0(S)$ den Raum der zu Z(S) orthogonalen Vektoren.

Aus Satz 1 folgt, daß $Z_0(S)$ von den nicht-physikalischen S-Eigenvektoren aufgespannt wird. Deshalb ist

$$Z = Z(S) + Z_0(S), \quad Z(S) \cap Z_0(S) = 0. \tag{3}$$

Hieraus folgt, da Z(S) und $Z_0(S)$ zueinander orthogonal sind, daß die Beschränkung der Metrik auf Z(S) bzw. auf $Z_0(S)$ zu einer nicht ausgearteten Metrik in Z(S) bezw. $Z_0(S)$ führt. Natürlich haben wir Z(S) in Hinblick auf das Superpositionsprinzip gebildet: Da Z(S) von physikalischen S-Eigenvektoren erzeugt wird, wird jeder Vektor aus Z(S) einen gewissen physikalischen Zustand beschreiben.

Axiom II: Ist S ein vollständiger Satz, so entspricht jedem von Null verschiedenen Vektor aus Z(S) genau ein physikalischer Zustand und umgekehrt jedem physikalischen Zustand bis auf einen konstanten Faktor genau ein Vektor aus Z(S).

Betrachten wir zwei vollständige Sätze S_1 und S_2. Im allgemeinen Fall wird dann $Z(S_1) \neq Z(S_2)$ sein. Nach Axiom II gehört zu jedem physikalischen Zustand sowohl ein Vektor $|A_1\rangle$ aus $Z(S_1)$ als auch ein Vektor $|A_2\rangle$ aus $Z(S_2)$. Es muß folglich eine Abbildung τ_{21} von $Z(S_1)$ auf $Z(S_2)$ existieren, die $|A_1\rangle$ in $|A_2\rangle$ überführt:

$$|A_1\rangle \to |A_2\rangle = \tau_{21}|A_1\rangle. \tag{4}$$

Damit das Superpositionsprinzip gewahrt bleibt, muß für diese Abbildung

$$\tau_{21}(c \cdot |A_1\rangle + d \cdot |B_1\rangle) = c \cdot |A_2\rangle + d \cdot |B_2\rangle \tag{4a}$$

gelten. Eine solche Zuordnung gibt es in der Tat:

Ist $|A_1\rangle$ aus $Z(S_1)$, so gibt es wegen Formel (3) genau eine Zerlegung

$$|A_1\rangle = |A_2\rangle + |A_2{}^0\rangle, \quad |A_2\rangle \in Z(S_2), \quad |A_2{}^0\rangle \in Z_0(S_2) \tag{5}$$

und die Definition

$$\tau_{21}|A_1\rangle = |A_2\rangle \tag{5a}$$

erfüllt die Bedingung (4a).

Nun muß die obige Zuordnung offenbar *symmetrisch* sein: Die analog definierte Abbildung τ_{12} von $Z(S_2)$ auf $Z(S_1)$ muß bis auf einen konstanten Faktor zu τ_{21} reziprok sein

$$\tau_{12} \cdot \tau_{21} = \text{const.} \tag{6}$$

Dies ist genau dann der Fall, wenn aus (5)

$$|A_2\rangle = c \cdot |A_1\rangle + |A_1{}^0\rangle, \quad |A_1{}^0\rangle \in Z_0(S_2), \quad c = \text{feste Zahl} \tag{5b}$$

folgt; denn dann ist

$$\tau_{12} \cdot \tau_{21} = c. \tag{6a}$$

Noch schärfer muß man fordern, daß die Abbildungen zwischen den Z(S) *transitiv* sind: Liegen drei vollständige Sätze S_i vor und sind τ_{rs} die nach (5a) definierten Abbildungen, so muß

$$\tau_{12} \cdot \tau_{23} \cdot \tau_{31} = \text{const.} \tag{7}$$

gelten.

