

Vorwort

zur Theoretischen Physik

Mit diesem mehrbändigen Werk lege ich ein Lehrbuch der Theoretischen Physik vor, das dem an vielen deutschsprachigen Universitäten eingeführten Aufbau der Vorlesungen folgt: die Mechanik und die nichtrelativistische Quantenmechanik, die in Geist, Zielsetzung und Methodik nahe verwandt sind, stehen nebeneinander und stellen die Grundlagen für das Hauptstudium bereit, die eine für die klassischen Gebiete, die andere für Wahlfach- und Spezialvorlesungen. Die klassische Elektrodynamik und Feldtheorie und die relativistische Quantenmechanik leiten zu Systemen mit unendlich vielen Freiheitsgraden über und legen das Fundament für die Theorie der Vielteilchensysteme, die Quantenfeldtheorie und die Eichtheorien. Dazwischen steht die Theorie der Wärme und die wegen ihrer Allgemeinheit in einem gewissen Sinn alles übergreifende Statistische Mechanik.

Als Studentin, als Student lernt man in einem Zeitraum von drei Jahren fünf große und wunderschöne Gebiete, deren Entwicklung im modernen Sinne vor bald 400 Jahren begann und deren vielleicht dichteste Periode die Zeit von etwas mehr als einem Jahrhundert von 1830, dem Beginn der Elektrodynamik, bis ca. 1950, der vorläufigen Vollendung der Quantenfeldtheorie, umfaßt. Man sei nicht enttäuscht, wenn der Fortgang in den sich anschließenden Gebieten der modernen Forschung sehr viel langsamer ist, diese oft auch sehr technisch geworden sind, und genieße den ersten Rundgang durch ein großartiges Gebäude menschlichen Wissens, das für fast alle Bereiche der Naturwissenschaften grundlegend ist.

Die Lehrbuchliteratur in Theoretischer Physik hinkt in der Regel der aktuellen Fachliteratur und der Entwicklung der Mathematik um einiges nach. Abgesehen vom historischen Interesse gibt es keinen stichhaltigen Grund, den Umwegen in der ursprünglichen Entwicklung einer Theorie zu folgen, wenn es aus heutigem Verständnis direkte Zugänge gibt. Es sollte doch vielmehr so sein, daß die großen Entdeckungen in der Physik der zweiten Hälfte des zwanzigsten Jahrhunderts sich auch in der Darstellung der Grundlagen widerspiegeln und dazu führen, daß wir die Akzente anders setzen und die Landmarken anders definieren als beispielsweise die Generation meiner akademischen Lehrer um 1960. Auch sollten neue und wichtige mathematische Methoden und Erkenntnisse mindestens dort eingesetzt und verwendet werden, wo sie dazu beitragen, tiefere Zusammenhänge klarer hervortreten zu lassen und gemeinsame Züge scheinbar verschiedener Theorien erkennbar zu machen. Ich verwende in diesem Lehrbuch in einem ausgewogenen Maß moderne mathematische Techniken und traditionelle, physikalisch-intuitive Methoden, die ersteren vor allem dort, wo sie die Theorie präzise fassen, sie effizienter formulierbar und letzten Endes einfacher und transparenter machen – ohne, wie ich hoffe, in die trockene Axiomatisierung und Algebraisierung zu verfallen, die manche neueren Monographien der Mathematik so schwer leserlich machen;

außerdem möchte ich dem Leser, der Leserin helfen, die Brücke zur aktuellen physikalischen Fachliteratur und zur Mathematischen Physik zu schlagen. Die traditionellen, manchmal etwas vage formulierten physikalischen Zugänge andererseits sind für das veranschaulichende Verständnis der Phänomene unverzichtbar, außerdem spiegeln sie noch immer etwas von der Ideen- und Vorstellungswelt der großen Pioniere unserer Wissenschaft wider und tragen auch auf diese Weise zum Verständnis der Entwicklung der Physik und deren innerer Logik bei. Diese Bemerkung wird spätestens dann klar werden, wenn man zum ersten Mal vor einer Gleichung verharret, die mit raffinierten Argumenten und eleganter Mathematik aufgestellt ist, die aber nicht zu einem *spricht* und verrät, wie sie zu interpretieren sei. Dieser Aspekt der *Interpretation* – und das sei auch den Mathematikern und Mathematikerinnen klar gesagt – ist vielleicht der schwierigste bei der Aufstellung einer physikalischen Theorie.

Jeder der vorliegenden Bände enthält wesentlich mehr Material als man in einer z. B. vierstündigen Vorlesung in einem Semester vortragen kann. Das bietet den Dozenten die Möglichkeit zur Auswahl dessen, was sie oder er in ihrer/seiner Vorlesung ausarbeiten möchte und, bei Wiederholungen, den Aufbau der Vorlesung zu variieren. Für die Studierenden, die ja ohnehin lernen müssen, mit Büchern und Originalliteratur zu arbeiten, bietet sich die Möglichkeit, Themen oder ganze Bereiche je nach Neigung und Interesse zu vertiefen. Ich habe den Aufbau fast ohne Ausnahme „selbsttragend“ konzipiert, so daß man alle Entwicklungen bis ins Detail nachvollziehen und nachrechnen kann. Die Bücher sind daher auch für das Selbststudium geeignet und „verführen“ Sie, wie ich hoffe, auch als gestandene Wissenschaftler und Wissenschaftlerinnen dazu, dies und jenes nocheinmal nachzulesen oder neu zu lernen.

