Sitzungsber. Abt. II (2003) 212: 27–55

Sitzungsberichte
Mathematisch-naturwissenschaftliche Klasse Abt. II
Mathematische, Physikalische und Technische Wissenschaften

Deterministische Physik

Von

Edmund Hlawka

(Vorgelegt in der Sitzung der math.-nat. Klasse am 10. April 2003
durch das w. M. Edmund Hlawka)

Einleitung

Der Ausgangspunkt der vorliegenden Arbeit sind vor allem drei Aufsätze von H. WEYL, die in den Göttinger Nachrichten der Gesellschaft der Wissenschaften math.-phys. Klasse in den Jahren 1930, 1931 und 1932 erschienen sind. Die dritte Arbeit (alle waren physikalischer Natur) hat noch zwei Koautoren, nämlich die Physiker G. RUMER und E. TELLER. Es hatte nämlich G. RUMER im gleichen Jahr und in der gleichen Zeitschrift eine Methode zur Bestimmung der Bindungsenergie von Molekülen entwickelt und an Beispielen dargelegt. H. WEYL sah sofort, daß es sich um eine auch für die Invariantentheorie, also eine mathematische Theorie, neue Methode handelt. In der vorliegenden Arbeit stehen im Mittelpunkt die Paulimatrizen τ_1, τ_2, τ_3, wie PAULI selbst hervorhebt, die wohlbekannten Matrizen aus der Theorie des Kreisels, die PAULI nun für die Theorie des Spins nutzbar macht.

Im Mittelpunkt dieser Theorie steht die Matrix $\hat{\sigma}_2 = \tau$, bzw. $\sigma_2 = \sqrt{-1}\tau$, wobei

$$\sigma = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{bmatrix}$$

steht.

Mathematisch gesehen gehört τ_2 zu den Hermiteschen Formen, $\hat{\sigma}_2$ zu den unitären Formen. Während τ_2 wohl zum Mittelpunkt der Theorie des Spins gehört. So hat $\hat{\sigma}_2$ in letzter Zeit hervorragende Bedeutung in der Kodierungstheorie gefunden. Es sei nur auf die große Arbeit von H. POLLATSCHEK hingewiesen, die den Titel führt: *Quantum Error Corrections* (Classic Group Theory Meets Quantum Challenge), Amer. Monthly **108** (2001): 832–862.

Es ist nun das Ziel der vorliegenden Arbeit, diese wichtigen Dinge und die Theorie der Gleichverteilung, ebenfalls von H. WEYL gegründet, in Verbindung zu bringen, indem wir τ mit einer Vorzeichenfunktion verbinden, welche von einer gleichverteilten Folge ω abhängt.

Zum Abschluß der Arbeit bin ich kurz auch auf Verallgemeinerungen eingegangen, z. B. auf schiefsymmetrische Matrizen, wie sie in der symplektischen Geometrie von C. L. SIEGEL z. B. auch in der Himmelsmechanik auftreten.

Kapitel 1

§1. Betrachten wir eine Drehachse (A, B, C) mit $A^2 + B^2 + C^2 = 1$. Wir setzen $(0 < \vartheta < 1; 0 < \alpha < 1)$

$$A = \sin \pi\vartheta \cos 2\pi\alpha, \qquad B = \sin \pi\vartheta \sin 2\pi\alpha,$$

$$C^2 = 1 - (A^2 + B^2) = \cos^2 \pi\vartheta,$$

also

$$C = \varepsilon \cos \pi\vartheta = \varepsilon C_0,$$

wobei $C_0 = \cos \pi\vartheta$ und $\varepsilon = \pm 1$.

Wir bilden die Matrix

$$S = \begin{bmatrix} A & B - iC \\ B + iC & -A \end{bmatrix}.$$

Es ist

$$\operatorname{Det} S = -(A^2 + B^2 + C^2) = -1.$$

Wir können S als Vektor schreiben

$$S = A \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix} + B \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix} + C\varepsilon \begin{bmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{bmatrix}.$$

Man bezeichnet die drei auftretenden Matrizen heute mit

$$\tau_3 = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix}, \qquad \tau_2 = \varepsilon \begin{bmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{bmatrix}, \qquad \tau_1 = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}.$$

Abweichend von der Literatur nehmen wir in die Definition von τ_2 ein Vorzeichen $\varepsilon = \pm 1$ hinein, das wir in Kapitel 2 noch genauer definieren werden.

Bevor wir weitergehen, sei bemerkt, daß wir die Variablen α und ϑ später beschreiben werden.

§2. Wir suchen noch die Eigenwerte von S. Wir lösen das Gleichungssystem

$$Cz_1 + (A - iB)z_2 = z_1,$$
$$(A + iB)z_1 - Cz_2 = z_2.$$

Die Lösung lautet

$$z_1 = \sigma(A - Bi),$$
$$z_2 = \sigma(1 - C) = \sigma(1 - \varepsilon \cos \pi\vartheta).$$

Es wird also

$$z_1 = \sigma \sin \pi\vartheta e^{-2\pi i\alpha},$$
$$z_2 = \sigma(1 - C) = \sigma(1 - \varepsilon \cos \pi\vartheta).$$

Wir wollen nun $\varepsilon = +1$ wählen (der Fall $\varepsilon = -1$ geht analog). Es wird bei dieser Wahl

$$|z_1|^2 + |z_2|^2 = 4\sigma^2 \sin^2 \frac{\pi\vartheta}{2}.$$

Wir wählen σ so, daß die linke Seite 1 wird, also

$$\sigma = \frac{1}{2\left(\sin \frac{\pi\vartheta}{2}\right)}$$

für $0 < \vartheta < 1$. Die so normierten Größen z_1, z_2 bezeichnen wir mit $\tilde{z}_1, \tilde{z}_2$.

Wir erhalten, da $\sin \pi\vartheta = 2 \sin \frac{\pi\vartheta}{2} \cos \frac{\pi\vartheta}{2}$,

$$(1 - \cos \pi\vartheta) = 2 \sin^2 \frac{\pi\vartheta}{2}$$

$$\tilde{z}_1 = \cos \frac{\pi\vartheta}{2} e^{-2\pi i\alpha}$$

$$\tilde{z}_2 = \sin \frac{\pi\vartheta}{2}.$$

Wir lassen nun α eine gleichverteilte[1] Folge mod 1 mit der Dichte Eins und ϑ eine gleichverteilte Folge mit der Dichte $\frac{\pi}{2} \sin \pi(1 - \vartheta)$ durchlaufen, d.h. wir betrachten eine Folge (α_n, ϑ_n), so daß für jede integrierbare Funktion $f(\alpha, \vartheta)$ auf E^2

$$\lim_{N\to\infty} \frac{1}{N} \sum_{k=1}^{N} f(\alpha_k, \vartheta_k) = \int\int_{E^2} f(\alpha, \vartheta) d\alpha\, d\vartheta \qquad (*)$$

gilt. Es sei ϑ_0 eine Zahl mit $0 < \vartheta_0 < \frac{1}{2}$. Wir betrachten die Anzahl aller ϑ_k mit $0 < \vartheta_k < \vartheta_0 < \frac{1}{2}$ und alle α_n, so ist

$$\lim_{N\to\infty} \frac{1}{N} \sum_{0 < \vartheta_k < \vartheta_0 < \frac{1}{2}} 1 = \frac{\pi}{2} \int_0^{\vartheta_0} \sin \pi(1 - \vartheta) d\vartheta$$

$$= -\cos \pi(1 - \vartheta) = \frac{1}{2}(1 + \cos \pi\vartheta_0)$$

$$= \cos^2 \frac{\pi\vartheta_0}{2}.$$

[1] Zur Theorie der Gleichverteilung z. B.: HLAWKA, E. (1979) Theorie der Gleichverteilung. Bibliographisches Institut, Mannheim.

Betrachten wir noch die Anzahl aller ϑ_k mit $\frac{1}{2} < \vartheta_0 < \vartheta_k < 1$, so erhalten wir analog

$$\lim_{N\to\infty} \frac{1}{N} \sum_{\frac{1}{2} < \vartheta_0 < \vartheta_k < 1} = \frac{1}{2}(1 - \cos \pi\vartheta_0) = \sin^2 \frac{\pi\vartheta_0}{2}.$$

Es sind also $|\tilde{z}_1(\vartheta_0)|^2$, $|\tilde{z}_2(\vartheta_0)|^2$ die Häufigkeiten. Im Falle $\varepsilon = -1$ haben wir die gleiche Situation. Die Dichte der ϑ_k wird $\frac{\pi}{2} \sin \pi\vartheta$, d.h. die ϑ_k gehen nicht von links nach rechts, sondern umgekehrt. Es ist

$$|\tilde{z}_1(\vartheta_0)|^2 = \sin^2 \frac{\pi\vartheta_0}{2}$$

und

$$|\tilde{z}_2(\vartheta_0)|^2 = \cos^2 \frac{\pi\vartheta_0}{2}.$$

Es wäre noch die Konstruktion der (ϑ_l)-Folge nachzutragen.