Die Bedingungen (6) und (7) sind nicht nur notwendig, sondern auch hinreichend für die Gewährleistung des Superpositionsprinzips gemäß Axiom II. Mehr noch, aus (6) bzw. (6a) folgt automatisch

$$\langle \tau_{21} A_1 | \tau_{21} B_1 \rangle = c \cdot \langle A_1 | B_1 \rangle; \qquad |A_1\rangle, |B_1\rangle \in Z(S_1). \tag{8}$$

Aus (5) bzw. (5b) folgt nämlich

$$\langle A_2 | A_1 \rangle = \langle A_2 | A_2 \rangle \quad \text{bzw.} \quad \langle A_1 | A_2 \rangle = c \cdot \langle A_1 | A_1 \rangle.$$

Hieraus folgt Formel (8) zunächst für den Fall $|A_1\rangle = |B_1\rangle$, aus dem der allgemeine durch Ausrechnung von $|A_1\rangle + d \cdot |B_1\rangle$ in bekannter Weise folgt. Bemerken wir noch, daß $\langle A_2|A_1\rangle$ reell ist und deshalb auch $\langle A_1|A_2\rangle$ und schließlich c reell sein wird.

Betrachten wir kurz den Fall, daß die Metrik auf einem Raum Z(S) *definit* ist. Dann ist wegen (8) die Metrik auf jedem Raum $Z(S_1)$ auch definit. Seien nun zwei physikalische Zustände gegeben, die sich in Z(S) durch $|A\rangle$ und $|B\rangle$, in $Z(S_1)$ aber durch $|A_1\rangle$ und $|B_1\rangle$ darstellen lassen. Es gibt dann eine von der Wahl des vollständigen Satzes S unabhängige Übergangswahrscheinlichkeit; denn aus (8) folgt

$$\left|\frac{\langle A|B\rangle^2}{\langle A|A\rangle \cdot \langle B|B\rangle}\right| = \left|\frac{\langle A_1|B_1\rangle^2}{\langle A_1|A_1\rangle \cdot \langle B_1|B_1\rangle}\right|. \tag{9}$$

Obwohl also die Theorie irreduzibel ist und unphysikalische Zustände existieren mögen, kann bei Gültigkeit der Bedingungen (6) und (7) eine allen Anforderungen genügende Übergangswahrscheinlichkeit definiert werden — vorausgesetzt, die Beschränkung der Metrik auf die Z(S) ist definit.

Die Tatsache, daß die Teilräume Z(S) wegen (8) im wesentlichen dieselbe metrische Struktur besitzen, legt die Frage nahe, ob sich die unphysikalischen Vektoren $Z_0(S)$ auf irgendeinem Weg aus der Theorie entfernen lassen. Aus unserer Voraussetzung nach Irreduzibilität der Theorie folgt, daß man den Gesamtraum Z nur dann verändern kann, wenn man die zwischen den physikalischen Operatoren $\alpha_1\ \alpha_1, \ldots$, bestehenden Beziehungen (1) gleichzeitig in *nicht-trivialer* Weise verändert: während es sich bei der im Abschnitt 3 erwähnte Reduktion um einen Übergang †

$$R, Z \to R, Z'$$

handelt, muß die Ausschaltung der unphysikalischen Zustände mit Notwendigkeit ein Übergang

$$R, Z \to R', Z'$$

sein. Wir nennen die beiden Quantentheorien R, Z und R′, Z′ *physikalisch äquivalent*, wenn aus ihnen dieselben physikalischen Folgerungen gezogen werden können.

6. Das „Ausfegen" der nicht-physikalischen Zustände

Wir beweisen nun den Satz:

Satz 2: Zu jeder Quantentheorie R, Z, die den Axiomen I und II genügt, existiert eine physikalisch äquivalente Theorie R′, Z′, die ebenfalls diesen Axiomen genügt und die keine unphysikalischen Vektoren besitzt. D.h. ist

† Wir betonen, daß durch die Reduktion (Abschnitt 3) die Relationen zwischen die *physikalischen* Operatoren bestehen bleiben. Über Operatoren, denen *keine* Observablen entsprechen, ist damit nichts gesagt.

S' irgend ein vollständiger Satz, so ist

$$Z' = Z'(S').$$

Unter etwas schärferen Voraussetzungen wurde ein ähnlicher Satz von Ascoli und Minardi bewiesen, die allerdings nicht die Möglichkeit $Z(S) \neq Z(S_1)$ in Betracht zogen und deshalb mit dem in Abschnitt 3 erwähnten Reduktionsprozeß auskommen. Siehe auch den nächsten Abschnitt.

Zum Beweis wählen wir uns einen vollständigen Satz S_0 aus und setzen $Z' = Z(S_0)$.

Ist nun S_1 ein beliebiger anderer vollständiger Satz und ist der physikalische Operator α in S_1 enthalten, so definieren wir mit Hilfe der im Abschnitt 5 erklärten Abbildungen τ den Operator

$$\alpha' = \tau_{10}^{-1} \alpha \tau_{10}, \tag{11}$$

der offensichtlich $Z(S_0)$ d.h. Z' in sich überführt. Wegen (8) ist α' hermitesch in Z'. Jedem physikalischen Operator α darf natürlich nur ein Operator α'. entsprechen. Sind also S_1 und S_2 vollständige Sätze und ist der Operator α sowohl in S_1 als auch in S_2, so muß

$$\tau_{10}^{-1} \alpha \tau_{10} = \tau_{20}^{-1} \alpha \tau_{20}$$

gelten. D.h. der Operator α muß mit dem Operator $\tau_{10} \tau_{20}^{-1}$ kommutieren. Wegen Formel (6) und (7) muß also α mit τ_{21} kommutieren. Dies zeigen wir folgendermaßen. Ist $|A_1\rangle$ in $Z(S_1)$, so ist wegen (5)$\tau_{21}|A_1\rangle$ durch die Forderung

$$|A_1\rangle - \tau_{21}|A_1\rangle \in Z_0(S_2), \quad \tau_{21}|A_1\rangle \in Z(S_2)$$

eindeutig bestimmt. Da α zu S_2 gehört, läßt es sowohl $Z(S_2)$ als auch $Z_0(S_2)$ invariant, und somit ist

$$\alpha|A_1\rangle - \alpha\tau_{21}|A_1\rangle \in Z_0(S_2), \quad \alpha\tau_{21}|A_1\rangle \in Z(S_2).$$

Andererseits ist definitionsgemäß

$$\alpha|A_1\rangle - \tau_{21}\alpha|A_1\rangle \in Z_0(S_2), \quad \tau_{21}\alpha|A_1\rangle \in Z(S_2)$$

und der Vergleich liefert

$$\tau_{21}\alpha|A_1\rangle = \alpha\tau_{21}|A_1\rangle \quad \text{für alle } |A_1\rangle \in Z(S_1).$$

Somit hängt die Zuordnung (11) nur vom physikalischen Operator α ab und nicht davon, welchen vollständigen, α enthaltenden Satz man zur Bestimmung von α' wählt.

Indem man nun alle physikalischen Operatoren α gemäß der Vorschrift (11) abändert, erhält man eine Theorie, die Z' als Darstellungsraum besitzt und *keine* unphysikalischen Vektoren besitzt. Diese Überführung läßt alle physikalischen Folgerungen unangetastet:

a) Wegen (11) sind die zu physikalischen Zuständen gehörenden Eigenwerte von α wiederum Eigenwerte von α'.

b) Jedem vollständigen Satz S entspricht gemäß (11) ein vollständiger Satz S'.

c) Wegen (8) werden die metrischen Beziehungen zwischen den physikalischen Vektoren aus Z(S), S beliebig, bis auf triviale Abänderungen in Z' reproduziert. Dies trifft wegen (9) insbesondere auf die Ausdrücke

$$\left| \frac{\langle A|B\rangle^2}{\langle A|A\rangle\langle B|B\rangle} \right|$$

zu.

Was jedoch *nicht* erhalten bleibt ist offensichtlich die Gesamtheit der Relationen (1), da der in (11) vorkommende Operator τ_{10} von α abhängt! Es entstehen deshalb *neue* Relationen

$$\begin{aligned} f'_1(\alpha', \alpha'_1, \ldots, \beta', \ldots) &= 0, \\ f'_2(\alpha', \alpha'_1, \ldots, \beta', \ldots) &= 0, \end{aligned} \tag{12}$$

usw.