Wir nehmen eine gleichverteilte Folge $\omega = (x)$ mit der Dichte 1 und bilden

$$\begin{aligned} y_{nk} &= \frac{1}{N} \sum_{l=1}^{N} \left[1 + x_k - \frac{\pi}{2} \int_0^{x_l} \sin \pi\vartheta \, d\vartheta \right] \\ &= \frac{1}{N} \sum_{l=1}^{N} \left[1 + x_k - \frac{1}{2} \sin^2 \frac{\pi}{2} x_l \right]. \end{aligned}$$

Wir können sogar über die Diskrepanz eine Aussage machen. Ist $D_N(x)$ die Diskrepanz der Folge ω, so ist die Diskrepanz der Folge

$$(y_{nk}) \leq D_N^{\frac{1}{3}}.$$

Wir haben also in der Folge (α_m, y_n) eine Doppelfolge. Will man eine einfache Folge, so nimmt man eine gleichverteilte Folge $(x_{k_1}^1, x_{k_2}^2)$ mit der Dichte 1 und konstruiert (y_{nk}^1, y_{nk}^2)

$$\begin{aligned} y_{nk}^1 &= \frac{1}{N} \sum_{l=1}^{N} [1 + x_k^1 - x_l^1], \\ y_{nk}^2 &= \frac{1}{N} \sum_{l=1}^{N} \left[1 + x_k^2 - \frac{1}{2} \sin^2 \frac{\pi}{2} x_l^2 \right]. \end{aligned}$$

Die Dreiecksfolge hat die Dichte, wie in $(*)$ verlangt.

Wir können sofort zum mehrdimensionalen Fall übergehen. Wir betrachten das direkte Produkt von Richtungen

$$(A_1, B_1, C_1) \times (A_2, B_2, C_2) \times \cdots \times (A_s, B_s, C_s),$$

wo $A_j^2 + B_j^2 + C_j^2 = 1$ für $j = 1, \ldots, s$, d.h. anders ausgedrückt das s-fache direkte Produkt von zweidimensionalen Sphären.

Wir bilden das direkte Produkt der Matrizen

$$S_j = \begin{bmatrix} A_j & B_j - iC_j \\ B_j + iC_j & -A_j \end{bmatrix},$$

wobei

$$\begin{aligned} A_j &= \sin \pi\vartheta_j \cos 2\pi\alpha_j, \\ B_j &= \sin \pi\vartheta_j \sin 2\pi\alpha_j, \\ C_j &= \varepsilon_j \cos \pi\vartheta_j = \varepsilon_j^{C_0 i}, \end{aligned}$$

wobei $\varepsilon_j = \pm 1$ ist für $j = 1, \ldots, s$. Wir haben dann für die Wahl der ε_j genau 2^s Möglichkeiten.

Für die Eigenwerte von S_j erhalten wir

$$\begin{aligned} \tilde{z}_{j1} &= \cos \frac{\pi\vartheta_j}{2} e^{-2\pi i\alpha_j}, \\ \tilde{z}_{j2} &= \sin \frac{\pi\vartheta_j}{2}, \end{aligned}$$

wenn $\varepsilon = +1$ gewählt wurde und

$$\begin{aligned} \tilde{z}_{j1} &= \sin \frac{\pi\vartheta_j}{2} e^{-2\pi i\alpha_j}, \\ \tilde{z}_{j2} &= \cos \frac{\pi\vartheta_j}{2}, \end{aligned}$$

wenn $\varepsilon = -1$ gewählt wurde.

Wir nehmen eine $2s$-dimensionale gleichverteilte Folge mod 1 und konstruieren nach der obigen Methode gleichverteilte Folgen mit der Dichte

$$\prod_{j=1}^{s} \sin \pi\eta_j.$$

Es ist

$$\eta_j = \vartheta_j, \qquad \text{wenn} \qquad \varepsilon_j = -1$$

und

$$\eta_j = 1 - \vartheta_j, \qquad \text{wenn} \qquad \varepsilon_j = +1$$

gewählt werden. Es gibt also 2^s verschiedene Dichten.

Die Paare $|\tilde{z}_{j1}|^2$, $|\tilde{z}_{j2}|^2$ verhalten sich wie $\cos^2\frac{\pi\vartheta}{2}$ zu $\sin^2\frac{\pi\vartheta}{2}$ oder umgekehrt.

§3. Wir können die τ_1, τ_2, τ_3 mit der stereographischen Abbildung der komplexen Zahlenebene in (wohlbekannten) Zusammenhang bringen.

Es sei $z = x + iy$ ein Punkt der Ebene, $\bar{z} = x - iy$ der konjugiert komplexe Punkt. Wir fassen die beiden Punkte zusammen zu

$$x + i\varepsilon y,$$

wo $\varepsilon = \pm 1$ ist. Ist (X, Y, Z) der zugehörige Punkt auf der Sphäre, so gilt bekanntlich

$$X = \frac{2x}{1 + x^2 + y^2}, \qquad Y = \frac{2\varepsilon y}{1 + x^2 + y^2}, \qquad Z = \frac{-1 + \vartheta(x^2 + y^2)}{1 + x^2 + y^2}. \tag{$**$}$$

Wir setzen $u = x + iy$, so schreibt sich $(**)$

$$X = \frac{u + \bar{u}}{1 + |u|^2}, \qquad Y = \frac{1}{i}\frac{(u - \bar{u})\varepsilon}{1 + |u|^2}, \qquad Z = \frac{-1 + |u|^2}{1 + |u|^2}.$$

Wir setzen $u = \frac{u_1}{u_2}$ und erhalten

$$X = \frac{u_1\bar{u}_2 + u_2\bar{u}_1}{|u_1|^2 + |u_2|^2}, \qquad Y = \varepsilon(-i)\frac{u_1\bar{u}_2 - \bar{u}_1 u_2}{|u_1|^2 + |u_2|^2},$$
$$Z = \frac{-|u_2|^2 + |u_1|^2}{|u_2|^2 + |u_1|^2}.$$

Machen wir die Raumkoordinaten homogen $\left(\frac{x_1}{x_0}, \frac{x_2}{x_0}, \frac{x_3}{x_0}\right)$, so erhalten wir

$$X_1^2 + X_2^2 + X_3^2 = X_0^2.$$

Dann ist

$$\begin{aligned}
X_1 &= \lambda(u_1\bar{u}_2 + u_2\bar{u}_1),\\
X_2 &= \lambda(-i\varepsilon)(u_1\bar{u}_2 - u_2\bar{u}_1),\\
X_3 &= \lambda(-|u_2|^2 + |u_1|^2),\\
X_0 &= \lambda(|u_1|^2 + |u_2|^2).
\end{aligned}$$

Zu den hermiteschen Formen rechts gehören die Matrizen

$$\tau_1 = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}, \qquad \tau_2 = (-i\varepsilon)\begin{bmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{bmatrix}, \qquad \tau_3 = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix},$$
$$e = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}.$$

Wir haben vor uns τ_1, τ_2, τ_3 und e. Jede hermitesche Form ist bekanntlich eine lineare Komposition dieser vier Formen.

Wir machen nun folgende Überlegung, die wir in Kapitel 2 allgemein einführen werden:

Es sei ω eine gleichverteilte Folge modulo 1 und $\iota\big(\big\langle 0, \frac{1}{2}\big\rangle\big)$ die Indikatorfunktion des Intervalls $\big\langle 0, \frac{1}{2}\big\rangle$. Wir betrachten dann die Folge

$$\varepsilon(x_k) = 1 - 2\iota(x_k) = \delta(x_k).$$

Sei $\omega = \pm 1$ und setzen wir dies in τ_2 ein, so wird z ständig in $\bar{z}$ übergehen (die τ_j bilden eine Gruppe).