Jedoch kann man auch hier noch eine allgemeine Aussage machen:

d) Besteht zwischen den physikalischen Operatoren $\alpha_1, \alpha_2, \ldots$ eine Beziehung $f(\alpha_1, \alpha_2, \ldots) = 0$ und kommutieren die Operatoren $\alpha_1, \alpha_2, \ldots$ untereinander, so gilt dieselbe Beziehung auch zwischen den neuen Operatoren $\alpha'_1, \alpha'_2, \ldots$

Eine letzte Bemerkung betrifft die Abhängigkeit der Theorie R', Z' von der Wahl $Z' = Z(S_0)$. Wegen (6) und (7) kann nachgewiesen werden, daß bei einer anderen Wahl $Z'' = Z(S_1)$ und analoger Definition von R'' die Abbildung τ_{10} die Eigenschaft $R'' = \tau_{10} R' \tau_{10}^{-1}$ besitzt und sich folglich die beiden Theorien nur in trivialer Weise unterscheiden.

7. „Eigentliche" und „uneigentliche" physikalische Zustände

Wegen Satz 2 können wir nun ohne Beschränkung der Allgemeinheit annehmen, daß R, Z eine irreduzible Theorie *ohne nicht-physikalische Zustände* ist. Insbesondere ist dann

$$Z = Z(S) \text{ für jeden vollständigen Satz S.} \tag{13}$$

Der Normalfall wird dann sein, daß Z *definite* Metrik trägt. Wann kann man dies mit Sicherheit garantieren und wann nicht?

Ist $|A\rangle \in Z$ ein Vektor, so entspricht ihm nach Axiom II und wegen obigen Voraussetzungen ein physikalischer Zustand. Wir nennen diesen Zustand *eigentlich* (proper), wenn mindestens ein vollständiger Satz S existiert, so daß $|A\rangle$ ein S-Eigenvektor ist. Im anderen Fall nennen wir $|A\rangle$ *uneigentlich* (improper). Wir können diese Definition auch so wenden:

Liegt ein uneigentlicher Zustand vor, so enthält *jeder* vollständige Satz mindestens eine Observable, die beim Vorliegen dieses Zustandes keinen scharfen Wert annimmt. D.h. der Unterschied zwischen eigentlichen und uneigentlichen Zuständen ist im Prinzip beobachtbar.

Satz 3: Zu jeder Quantentheorie, die den Axiomen I und II genügt und die nur eigentliche physikalische Zustände beschreibt, gibt es eine physikalisch äquivalente Theorie mit definiter Metrik.
Dies ist das wesentliche Resultat von Ascoli und Minardi, die die physikalischen Zustände per Definition als eigentlich voraussetzen.

Der Beweis von Satz 3 ist leicht. Nach Satz 2 langt es, sich auf eine Theorie ohne nicht-physikalische Zustände zu beschränken. Besitzt eine solche Theorie nur eigentliche Zustände, so ist nach Satz 1 für jeden ihrer Vektoren $\langle A|A\rangle \neq 0$, $|A\rangle \neq 0$ vorausgesetzt. Dies ist aber nur bei definiter Metrik möglich. Es ist wert, auch die Umkehrung dieses Satzes zu vermerken:

Satz 4: Beschreibt eine Quantentheorie auch uneigentliche physikalische Zustände, so besitzt keine zu ihr physikalisch äquivalente Theorie definite Metrik.
Denn sonst hätten wir (eventuell nach Reduzierung und „Ausfegen" der nicht-physikalischen Zustände) eine Quantentheorie mit definiter Metrik und eine solche kennt nur eigentliche Zustände.

Betrachten wir nun Theorien mit uneigentlichen Zuständen. Wegen (13) folgt aus Abschnitt 5 bereits, daß sich *jeder* physikalische Zustand nach eigentlichen Zuständen "entwickeln" läßt. Genauer: Ist S ein vollständiger Satz und $|A_k\rangle$, $k = 1, 2, \ldots$ ein vollständiges System von S-Eigenvektoren, so besitzt jeder Vektor $|A\rangle$ eine Zerlegung

$$|A\rangle = \sum c_k |A_k\rangle, \tag{14a}$$

wobei wegen Satz 1 die Normierung

$$\langle A_k|A_k\rangle = \pm 1 \tag{14b}$$

vorausgesetzt werden darf. Wir werden dann die Wahrscheinlichkeit, bei der Messung des Zustandes $|A\rangle$ den Zustand $|A_k\rangle$ zu finden, proportional $|c_k|^2$ annehmen dürfen. Infolge der Normierungsvorschrift für Wahrscheinlichkeiten haben wir also

$$W_{|A\rangle \to |A_k\rangle} = \frac{|c_k|^2}{\sum |c_i|^2}\,. \tag{15a}$$

Um hierfür einen geschlosseneren Ausdruck anzugeben, definieren wir den vom vollständigen Satz S abhängigen Operator $\varepsilon = \varepsilon(S)$ durch,

$$\varepsilon|A_k\rangle = \begin{matrix} +|A_k\rangle & \text{falls} & \langle A_k|A_k\rangle = +1, \\ -|A_k\rangle & \text{falls} & \langle A_k|A_k\rangle = -1. \end{matrix}$$

Für diesen Operator gilt

$$\varepsilon^2 = 1, \quad \varepsilon^* = \varepsilon, \quad \varepsilon\alpha = \alpha\varepsilon \quad \text{für} \quad \alpha \in S, \tag{16}$$

und man weist leicht nach, daß ε durch S eindeutig bestimmt ist. Man sieht aus der Definition, daß die Operatoren $\frac{1}{2}(1 \pm \varepsilon)$ Projektoren sind, die den Gesamtraum Z in einen Teilraum mit positiv und einen Teilraum mit negativ definiter Metrik zerlegen. Hiernach ist

$$\langle A|B\rangle_S = \langle A|\tfrac{1}{2}(1+\varepsilon)|B\rangle - \langle A|\tfrac{1}{2}(1-\varepsilon)|B\rangle = \langle A|\varepsilon|B\rangle \tag{17}$$

eine positiv definite Metrik in ganz Z. Da aus (15a)

$$c_k = \langle A_k|A\rangle_S, \quad \langle A_k|A_k\rangle_S = 1,$$
$$\langle A|A\rangle_S = \sum |c_k|^2$$

folgt, ist

$$W_{|A\rangle \to |A_k\rangle} = \frac{|\langle A|A_k\rangle_S|^2}{\langle A|A\rangle_S} = \frac{|\langle A|A_k\rangle_S|^2}{\langle A|A\rangle_S \langle A_k|A_k\rangle_S}. \tag{15b}$$

Damit haben wir folgende

Definition: Ist $|A\rangle$ ein Zustand und $|B\rangle$ ein eigentlicher Zustand (beide physikalisch), so ist die Übergangswahrscheinlichkeit $|A\rangle \to |B\rangle$ wiefolgt bestimmt: Ist S ein vollständiger Satz und $|B\rangle$ ein S-Eigenvektor, so ist

$$W_{|A\rangle \to |B\rangle} = \frac{|\langle A|B\rangle_S|^2}{\langle A|A\rangle_S \langle B|B\rangle_S}.$$

Enthält die Theorie uneigentliche Zustände, so gibt es mit Sicherheit zwei vollständige Sätze S_1 und S_2 mit $\varepsilon(S_1) \neq \varepsilon(S_2)$; denn sonst wäre entweder die Metrik definit oder die Theorie reduzibel, was den gemachten Voraussetzungen widerspricht (alle physikalischen Operatoren wären mit $\frac{1}{2}(\varepsilon(S_1)+1)$ vertauschbar). Hieraus folgt, daß keine Gleichung der Form

$$\langle A|B\rangle_{S_1} = \lambda \cdot \langle A|B\rangle_{S_2}, \qquad \lambda \text{ fest} \tag{+}$$

existiert. Wir können deshalb S_k-Eigenvektoren $|A_k\rangle$ so finden, daß

$$W_{A_2 \to A_1} = \frac{|\langle A_2|A_1\rangle_{S_1}|^2}{\langle A_1|A_1\rangle_{S_1}\langle A_2|A_2\rangle_{S_1}} \neq \frac{|\langle A_1|A_2\rangle_{S_2}|^2}{\langle A_1|A_1\rangle_{S_2}\langle A_2|A_2\rangle_{S_2}} = W_{A_1 \to A_2} \tag{++}$$

ist. Denn da die S_k-Eigenvektoren ein vollständiges Orthogonalsystem bilden, könnte man bei Nichtbestehen von (++) auf (+) schließen. Damit haben wir