Es gilt (wir setzen $1 - 2i = \delta$)

$$\begin{aligned} -\tau_2\tau_1 &= \tau_1\tau_2 = i\delta\tau_3, \\ -\tau_3\tau_2 &= \tau_2\tau_3 = i\delta\tau_1, \\ -\tau_1\tau_3 &= \tau_3\tau_1 = i\delta\tau_2, \\ \tau_1^2 &= \tau_2^2 = \tau_3^2 = e. \end{aligned}$$

Setzen wir noch

$$I_j = \frac{i}{2}\tau_j,$$

so erhalten wir

$$\begin{aligned} [I_1 I_2] &= I_1 I_2 - I_2 I_1 = \delta I_3, \\ [I_2 I_3] &= \delta I_1, \\ [I_3 I_1] &= \delta I_2. \end{aligned}$$

Sie sind infinitesimale Transformationen der Transformationen

$$\begin{bmatrix} \cos t & i\delta \sin t \\ -i\delta \sin t & \cos t \end{bmatrix} \quad \text{bzw.} \quad \begin{bmatrix} \cosh t & -i\delta \sinh t \\ \delta \sinh t & \cosh t \end{bmatrix}.$$

Wir wollen noch $e^{i\alpha\tau_3}$ berechnen. Es ist

$$\tau_3^2 = e, \quad e^{i\alpha\tau_3} = e\cos\alpha + i\tau_3 \sin\alpha$$
$$e^{i\frac{\pi}{2}\tau_3} = i\tau_3.$$

Führen wir mit H. WEYL den Operator

$$\nabla = e\frac{\partial}{\partial x_0} + \tau_1\frac{\partial}{\partial x_1} + \tau_2\frac{\partial}{\partial x_2} + \tau_3\frac{\partial}{\partial x_3}$$

ein und wenden wir ihn auf die zweizeilige Funktion $\phi = \begin{bmatrix}\Phi_1\\ \Phi_2\end{bmatrix}$ an, so erhalten wir

$$\nabla\Phi = \begin{bmatrix} \dfrac{\partial\Phi_1}{\partial x_0} + \dfrac{\partial\Phi_2}{\partial x_1} + (-i\delta)\dfrac{\partial\Phi_2}{\partial x_2} + \dfrac{\partial\Phi_1}{\partial x_3} \\ \dfrac{\partial\Phi_2}{\partial x_0} + \dfrac{\partial\Phi_1}{\partial x_1} + (-i\delta)\dfrac{\partial\Phi_1}{\partial x_2} - \dfrac{\partial\Phi_2}{\partial x_3} \end{bmatrix}.$$

Betrachten wir die Weylsche Gleichung

$$\nabla\Phi = 0$$

und nehmen wir an, daß Φ_1 und Φ_2 nur von x_0 und x_2 abhängen, dann erhalten wir das Gleichungssystem

$$\frac{\partial\Phi_1}{\partial x_0} - i\delta\frac{\partial\Phi_2}{\partial x_2} = 0$$

und

$$\frac{\partial\Phi_2}{\partial x_0} + i\delta\frac{\partial\Phi_1}{\partial x_2} = 0.$$

Bilden wir die zweiten gemischten Ableitungen von Φ_1 und Φ_2, dann erhalten wir die Wellengleichung

$$\frac{\partial^2\Phi_j}{\partial x_0^2} = \frac{\partial^2\Phi_j}{\partial x_2^2}$$

für jedes $j = 1$ und 2.

Eine Lösung ist

$$\Phi_1 = \delta(g(x_0+x_2) - h(x_0-x_2)),$$
$$\Phi_2 = g(x_0+x_2) + h(x_0+x_2),$$

wo g und h zwei zweimal differenzierbare Funktionen sind.

Kapitel 2

§1. Wir haben schon im vorhergehenden Kapitel die Größen τ_1, τ_2, τ_3 verwendet. Wir wollen nun einen kleinen Kalkül dazu einführen.

Es sei für ein p mit $0 < p \leq 1$

$$\chi_p(x) \tag{1}$$

die Indikatorfunktion des Intervalls $\langle 0, p\rangle$

$$0 \leq x < p. \tag{2}$$

Es ist dann $1 - \chi_p(x)$ die Indikatorfunktion des Intervalls $\langle p, 1\rangle$. Wir definieren nun

$$l(x,p) = 1 \qquad \text{für} \qquad \langle 0, p\rangle \tag{3}$$

und

$$l(x,p) = 0 \qquad \text{für} \qquad p < x \leq 1. \tag{3'}$$

Weiters definieren wir

$$\delta(x,p) = 1 - 2\chi_p(x). \tag{4}$$

Es ist

$$\delta(x,p) = -1 \qquad \text{für} \qquad 0 < x < p \tag{5}$$

und

$$\delta(x,p) = +1 \qquad \text{für} \qquad p < x < 1. \tag{5'}$$

Es sei nun eine gleichverteilte Folge ω auf dem Einheitsintervall E mit der Diskrepanz $D_N(\omega)$ gegeben, dann wollen wir

$$\lambda_N(\delta, p) = \frac{1}{N}\sum_{k=1}^{N} \delta(x_k, p) \tag{6}$$

berechnen, wobei die x_k das k-te Glied der Folge ω sind.

Es ist

$$\lambda_N(\delta) = J_p + \vartheta D_N(\omega), \tag{7}$$

wobei $|\delta| \leq 1$ und

$$J_p = \int_0^1 \delta(x,p)\, dx$$

ist.

Es ist

$$\int_0^p \delta(x)\, dx = -p, \qquad \int_p^1 \delta(x)\, dx = 1 - p,$$

also

$$J_p = 1 - 2p. \tag{8}$$

Wir erhalten also

$$\lambda_N(\delta, p) = 1 - 2p + \vartheta D_N(\omega). \tag{9}$$

Für $p = \frac{1}{2}$ erhalten wir

$$\lambda_N\left(\delta, \frac{1}{2}\right) = \vartheta D_N.$$

Weiters erhalten wir für

$$\lambda_N(l,p) = \frac{1}{N}\sum_{k=1}^{N} l(x_k,p),$$

also

$$\lambda_N(l,p) = p + \vartheta D_N. \tag{10}$$

Für $p = \frac{1}{2}$ ist

$$\lambda_N\left(l, \frac{1}{2}\right) = \frac{1}{2} + \vartheta D_N. \tag{10'}$$

§2. Wir haben bereits $l(x,p)$ und $\delta = 1 - 2l$ definiert. Wir setzen noch

$$r(x,p) = 1 - l(x,p). \tag{1}$$

Es ist also

$$r(x,p) = 0 \qquad \text{für} \qquad 0 \le x < \frac{1}{2},$$
$$r(x,p) = 1 \qquad \text{für} \qquad \frac{1}{2} < x < 1.$$

Wir haben die Regeln

$$lr = 0, \qquad l^2 = l, \qquad r^2 = r, \qquad r + l = 1, \qquad r - l = 1 - 2l = \delta.$$

Wir bilden nun die zweizähligen Vektoren

$$v(x,p) = \begin{bmatrix} l \\ r \end{bmatrix},$$
$$v^*(x,p) = \begin{bmatrix} r \\ l \end{bmatrix}. \tag{2}$$

Es ist

$$v + v^* = \begin{bmatrix} l+r \\ l+r \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \end{bmatrix}. \tag{3}$$

Weiters definieren wir die Matrizen

$$X = \begin{bmatrix} 0 & l \\ r & 0 \end{bmatrix}, \qquad X^* = \begin{bmatrix} 0 & r \\ l & 0 \end{bmatrix}. \tag{4}$$

Es ist

$$Xv = \begin{bmatrix} 0 & l \\ r & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} l \\ r \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} rl \\ rl \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \end{bmatrix} = O, \tag{$*$}$$

wo O die Nullmatrix ist.

Es ist weiter

$$Xv^* = \begin{bmatrix} 0 & l \\ r & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} r \\ l \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} l^2 \\ r^2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} l \\ r \end{bmatrix} = v,$$

analog ist

$$X^* v = v^*,$$
$$X^* v^* = O. \tag{5}$$

Wir setzen

$$\begin{bmatrix} 0 \\ 0 \end{bmatrix} = 0, \qquad \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \end{bmatrix} = 1.$$

Wir führen die Einheitsmatrix

$$e = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}$$

ein.