Satz 5: In einer Theorie mit uneigentlichen physikalischen Zuständen gibt es stets eigentliche physikalische Zustände $|A\rangle$, $|B\rangle$ mit

$$W_{|A\rangle \to |B\rangle} \neq W_{|B\rangle \to |A\rangle}.$$

Betrachten wir nun nochmals die Entwicklung (14) und einen Operator α aus S. Der "Erwartungswert" $\bar{\alpha}$ wird dann

$$\bar{\alpha} = \frac{\sum \lambda_k |c_k|^2}{\sum |c_k|^2}, \quad \alpha|A_k\rangle = \lambda_k|A_k\rangle \tag{18a}$$

sein. Hieraus folgt leicht

$$\bar{\alpha}(\mathrm{S}) = \frac{\langle \mathrm{A}|\alpha|\mathrm{A}\rangle_{\mathrm{S}}}{\langle \mathrm{A}|\mathrm{A}\rangle_{\mathrm{S}}}, \tag{18b}$$

wobei die Schreibweise $\bar{\alpha}(\mathrm{S})$ andeutet, daß nicht nur von α, sondern auch von S abhängen kann. Es ist also *möglich*, daß

$$\bar{\alpha}(\mathrm{S}_1) \neq \bar{\alpha}(\mathrm{S}_2) \quad \text{für} \quad \alpha \in \mathrm{S}_1, \alpha \in \mathrm{S}_2 \tag{19}$$

ist. D.h. es sind zwar nicht die wirklich gemessenen Werte (die Eigenwerte von α) bei der Messung von S_1 und S_2 verschieden, wohl aber ihre statistische Verteilung.

Satz 6: Liegt eine Quantentheorie mit uneigentlichen physikalischen Zuständen vor und gehört der physikalische Operator α zu zwei vollständigen Sätzen S_1 und S_2, so ist folgendes Verhalten möglich: Die Analyse eines Zustandes nach den Observablen S_1 liefert einen anderen Erwartungswert $\bar{\alpha}(\mathrm{S}_1)$ als die Analyse nach den Observablen des vollständigen Satzes S_2. Während Satz 5 ein notwendiges und hinreichendes Kriterium für das Vorhandensein uneigentlichen Zustände liefert, ist die in Satz 6 ausgesprochene Erscheinung hierfür nur hinreichend aber nicht notwendig.

Herrn Prof. Dr. G. Heber möchte ich für anregende Diskussionen und für sein freundliches Interesse herzlich danken.

Anhang

DER HEISENBERGSCHE STREUOPERATOR

In einer irreduziblen Quantentheorie mit Operatoralgebra R und Darstellungsraum Z betrachten wir die Gleichung

$$i\hbar \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}|\mathrm{A}(t)\rangle = H(t)|\mathrm{A}(t)\rangle \tag{20}$$

mit physikalischen Operatoren $H(t)$ aus R, die das Wechselwirkungsbild beinhalten soll. Nach dem Vorbild Heisenbergs können wir zu Gleichung (20) ganz formal einen Streuoperator **S** konstruieren: Es ist

$$|\mathrm{A}_2\rangle = \mathbf{S}|\mathrm{A}_1\rangle$$

genau dann, wenn eine Lösung $|\mathrm{A}(t)\rangle$ von (20) mit

$$\lim_{t\to-\infty} |\mathrm{A}(t)\rangle = |\mathrm{A}_1\rangle, \qquad \lim_{t\to+\infty} |\mathrm{A}(t)\rangle = |\mathrm{A}_2\rangle$$

existiert. Da die physikalischen Operatoren hermitesch bezüglich der in Z herrschenden Metrik sind, ist der Operator **S** normerhaltend, d.h. unitär. Ist jedoch S ein vollständiger Satz, so wird im allgemeinen