Nun bilden wir

$$N^+ = X\hat{X} \qquad \text{und} \qquad N^- = \hat{X}X.$$

Es ist

$$N^+ = \begin{bmatrix} 0 & l \\ r & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 0 & r \\ l & 0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} l & 0 \\ 0 & r \end{bmatrix},$$

also

$$N^+ = \begin{bmatrix} l & 0 \\ 0 & r \end{bmatrix}, \qquad N^- = \begin{bmatrix} r & 0 \\ 0 & l \end{bmatrix}.$$

Es ist $N^2 = N$. Weiters erhalten wir

$$N^+ v = \begin{bmatrix} l & 0 \\ 0 & r \end{bmatrix} \begin{bmatrix} l \\ r \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} l^2 \\ r^2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} l \\ r \end{bmatrix} = v,$$

$$N^+ v^* = \begin{bmatrix} l & 0 \\ 0 & r \end{bmatrix} \begin{bmatrix} r \\ l \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \end{bmatrix} = 0$$

und

$$N^{-}v = \begin{bmatrix} r & 0 \\ 0 & l \end{bmatrix}\begin{bmatrix} l \\ r \end{bmatrix} = 0,$$

$$N^{-}v^{*} = \begin{bmatrix} r & 0 \\ 0 & l \end{bmatrix}\begin{bmatrix} r \\ l \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} r \\ l \end{bmatrix} = v^{*}.$$

Zusammenfassend haben wir

$$N^{+}v = v, \qquad N^{+}v^{*} = 0, \qquad N^{-}v = 0, \qquad N^{-}v^{*} = v^{*}.$$

Wir bilden uns die Supermatrix

$$P = \begin{bmatrix} N^{+} & N^{-} \\ X & \hat{X} \end{bmatrix}.$$

Es ist

$$P\begin{bmatrix} v \\ v \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} N^{+} & N^{-} \\ X & \hat{X} \end{bmatrix}\begin{bmatrix} v \\ v \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} N^{+}v + N^{-}v \\ Xv + \hat{X}v \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} v \\ v^{*} \end{bmatrix}.$$

Es gilt also $v \to v$ in der ersten Zeile und $v \to v^{*}$ in der zweiten Zeile.
Es wird

$$P\begin{bmatrix} v^{*} \\ v^{*} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} N^{+}v^{*} + N^{-}v^{*} \\ Xv^{*} + \hat{X}v^{*} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} v^{*} \\ v \end{bmatrix},$$

aber es ist

$$P\begin{bmatrix} v \\ v^{*} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} N^{+}v + N^{-}v^{*} \\ Xv + \hat{X}v^{*} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} v + v^{*} \\ v + v^{*} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \end{bmatrix}$$

und

$$P\begin{bmatrix} v^{*} \\ v \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \end{bmatrix}.$$

Wir bilden nun

$$\tau_1 = \frac{1}{2}(X + \hat{X}) = \begin{bmatrix} 0 & l+r \\ l+r & 0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}.$$

Es ist

$$\hat{X} - X = \begin{bmatrix} 0 & 1-\chi_p \\ \chi_p & 0 \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} 0 & \chi_p \\ 1-\chi_p & 0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 & 1-2\chi_p \\ 2\chi_p - 1 & 0 \end{bmatrix}$$
$$= (1-2\chi_p)\begin{bmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{bmatrix}.$$

Nun ist ja $(1-2\chi_p) = r - l = \delta$ und wir setzen

$$\tau_2 = \frac{1}{2i}(\hat{X} - X) = \delta i \begin{bmatrix} 0 & -1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}.$$

Es ist also

$$\tau_1 + i\tau_2 = \tilde{X}, \qquad \tau_1 - i\tau_2 = X.$$

Wir bilden uns

$$\tau_1\tau_2 = \delta i \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 0 & -1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix} = \delta i \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix}.$$

Wir setzen

$$\tau_3 = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix}$$

und haben dann

$$\tau_1\tau_2 = i\delta\tau_3,$$

da

$$\begin{bmatrix} 0 & -1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} = -\tau_3$$

ist, so ist also

$$\tau_2\tau_1 = -\tau_1\tau_2.$$

Man zeigt leicht, daß

$$\tau_2\tau_3 = -\tau_3\tau_2 = i\delta\tau_1$$

und

$$\tau_3\tau_1 = -\tau_1\tau_3 = i\delta\tau_2$$

ist. Setzen wir noch

$$e = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix},$$

so ist (es ist ja $\delta = r - l$)

$$2\delta\tau_3 = \begin{bmatrix} r-l & 0 \\ 0 & l-r \end{bmatrix}.$$

Es ist dann

$$e + 2\delta\tau_3 = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} r-l & 0 \\ 0 & l-r \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1+r-l & 0 \\ 0 & 1+l-r \end{bmatrix}$$
$$= \begin{bmatrix} 2r & 0 \\ 0 & 2l \end{bmatrix} = 2\begin{bmatrix} r & 0 \\ 0 & l \end{bmatrix} = 2N^-.$$

Analog ist

$$e - 2\delta\tau_3 = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} r-l & 0 \\ 0 & r-l \end{bmatrix}$$
$$= \begin{bmatrix} l-r+1 & 0 \\ 0 & r+1-l \end{bmatrix} = 2\begin{bmatrix} l & 0 \\ 0 & r \end{bmatrix} = 2N^+.$$

Es ist also

$$N^- = \frac{1}{2}(e + 2\delta\tau_3), \qquad N^+ = \frac{1}{2}(e - 2\delta\tau_3).$$

Wir erhalten folgende Darstellung für P

$$P = \begin{bmatrix} N^+ & N^- \\ X & \tilde{X} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{1}{2}(e + 2\delta\tau_3) & \frac{1}{2}(e - 2\delta\tau_3) \\ \frac{1}{2}(\tau_1 - i\tau_2) & \frac{1}{2}(\tau_2 + i\tau_3) \end{bmatrix}$$
$$= \frac{1}{2}\begin{bmatrix} e - 2\delta\tau_3 & e + 2\delta\tau_3 \\ \tau_1 - i\tau_2 & \tau_1 + i\tau_2 \end{bmatrix}.$$

Wir definieren nun

$$\sigma_x = \begin{bmatrix} \tau_3 & 0 \\ 0 & \tau_3 \end{bmatrix}, \qquad \sigma_y = \begin{bmatrix} \tau_1 & 0 \\ 0 & \tau_1 \end{bmatrix}, \qquad \sigma_z = \delta i\begin{bmatrix} \tau_2 & 0 \\ 0 & \tau_2 \end{bmatrix}.$$

Wir nennen $\sigma = (\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z)$ den Spin.

$$\begin{aligned}
\sigma_x\sigma_y &= -\sigma_y\sigma_x = i\delta\sigma_z, \\
\sigma_y\sigma_z &= -\sigma_z\sigma_y = i\delta\sigma_x, \\
\sigma_z\sigma_x &= -\sigma_x\sigma_z = i\delta\sigma_y, \\
[\sigma_x\sigma_y] &= \sigma_x\sigma_y - \sigma_y\sigma_x = 2i\delta\sigma_z, \\
[\sigma_y\sigma_z] &= 2i\delta\sigma_x, \\
[\sigma_z\sigma_x] &= 2i\delta\sigma_y,
\end{aligned}$$

symbolisch

$$[\sigma\sigma] = 2i\delta\sigma,$$
$$\left[\frac{\sigma}{2}\frac{\sigma}{2}\right] = i\delta\sigma.$$

Fassen wir zusammen, so haben wir

$$\tau_1 = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}, \qquad \tau_2 = \delta i \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{bmatrix}, \qquad \tau_3 = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix},$$
$$e = \begin{bmatrix} l & 0 \\ 0 & r \end{bmatrix},$$

und

$$X = \begin{bmatrix} 0 & l \\ r & 0 \end{bmatrix}, \qquad \tilde{X} = \begin{bmatrix} 0 & r \\ l & 0 \end{bmatrix}, \qquad N^+ = \begin{bmatrix} l & 0 \\ 0 & r \end{bmatrix},$$
$$N^- = \begin{bmatrix} r & 0 \\ 0 & l \end{bmatrix},$$

die Vektoren

$$v = \begin{bmatrix} l \\ r \end{bmatrix}, \qquad v^* = \begin{bmatrix} r \\ l \end{bmatrix}$$

und

$$P = \begin{bmatrix} N^+ & N^- \\ X & \tilde{X} \end{bmatrix} = \frac{1}{2} \begin{bmatrix} e - 2\delta\tau_3 & e + 2\delta\tau_3 \\ \tau_1 - i\tau_2 & \tau_1 + i\tau_2 \end{bmatrix}$$

und

$$2P = \begin{bmatrix} e & e \\ 0 & 0 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} -\tau_3 & \tau_3 \\ \tau_1 - i\tau_2 & \tau_1 + i\tau_2 \end{bmatrix}.$$

Wir bilden nun den Vektor $\tau = (\tau_1, \tau_2, \tau_3)$, dann ist

$$\tau \times \tau = \begin{bmatrix} -\tau_3 & \tau_3 \\ \tau_1 - i\tau_2 & \tau_1 + i\tau_2 \end{bmatrix}.$$

Wir haben nun

$$E = e \times e = \begin{bmatrix} e & e \\ 0 & 0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}.$$

Dann ist

$$2P = E + 2\delta(\tau \times \tau).$$

Bemerken wir noch, daß wir die Matrix $\begin{bmatrix} 0 & p \\ 1-p & 0 \end{bmatrix}$, $\begin{bmatrix} 0 & 1-p \\ p & 0 \end{bmatrix}$ darstellen können: Es sei $\omega = (x_k)$ eine gleichverteilte Folge mit der Diskrepanz D_N, dann ist

$$\frac{1}{N}\sum_{k=1}^{N}\begin{bmatrix} 0 & l(x_k,p) \\ r(x_k,p) & 0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 & p \\ 1-p & 0 \end{bmatrix} + \vartheta D_N e$$

und

$$\frac{1}{N}\sum_{k=1}^{N}\begin{bmatrix} 0 & r(x_k,p) \\ l(x_k,p) & 0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 & 1-p \\ p & 0 \end{bmatrix} + \vartheta D_N e$$

mit $|\vartheta| < 1$.

Kehren wir zu P zurück. Es ist

$$P = \begin{bmatrix} N^+ & N^- \\ X & \tilde{X} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} l & 0 & r & 0 \\ 0 & r & 0 & l \\ 0 & l & 0 & r \\ r & 0 & l & 0 \end{bmatrix}.$$

Wir betrachten nun Linearformen in l und r mit den Koeffizienten u und v

$$L(u,v,r,l) = ul + vr,$$
$$M(u,v,r,l) = ur + vl,$$

dann erhalten wir

$$P\begin{bmatrix} M \\ L \\ M \\ L \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} M \\ L \\ L \\ M \end{bmatrix}. \qquad (*)$$

Es ist l bzw. $r = 1 - l$ eine Funktion in x (und in p), dann ist $L(u,v,l(x),1-l(x))$ und M eine Funktion in x.

Wir wollen nun u, v als natürliche Zahlen annehmen, dann sind auch L und M natürliche Zahlen und können als Indizes der Funktionen $\Phi(\xi)$ und $\Psi(\eta)$ genommen werden, wo $\xi = (\xi_1,\xi_2,\xi_3)$ und $\eta = (\eta_1,\eta_2,\eta_3)$ Punkte im Raum sind.

Bilden wir

$$F(x,\xi,\eta) = \Phi_{L(x)}(\xi)\Psi_{M(x)}(\eta).$$

Wir nehmen nun eine gleichverteilte Folge $\omega = (x_k)$.

1. Fall. $l(x_k, p) = 1$, dann ist $r(x_k) = 0$, $L(x_k) = u$, $M(x_k) = v$, also
$$F(x_k, \xi, \eta) = \Phi_u(\xi)\Psi_v(\eta).$$
2. Fall. $l(x_k) = 0$, dann ist $r(x_k) = 1$, $L(x_k) = v$, $M(x_k) = u$, also
$$F(x_k, \xi, \eta) = \Phi_v(\xi)\Psi_u(\eta),$$
d.h. die Indizes sind vertauscht.

Bilden wir nach DIRAC
$$H(x) = E_0 + \sum_{L(x),M(x)} \int \frac{F(x,\xi,\eta)\bar{F}(x,\xi,\eta)}{d(\xi,\eta)}\, d\xi\, d\eta,$$
wobei $d(\xi, \eta)$ die Entfernung der Punkte ξ und η und $\Psi = \bar{\Phi}$ ist. Wir können jetzt $\frac{1}{N}\sum_{k=1}^{N} H(x_k)$ bilden und kommen so zur Quantenchemie.

Weitere Übermatrizen von DIRAC, die bei uns Funktionen sind:
$$\alpha_1 = \begin{bmatrix} 0 & \tau_1 \\ \tau_1 & 0 \end{bmatrix}, \qquad \alpha_2 = \begin{bmatrix} 0 & \tau_2 \\ \tau_2 & 0 \end{bmatrix}, \qquad \alpha_3 = \begin{bmatrix} \tau_3 & 0 \\ 0 & \tau_3 \end{bmatrix},$$
$$\gamma_1 = \begin{bmatrix} 0 & -i\tau_1 \\ i\tau_1 & 0 \end{bmatrix}, \qquad \gamma_2 = \begin{bmatrix} 0 & -i\tau_2 \\ -i\tau_2 & 0 \end{bmatrix},$$
$$\gamma_3 = \begin{bmatrix} 0 & -i\tau_3 \\ i\tau_3 & 0 \end{bmatrix}, \qquad \gamma_4 = \begin{bmatrix} e & 0 \\ 0 & -e \end{bmatrix}.$$
Wir erhalten
$$\gamma_3\gamma_4 = \begin{bmatrix} 0 & -i\tau_3 \\ i\tau_3 & 0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix} i\tau_3,$$
$$\gamma_4\gamma_3 = -\begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix} i\tau_3,$$
also
$$\gamma_3\gamma_4 + \gamma_4\gamma_3 = 0, \qquad \gamma_2^2 = e.$$
Wenden wir eine Lorentztransformation an, so sind auch γ_3 und γ_4 zu transformieren
$$\gamma_3' = \frac{\gamma_3 + iv\gamma_4}{\sqrt{1-v^2}},$$
$$\gamma_4' = -\frac{v\gamma_3 + i\gamma_4}{\sqrt{1-v^2}}.$$

Beispiel 1: Ein einfaches Beispiel ist die Brownsche Bewegung von Teilchen. Es sei $\omega = (x_1^k, \ldots, x_s^k) = (x^k)$ (und $x = (x_1, \ldots, x_s)$) eine s-dimensionale Folge mit Diskrepanz D_N. Es sei L die Länge eines Teilchens und s die Anzahl der Teilchen x_l. Diese sind unter dem Einfluß der Folge einer Kraft ausgesetzt, die sie nach links oder auch nach rechts um eine Einheit verschieben. Die Gesamtheit sei also

$$F(x) = L \sum_{l=1}^{s} \delta_{\langle 0,p \rangle}(x_l).$$

Es ist

$$\begin{aligned} \frac{1}{N}\sum_{k=1}^{N} F(x^k) &= \frac{1}{N}\sum_{k=1}^{N}\sum_{l=1}^{s} \delta_{\langle 0,p \rangle}(x_l^k) \\ &= L\sum_{l=1}^{s}\left(\frac{1}{N}\sum_{k=1}^{N} \delta_{\langle 0,p \rangle}(x_l^k)\right) = L\sum_{l=1}^{s}(1-2p) + \vartheta D_N. \end{aligned}$$

Wir bilden nun das Quadrat

$$\begin{aligned} \frac{1}{N}\sum_{k=1}^{N} G(x^k) &= \frac{L^2}{N}\sum_{k=1}^{N}\left(\sum_{l=1}^{s} \delta_{\langle 0,p \rangle}(x_l^k)\right)^2 \\ &= L^2\sum_{l=1}^{s}\left(\left(\frac{1}{N}\sum_{k=1}^{N}\delta^2\right) + \sum_{i\neq j}\delta_{\langle 0,p \rangle}(x^i)\delta_{\langle 0,p \rangle}(x^j)\right) \\ &= L^2(s + s(s-1)(1-2p)^2) + L^2 s^2 D_N \\ &= sL^2(1 + (s-1)(1-2p)^2) + L^2 s^2 D_N. \end{aligned}$$

Nun ist

$$\sqrt{G^2} = \sqrt{s}L\sqrt{1 + (s-1)(1-2p)^2} + s\sqrt{D_N}.$$

Für $p = \frac{1}{2}$ ist $\sqrt{G^2} = L\sqrt{s} + s\sqrt{D_N}$.[2]

Beispiel 2: Polarisiertes Licht.

$$x = a\cos t, \qquad y = b\delta\cos(t-\alpha),$$

wo $\delta = \delta(x_k, p)$ ist.

Es wird

$$\begin{aligned} \frac{y\delta}{b} &= \cos(t-\alpha) = \cos t\cos\alpha + \sin t\sin\alpha \\ &= \frac{x}{a}\cos\alpha + \sqrt{1-\frac{x^2}{a^2}}\sin\alpha, \end{aligned}$$

[2] Vor kurzem hat die Astrophysikerin Chung-Pei Ma (Univ. of California, Berkeley) gezeigt, daß sich die „dunkle Materie“ im All genauso verhält.

also

$$\left(\frac{y\delta}{b} - \frac{x}{a}\cos\alpha\right)^2 = \left(1 - \frac{x^2}{a^2}\right)\sin^2\alpha$$

und da $\delta^2 = 1$, ist

$$\frac{x^2}{a^2} + \frac{y^2}{b^2} - \frac{2xy}{ab}\delta\cos\alpha = \sin^2\alpha.$$

Nun ist nach §1 (9)

$$\frac{1}{N}\sum\delta(x_k) = 1 - 2p + \vartheta D_N.$$

Es wird die Flächengeschwindigkeit

$$F(x_k) = y\dot{x} - \dot{y}x = ab\delta\sin\alpha,$$

wo $\delta(x_k, p)$ von der Folge $\omega = (x^k)$ abhängt.
Es wird

$$\frac{1}{N}\sum_{k=1}^{N} F(x_k) = ab\sin\alpha\frac{1}{N}\sum_{k=1}^{N}\delta(x_k)$$
$$= ab\sin\alpha((1-2p) + \vartheta D_N),$$

insbesondere für $p = \frac{1}{2}$ ist es fast gleich D_N.