$$\mathbf{S}\mathrm{Z}(\mathrm{S}) \not\subset \mathrm{Z}(\mathrm{S}) \tag{21}$$

sein und somit **S** aus dem Bereich der physikalischen Zustände herausführen. Der Fall (21) kann natürlich nicht vorkommen, wenn $Z(S) = Z$ ist und die Theorie keine unphysikalischen Zustände besitzt. Führen wir deshalb das in Abschnitt 6 besprochene "Ausfegen" bei der Theorie R, Z mit unphysikalischen Zuständen durch. Bezeichnet R′, Z′ die neu entstandene Theorie und **S′** den zugehörigen Streuoperator, so zeigt sich, daß zwischen **S** und **S′** keine allgemeingültigen (d.h. in jeder theoretisch möglichen Quantentheorie geltenden) Beziehungen bestehen.

In der Tat, zur Durchführung des Prozesses haben wir zu jeder Zeit t einen vollständigen Satz $S(t)$ mit $H(t) \in S(t)$ aufzusuchen und nach (4) und (5) die Abbildungen

$$Z(S_0) \xrightarrow{\tau_0(t)} Z(S(t)) \tag{22a}$$

zu bestimmen. Dann ist

$$H'(t) = \tau_0^{-1}(t) H(t) \tau_0(t). \tag{33b}$$

Es ist klar, daß der Zusammenhang zwischen den Lösungen von (20) und denen von

$$i\hbar \frac{d}{dt} |A'(t)\rangle = H'(t) |A'(t)\rangle \tag{20a}$$

beliebig kompliziert sein kann, wenn die $\tau_0(t)$ eine komplizierte Zeitabhängigkeit zeigen. Es erscheint deshalb sinnvoll, den Streuoperator erst nach Beseitigung der nicht-physikalischen Zustände zu bilden. Der mit (20a) gebildete Streuoperator **S′** ist nun unitär und führt physikalische Zustände wieder in solche über. Haben wir deshalb eine Quantentheorie mit nur eigentlichen Zuständen vor uns, so ist die Metrik definit und wir sind fertig.

Untersuchen wir nun den Fall, daß die Theorie auch uneigentliche physikalische Zustände beschreibt. Zur Vereinfachung der Schreibweise nehmen wir gleich an, daß Z bereits keine unphysikalischen Zustände mehr enthält. Betrachten wir zu diesem Zweck einen vollständigen Satz S, mit dessen Hilfe Anfangs- und Endzustand analysiert werden sollen. Es zeigt sich, daß S für diese Aufgabe nicht völlig beliebig gewählt werden darf, damit das Streuproblem eine sinnvolle Lösung besitzt:

Satz 7: Sei **S** der Streuoperator und S ein vollständiger Satz. Die Analyse des Zustandes vor und nach der Streuung mit Hilfe der Observablen aus S ist mit dem Streuprozeß verträglich, wenn

$$\varepsilon(S) \cdot \mathbf{S} = \mathbf{S} \cdot \varepsilon(S) \tag{23}$$

ist.

Denn aus (23) folgt, daß **S** nicht nur unitär bezüglich der in Z gegebenen (indefiniten!) Metrik $\langle A|B\rangle$ ist, sondern auch bezüglich der positiv definiten Metrik $\langle A|B\rangle_S$. Bei Beschränkung auf die Operatoren aus S (oder allgemeiner auf solche, die mit $\varepsilon(S)$ kommutieren) und bei Benutzung der positiv definiten Metrik $\langle A|B\rangle_S$ ist deshalb alles wie in einer Quantentheorie mit nur eigentlichen Zuständen.

Literatur

1) R. Ascoli und E. Minardi, Nuclear Physics **9** (1958) 242
2) P. A. M. Dirac, Proc. Roy. Soc. A **180** (1942) 1
3) P. A. M. Dirac, The Principles of Quantum Theory (Oxford, 1947)
4) W. Heisenberg, Nuclear Physics **4** (1957) 532
5) G. Källén und W. Pauli, Mat. Fys. Medd. Dan. Vid. Selsk. **30**, No. 7 (1955)
6) T. D. Lee, Phys. Rev. **95** (1954) 1329
7) A. Uhlmann, Nuclear Physics **9** (1958) 588