Beispiel 3: Das Möbiusband ([DR01]). Das Möbiusband sei gegeben durch $\vec{x} = (x, y, z)$,

$$x = \cos u\left(1 + v\sin\frac{u}{2}\right),$$
$$y = \sin u\left(1 + v\sin\frac{u}{2}\right),$$
$$z = v\cos\frac{u}{2},$$

wobei $0 \leq u \leq 2\pi$ und $-\frac{\pi}{2} < v < \frac{\pi}{2}$.
Wir berechnen

$$\frac{\partial\vec{x}}{\partial u} \times \frac{\partial\vec{x}}{\partial v}$$

und beschränken uns auf den Fall $v = 0$, dann erhalten wir

$$\frac{\partial\vec{x}}{\partial u} = (-\sin u, \cos u, 0), \qquad \frac{\partial\vec{x}}{\partial v} = \left(\cos u\sin\frac{u}{2}, \sin u\sin\frac{u}{2}, \cos\frac{u}{2}, 0\right).$$

Das vektorielle Produkt

$$\frac{\partial\vec{x}}{\partial u} \times \frac{\partial\vec{x}}{\partial v}\bigg|_{v=0}$$

hat die Komponenten

$$\left(\cos u \cos\frac{u}{2}, -\sin u \cos\frac{u}{2},\ \sin\frac{u}{2}\right).$$

Wir nehmen jetzt

$$u(k) = (1 + \delta(x_k, p))\pi,$$

wo (x_k) eine gleichverteilte Folge mit der Diskrepanz D_N ist.

Es ist

$$\cos\frac{u(k)}{2} = \cos\left(\frac{1+\delta(x_k,p)}{2}\right)\pi = -\delta(x_k,p).$$

Der Punkt hat also für $v = 0$ dir Koordinaten

$$P_k = (-\delta(x_k,p), 0, 0).$$

Es ist

$$\frac{1}{N}\sum_{k=1}^{N} P_k = (-(1-2p), 0, 0) + \vartheta D_N,$$

dagegen ist

$$\frac{1}{N}\sum P_k^2 = (1, 0, 0).$$

§3. Wir haben in Kapitel 2 die Funktionen $l(x,p), r(x,p), \delta(x,p)$ definiert, dann eine gleichverteilte Folge ω auf dem Einheitsintervall E mit der Diskrepanz $D_N(\omega)$ und die Mittelwerte

$$\overline{\delta}_N(\omega) = \frac{1}{N}\sum_{k=1}^{N}\delta(x_k,p)$$

gebildet. Analog können wir Mittelwerte $\bar{l}_p(\omega), \overline{p}_N(\omega)$ und auch Mittelwerte von Funktionen von $l(x,p), p(x,p)$ bilden. Wir vergleichen sie mit den zugehörigen Integralen

$$\int_E \delta(x,p)dx \cdots \int_E l(x,p)dx.$$

Dabei sind noch die Folgen ω eindimensional. Die kombinatorische Theorie der Valenzstriche führt dazu, Verallgemeinerungen durchzuführen.

Wir haben schon vorher das Wort Quantenchemie erwähnt. Es ist vor allem W. HEITLER, der hier erwähnt werden soll (siehe sein Buch [HEI02] über diesen Gegenstand). Neben HEITLER sind G. RUMER und E. TELLER zu nennen, aber auch H. WEYL, der auf den Zusammenhang mit der Invariantentheorie aufmerksam gemacht hat. Diese Arbeiten haben mich sehr beeindruckt. Die Arbeiten von E. HÜCKEL, die später erschienen sind, benützen die Darstellungstheorie der endlichen Gruppen und verwenden tiefliegende Sätze dieser Theorie. Ich möchte daher die elementare Theorie von HEITLER den folgenden Ausführungen zugrunde legen.

Es liege eine zweidimensionale Folge $\omega = (x_k, y_k)$ vor. Wir bilden nun

$$\Delta(x,y,p,q) = \begin{vmatrix} l(x,p) & l(y,q) \\ r(x,p) & r(y,q) \end{vmatrix}.$$

Es ist

$$\begin{aligned}\Delta(x,y,p,q) &= l(x,p)(1-l(y,q)) - l(y,q)(1-l(x,p)) \\ &= l(x,p) - l(y,q).\end{aligned}$$

Es ist (wir lassen p, q weg)

$$\begin{aligned}\lambda_N = \frac{1}{N}\sum_{k=1}^{N}\Delta(x_k,y_k) &= \int\int l(x,p)dx\,dy - \int\int l(y,q)dx\,dy \\ &= p - q + D_N(\omega)\vartheta,\end{aligned}$$

mit $|\vartheta| \leq 1$. Für $q = p$ gilt

$$\lambda_N = \vartheta D_N.$$

Wir betrachten also jetzt den Fall $p \neq q$

$$\begin{aligned}\frac{1}{N}\sum_{k=1}^{N}\Delta^2(x_k,y_k) &= \frac{1}{N}\sum_{k=1}^{N}\left(l^2(x_k) + l^2(y_k) - 2l(x_p)l(y_k)\right) \\ &= \int\left(l^2(x) + l^2(y)\right)dx\,dy - 2\int l(x)dx\int l(y)dy + D_N \\ &= 2p - 2p^2 + D_N = 2p(1-p) + D_N\vartheta.\end{aligned}$$

Für $p = \frac{1}{2}$ erhalten wir

$$\frac{1}{N}\sum\Delta^2(x_k,y_k) = \frac{1}{2} + D_N.$$

HEITLER betrachtet nun eine Verallgemeinerung, z. B. für $p = \frac{1}{2}$

$$\begin{aligned}\Phi_I &= \frac{1}{2}\Delta(x_1, x_2)\Delta(x_3 x_4),\\ \Phi_{II} &= \frac{1}{2}\Delta(x_1, x_3)\Delta(x_2 x_4),\\ \Phi_{III} &= \frac{1}{2}\Delta(x_1, x_4)\Delta(x_2 x_3).\end{aligned}$$

Es ist

$$\Phi_{III} = \Phi_{II} - \Phi_I. \tag{$*$}$$

Jetzt berechnet man z. B. das Integral

$$\int \Phi_3 \Phi_4 \, dx_1 \, dx_2 \, dx_3 \, dx_4$$

und kann die Mittelwerte

$$\frac{1}{N}\sum_{k=1}^{N} \Phi_3 \Phi_4 \left(x_1^k, x_2^k, x_3^k, x_4^k\right)$$

einer gleichverteilten Folge in E^4 ausrechnen.

Wir haben bisher nur den zweiwertigen Fall behandelt: Rechts oder links, Ja oder Nein, ± 1. Bei den Mesonen haben wir den dreiwertigen Fall ± 1 oder Null.

Allgemein können wir s-Tripel $l_1(x_1, p_1), \ldots, l_s(x_s, p_s)$ zugrunde legen, und Funktionen F, die von diesen s-Tupeln abhängen. Wir können dann auch eine Folge $\left(x_1^k, \ldots, x_s^k\right)$ wählen, die im E^s gleichverteilt sind. Tatsächlich haben wir dies in den Beispielen schon implizit benützt.

Ist F quadrierbar, dann bilden wir

$$\frac{1}{N}\sum_{k=1}^{N} F\left(l_1\left(x_1^k, p_1\right), \ldots, l_s\left(x_s^k, p_s\right)\right)$$

und das zugehörige Integral

$$\int_{E^s} F\left(l_1\left(x_1^k, p_1\right), \ldots, l_s\left(x_s^k, p_s\right)\right) dx_1 \cdots dx_s.$$

Beispiel 1:

$$\Psi_s(x_1,\dots,x_s) = \begin{vmatrix} \delta^{k_1}(x_1,p_1) & \dots & \delta^{k_s}(x_1,p_1) \\ \delta^{k_1}(x_2,p_2) & \dots & \delta^{k_s}(x_2,p_2) \\ & \vdots & \\ \delta^{k_1}(x_s,p_s) & \dots & \delta^{k_s}(x_s,p_s) \end{vmatrix},$$

$k_1,\dots,k_s$ sind verschiedene ganze Zahlen.

Für $s = 2$ haben wir

$$\Psi_2 = \delta^{k_1}(x_1)\delta^{k_2}(x_2) - \delta^{k_2}(x_1)\delta^{k_1}(x_2).$$

Beispiel 2: Ein weiteres Beispiel ist $(e(kx) = e^{ikx})$

$$\Phi_s(x_1,\dots,x_s) = \begin{vmatrix} e(k_1,x_1) & \dots & e(k_s,x_1) \\ e(k_1,x_2) & \dots & e(k_s,x_2) \\ & \vdots & \\ e(k_1,x_s) & \dots & e(k_s,x_s) \end{vmatrix}.$$

Für $s = 2$ ist

$$\Phi_2 = e(k_1,x_1)e(k_2,x_2) - e(k_1,x_2)e(k_2,x_1)$$

und

$$|\Phi_2|^2 = 2(1 - \cos(k_1 - k_2)(x_1 - x_2)).$$

In der Quantenchemie handelt es sich unter anderem um die Aufgabe, die Zusammensetzung eines Moleküls aus den Atomen quantentheoretisch zu erklären. Diese Aufgabe ist ein Vielkörperproblem und wird angenähert mittels Störungsrechnung auf ein Hauptachsenproblem zurückgeführt. Es handelt sich darum, das Polynom der zugehörigen Hauptachsengleichung als Produkt von irreduziblen Polynomen von niederem Grad darzustellen. Man hat die Darstellungstheorie von FROBENIUS, I. SCHUR und BURNSIDE herangezogen. Diese Methode geht wohl nach Anregung von J. VON NEUMANN zuerst auf E. WIGNER zurück. Es wurde bei der Valenztheorie der chemischen Verbindungen die Invariantentheorie herangezogen. Dies wollen wir nun erläutern, wobei sich die Wechselwirkung von Mathematik und Physik deutlich zeigt. Es sei noch hervorgehoben, daß durch das Pauliprinzip die Spins eine wichtige Rolle spielen, vor allem die $\delta_1(x_1,p),\dots,\delta_m(x_m,p)$. Wir denken uns dabei die $x_1,\dots,x_s$ als Elemente einer gleichverteilten Folge in E^s, wo s die Anzahl der zu verwendenden Spins ist. Dabei spielen vor allem die vorher genannten Determinanten eine wichtige Rolle, im zweiten Fall auch Slater-Determinanten genannt.

Der Zusammenhang mit der binären Invariantentheorie ist folgender: Es sei SL_2 die Gruppe alle linearen binären unimodularen Transformationen

$$x' = \alpha x + \beta y,$$
$$y' = \gamma x + \delta y,$$

wobei die Koeffizienten komplexe Zahlen sind.

Ein Polynom I heißt Invariante, wenn sie gegenüber dieser Transformation in sich selber übergeht und schiefsymmetrisch ist. Als Beispiel sei das Klammerprodukt $[\xi\eta]$ angeführt, wo $\xi = (x_1, y_1)$, $\eta = (x_2, y_2)$ und $[\xi\eta] = x_1y_2 - x_2y_1$.

Allgemein: Für jedes Monom $[\xi_1\eta_1]^{\alpha_1}, \ldots, [\xi_s\eta_s]^{\alpha_s}$, wo $\alpha_1, \ldots, \alpha_s$ natürliche Zahlen sind, gilt der sogenannte erste Invariantensatz: Jede Invariante I läßt sich als Linearkombination von Monomen darstellen. Nun besteht zwischen Monomen die folgende Beziehung

$$[ab][cd] + [ac][bd] + [ad][bc] = 0.$$

Es soll nun eine Basis für die Darstellung von I durch Monome aufgestellt werden, d.h. die Monome der Darstellung sollen linear unabhängig sein. Der zweite Invariantensatz sagt aus, daß es eine solche Darstellung gibt.

Der Zusammenhang mit der Quantenchemie ist folgender: Wir haben schon vorher diese Klammerprodukte eingeführt. Es wird in den drei vorher zitierten Arbeiten so vorgegangen: Wir schreiben die Atome $x, y, \ldots$ eines Moleküls auf einen Kreis und verbinden die Punkte auf diesem Kreis, welche in einer Valenz zueinander stehen, durch ihre Valenzstriche (so viele, wie in der chemischen Verbindung auftreten, z. B. a). Für x und y z. B. wird das ausgedrückt durch das Symbol $[xy]^a$, für x, y, z z. B. durch $[xy]^a[xz]^b$, dies nennt man das Valenzbild. Nun können die Moleküle in Isotopen auftreten. Es werden nun jedem Valenzbild ein Monom zugeschrieben und alle Valenzbilder dieses Moleküls aufgestellt. Wir erhalten also insgesamt eine Invariante, die sich nach dem ersten Invariantensatz als eine Linearkombination von Monomen darstellen läßt. Wir brauchen dazu aber eine Basis, die nun aufzustellen ist. Als Beispiel wurden von G. Rumer CN–CN und HN–NH behandelt. In der in der Einleitung zitierten Arbeit wurde eine Methode entwickelt, um diese Basis aufzustellen, die in der Mathematik unbekannt war. Die Valenzbilder können sich aufgrund der Identität überkreuzen. Nun hat zunächst

Rumer eine Methode angegeben, wie man mit Hilfe der Identität die Bilder entkreuzen kann.

Beispiel 3 (siehe $(*)$):

$$\begin{array}{ccc} 1 & & 2 \\ & \times & \\ 3 & & 4 \end{array} = \begin{array}{cc} 1 & 2 \\ | & | \\ 3 & 4 \end{array} - \begin{array}{c} 1 \to 2 \\ \\ 3 \to 4 \end{array}$$

Rumer und Teller haben gezeigt, wie man jedes Monom in endlich vielen Schritten entkreuzen kann. Diese entkreuzten Monome sind linear unabhängig und bilden die Basis. Damit gelingt es, das Hauptachsenproblem bei CN–CN und Hydrazin auf eine quadratische Gleichung zurückzuführen. Die Autoren führen dies auch bei Benzol, wo die Sechsecksymmetrie benützt wird, auf die Kreisteilungsgleichung zurück.

Man kann alles auch gruppentheoretisch deuten[3], E. Hückel wendet dann tieferliegende Methoden an, wie schon erwähnt.

§4. Wir wollen jetzt die Fermionen, die von P. Jordan und E. Wigner eingeführt wurden, von unserem Standpunkt aus behandeln.

Wir führen für $j = 1, \ldots, s$ die Variablen $x_1, \ldots, x_s$ im E^s ein und bezeichnen sie als

$$\begin{bmatrix} 0 & r \\ l & 0 \end{bmatrix}_j \qquad \text{bzw.} \qquad \begin{bmatrix} r-l & 0 \\ 0 & l-r \end{bmatrix}_j .$$

Wir haben diese Matrizen für $j = 1$ bereits betrachtet, z. B. $X^* = \begin{bmatrix} 0 & r \\ l & 0 \end{bmatrix}$. Wir führen auch für $X = \begin{bmatrix} 0 & l \\ r & 0 \end{bmatrix}$ Indizes ein,

$$\begin{bmatrix} 0 & l_j \\ r_j & 0 \end{bmatrix} \qquad \text{bzw.} \qquad \begin{bmatrix} r_j - l_j & 0 \\ 0 & l_j - r_j \end{bmatrix},$$

sowie die Einheitsmatrix

$$e_j = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}_j .$$

Wir bilden nun die $2s$-reihigen Matrizen a_j und a_j^+, wobei

$$a_j = v_j \begin{bmatrix} 0 & r \\ l & 0 \end{bmatrix}_j w_k$$

bzw.

$$a_j^+ = v_j \begin{bmatrix} 0 & l \\ r & 0 \end{bmatrix}_j w_k,$$

[3] Fr. Aardenne-Ehrenfest.

wobei

$$v_j = \prod_{n=1}^{j-1} \begin{bmatrix} r-l & 0 \\ 0 & l-r \end{bmatrix}_m$$

und

$$w_k = \prod_{n=1}^{k} e_{j+n}.$$

Dabei ist $j+k=2s$.

Die Gleichungen (4), (4′), (5), (5′) sind direkte Produkte (P. JORDAN pflegte zu sagen „durch Verschmelzung“).

Wir zeigen nun

$$a_f a_f^+ + a_f^+ a_f = e.$$

Beweis. Es ist

$$a_f a_f^+ = v_f \begin{bmatrix} 0 & r \\ l & 0 \end{bmatrix}_f v_f \begin{bmatrix} 0 & l \\ r & 0 \end{bmatrix}_f w_{2s-f},$$

$$a_f^+ a_f = v_f \begin{bmatrix} 0 & l \\ r & 0 \end{bmatrix}_f v_f \begin{bmatrix} 0 & r \\ l & 0 \end{bmatrix}_f w_{2s-f},$$

$$\begin{bmatrix} 0 & r \\ l & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 0 & l \\ r & 0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} r^2 & 0 \\ 0 & l^2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} r & 0 \\ 0 & l \end{bmatrix}$$

und

$$\begin{bmatrix} 0 & l \\ r & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 0 & r \\ l & 0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} l^2 & 0 \\ 0 & r^2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} l & 0 \\ 0 & r \end{bmatrix},$$

also

$$\begin{bmatrix} r & 0 \\ 0 & l \end{bmatrix} \begin{bmatrix} l & 0 \\ 0 & r \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} r+l & 0 \\ 0 & l+r \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} = e.$$

Weiters ist

$$\begin{aligned} \begin{bmatrix} r-l & 0 \\ 0 & l-r \end{bmatrix} \begin{bmatrix} r-l & 0 \\ 0 & l-r \end{bmatrix} &= \begin{bmatrix} (r-l)^2 & 0 \\ 0 & (l-r)^2 \end{bmatrix} \\ &= \begin{bmatrix} r^2+l^2-2rl & 0 \\ 0 & r^2+l^2-2rl \end{bmatrix} \\ &= \begin{bmatrix} r+l & 0 \\ 0 & r+l \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}. \end{aligned}$$

Es gilt nun für $f \neq g$

$$\begin{aligned} a_f a_g + a_g a_f &= 0, \\ a_f^+ a_g^+ + a_g^+ a_f^+ &= 0, \\ a_f^+ a_g + a_g a_f^+ &= 0. \end{aligned}$$

Wir können o.B.d.A. $f < g$ annehmen. Betrachten wir

$$a_f a_g = v_f \begin{bmatrix} 0 & r \\ l & 0 \end{bmatrix}_f v_g \begin{bmatrix} 0 & r \\ l & 0 \end{bmatrix}_g .$$

Nun ist nach Definition

$$v_g = \prod_{k=1}^{g} \begin{bmatrix} r-l & 0 \\ 0 & l-r \end{bmatrix}_f .$$

Es muß nun nach Definition

$$\begin{bmatrix} r-l & 0 \\ 0 & l-r \end{bmatrix}_f$$

in v_g vorkommen. Es ist nun

$$\begin{bmatrix} r-l & 0 \\ 0 & l-r \end{bmatrix}_f \begin{bmatrix} 0 & r \\ l & 0 \end{bmatrix}_f = \begin{bmatrix} 0 & r \\ l & 0 \end{bmatrix}_f$$

und

$$\begin{bmatrix} 0 & r \\ l & 0 \end{bmatrix}_f \begin{bmatrix} r-l & 0 \\ 0 & l-r \end{bmatrix}_f = \begin{bmatrix} 0 & -r \\ -l & 0 \end{bmatrix}_f = - \begin{bmatrix} 0 & r \\ l & 0 \end{bmatrix}_f .$$

F. Bopp hat in seiner Arbeit [BOP01] folgendes gezeigt:

Betrachtet man die unendlichen Oszillationsmatrizen p, q, die bekanntlich die Relation $pq - qp = e$ erfüllen, und einen potentiell endlichen Abschnitt S im Sinne von Laugwitz, so kann man sie durch Funktionen a_k, genauer gesagt als Summen B, B^+ von der Gestalt $a_k a_k^+$ darstellen, deren Koeffizienten von der Gestalt $\sqrt{k+1}$ bzw. $\sqrt{k}$ sind, sodaß

$$BB^+ - B^+B = e$$

ist.

Es sei $\varphi_1, \ldots, \varphi_s$ ein normiertes Orthogonalsystem in einem s-dimensionalen Hilbertraum H, d.h. es ist

$$\langle \varphi_i, \varphi_j \rangle = 0 \qquad \text{für} \qquad i \neq j$$

und

$$\langle \varphi_i, \varphi_j \rangle = |\varphi_i|^2 = 1 \qquad \text{für} \qquad i = j.$$

Wir betrachten nun ein Element Φ aus H, d.h. es sei

$$\Phi = \sum_i \gamma_i \varphi_i.$$

Wir betrachten weiters ein Element G aus $H \times H$, dann läßt sich G in der Gestalt

$$G = \sum_{i,k} G_{ik} \varphi_i \varphi_k$$

darstellen. Wir betrachten nun

$$\Phi \times \Phi = \sum \gamma_i \gamma_k \varphi_i \varphi_k$$

und

$$\langle G, \Phi \times \Phi \rangle = \sum G_{ik} \gamma_i \gamma_k$$

und

$$\frac{\langle G, \Phi \times \Phi \rangle}{\sqrt{\Phi \times \Phi, \Phi \times \Phi}} = \frac{\sum G_{ik} \gamma_i \gamma_k}{\sqrt{\sum \gamma_i^2 \gamma_k^2}} = \frac{\sum G_{ik} \gamma_i \gamma_k}{\sum \gamma_i^2}. \tag{$*$}$$

Wir bilden nun

$$\tilde{\Phi} = \sum_{i=1}^{s} a_i \varphi_i,$$

wo a_i die eben konstruierten Fermionen sind und

$$\tilde{\Phi}^+ = \sum_i a_i^+ \varphi_i,$$

dann ist

$$\tilde{\Phi}^+ \tilde{G} \tilde{\Phi} = \sum_{i,k=1}^{s} a_i^+ G_{ik} a_k.$$

Wenn $G_{ik} = E$ die Einheitsmatrix ist, dann ist

$$\tilde{\Phi}^+ E \tilde{\Phi} = \sum_{i=1}^{s} a_i^+ a_i$$

die „Anzahl“ N des Systems der Fermionen.

Setzen wir $H_1 = H \times H$, dann können wir auf H_1 das gleiche Verfahren anwenden, das wir auf H angewendet haben. Das Orthogonalsystem besteht jetzt aus den paarweisen Produkten $\Phi_j \Phi_k$. Statt Φ nehmen wir jetzt $\Phi_1 = \Phi \times \Phi$ und G ist ein Element aus $H_1 \times H_1$. Statt des Systems a_j nehmen wir das System der Produkte $a_j a_j$, dann gilt die gleiche Formel $(*)$,

$$\frac{\langle G_1, \Phi_1 \times \Phi_1 \rangle}{\sqrt{\Phi \times \Phi, \Phi \times \Phi}} = \frac{\sum G_{iklm} \gamma_i \gamma_k \gamma_l \gamma_m}{\sqrt{\sum \gamma_i^2 \gamma_k^2 \gamma_l^2 \gamma_m^2}} = \frac{\sum G_{iklm} \gamma_i \gamma_k \gamma_l^2 \gamma_m^2}{\gamma_1^2}.$$

Es gelten die analogen Formeln, überall ist Φ durch Φ_1 bzw. n durch n_1 zu ersetzen. Dieser Prozeß läßt sich fortsetzen.

Zusatz

Es seien λ_2, λ_5, λ_7 die Gell-Mann-Matrizen, welche das Paar $(i, -i)$ enthalten, die anderen lassen wir weg, wobei $i = \sqrt{-1}$ ist. Es sei weiter ω eine modulo 1 gleichverteilte dreidimensionale Folge, ihre Elemente bezeichnen wir mit $(x(2,k), x(5,l), x(7,m))$, wobei k, l, m beliebige natürliche Zahlen sind.

Wir bilden für jedes Paar (a,b) aus der Menge (2, 5, 7) die Vorzeichenfunktion

$$(1 - 2\iota(x(a,k)))(1 - 2\iota(x(b,l))),$$

wobei $\iota(x) = 0$, wenn $x(c,n)$ im Intervall $< 0, \frac{1}{2}$ liegt, und $\iota(x) = 1$, wenn es nicht in diesem Intervall liegt. c sei aus der Menge (a,b) und n eine beliebige natürliche Zahl.

Man kann dann alles, was über die klassische Spinfunktion gesagt wurde, übertragen.

Literatur

[BOP01] Bopp, F. (1971) Über den Zustandsraum der Quantenphysik. Sitz.-Ber. Bayer. Akad. d. Wiss., Math.-Naturwiss. Kl. **1971**: 90–93

[DÜR01] Dürrenmatt, R. (1989) Philosophie und Naturwissenschaften, Essays und Reden. Diogenes-Verlag, insbesondere S. 165

[HEI01] Heitler, W. (1961) Elemente der Wellenmechanik und Anwendungen der Quantentheorie, 2. Aufl. Vieweg, Braunschweig

Anschrift des Verfassers: Prof. Dr. Dr. h.c. Edmund Hlawka, Institut für Analysis und Scientific Computing, Technische Universität Wien, Wiedner Hauptstraße 8–10, 1040 Wien, Österreich.