Bücher gehen heute nicht mehr, wie noch vor anderthalb Jahrzehnten, durch die klassischen Stadien: handschriftliche Version, erste Abschrift, Korrektur derselben, Erfassung im Verlag, erneute Korrektur etc., die zwar mehrere Iterationen des Korrekturlesens zuließen, aber stets auch die Gefahr bargen, neue Druckfehler einzuschmuggeln. Der Verlag hat ab Band 2 die von mir in \LaTeX geschriebenen Dateien (Text und Formeln) direkt übernommen und bearbeitet. So hoffe ich, daß wir dem Druckfehlerteufel wenig Gelegenheit zu Schabernack geboten haben. Über die verbliebenen, nachträglich entdeckten Druckfehler werde ich, soweit sie mir bekannt werden, auf einer Webseite berichten, die über den Hinweis *Buchveröffentlichungen/book publications* auf meiner homepage zugänglich ist. Die letztere erreicht man über

<http://www.thep.physik.uni-mainz.de>

Den Anfang hatte die zuerst 1988 erschienene, seither kontinuierlich weiterentwickelte *Mechanik* gemacht. Ich würde mich sehr freuen, wenn auch die anderen Bände sich so rasch etablieren würden und dieselbe starke Resonanz fänden wie dieser erste Band. Daß die ganze Reihe überhaupt zustande kommt, daran hat auch Herr Dr. Hans J. Kölsch vom Springer-Verlag durch seinen Rat und seine Ermutigung seinen Anteil, wofür ich ihm an dieser Stelle herzlich danke.

Vorwort zu Band 2

Die Quantenmechanik bildet die begriffliche und handwerkliche Grundlage für fast alle Zweige der modernen Physik, von der Atom- und Molekülphysik, über die Physik der Kondensierten Materie, die Kernphysik bis zur Elementarteilchenphysik. Für sich allein genommen, ist sie ein überaus reizvolles Teilgebiet der Theoretischen Physik und hat in dem dreiviertel Jahrhundert seit ihrer Entstehung nichts von ihrer Faszination verloren. Ihre physikalische Interpretation gibt auch heute noch zu tiefsinnigen Überlegungen und Kontroversen Anlaß [Selleri (1990a)], [Selleri (1990b)], [d’Espagnat (1989)], [Omnès (1994)], ihr mathematischer Rahmen ist anspruchsvoll und vielleicht nicht abschließend geklärt. Wie ich schon im Vorwort zu Band 1 ausgeführt habe, ist eine gründliche Kenntnis der kanonischen Mechanik im Blick auf ihre Interpretation zwar nicht unerlässlich, aber sehr hilfreich. Die mathematischen Grundlagen, die streng genommen von der Gruppentheorie über die Theorie der Differentialgleichungen bis zur Funktionalanalysis reichen, kann man sich heuristisch durch Analogien einerseits zur Linearen Algebra, andererseits zur Hamilton-Jacobischen Mechanik weitgehend erschließen.

Dieser Band, der die „praktische“ Quantenmechanik ebenso behandelt wie die allgemeinen Prinzipien der Quantentheorie, ist so aufgebaut, daß er als begleitendes Buch zu einer Vorlesung *Quantenmechanik, Teil I* ebenso wie zum Selbststudium dienen kann. Beginnend mit einer ausführlichen Behandlung der nichtrelativistischen Quantenmechanik eines Punktteilchens und eine erste Einführung in die Theorie der Potentialstreuung führt er schrittweise an die allgemeinen Prinzipien der Quantentheorie heran, die physikalisch motiviert und begründet werden. Er behandelt kontinuierliche und diskrete Raum-Zeit-Symmetrien und deren besondere Rolle in der Quantentheorie ebenso wie die wichtigsten Rechenmethoden der Quantenmechanik. Eine Einführung in die Grundlagen der Vielteilchensysteme, speziell der Viel-Fermionensysteme, bildet den Abschluß. Allerdings ist die Stoffmenge umfangreicher als das, was man erfahrungsgemäß in einer einsemestrigen, 4-stündigen Vorlesung behandeln kann. Die Dozentin, der Dozent wird also eine gewisse Auswahl treffen müssen und die übrigen Abschnitte als ergänzende Lektüre empfehlen.

Das Buch enthält eine Reihe von Aufgaben, von denen einige mit Hinweisen, andere mit ausführlichen Lösungen versehen sind. Viele nichttriviale, physikalisch wichtige Beispiele sind vollständig ausgearbeitet und in den Text integriert. Anders als in Band 1 habe ich auf PC-gestützte praktische Aufgaben verzichtet (Aufgabe 2.5 bildet allerdings eine Ausnahme), weil es bereits spezialisierte Bücher zur Quantenmechanik mit den algebraischen Programmpaketen *Mathematica* bzw. *Maple* gibt, so z. B. [Feagin (1995)] und [Horbatsch (1995)]. Wer seine Kenntnisse und Erfahrungen in der Quantenmechanik durch die Bearbeitung von nichttrivialen und nicht exakt lösba-

Beispielen vertiefen und erweitern möchte, sei auf diese hierfür gut geeigneten Bücher hingewiesen.

Die Lehrbuchliteratur zur Quantenmechanik ist sehr umfangreich, zu umfangreich, um sie auch nur einigermaßen vollständig zitieren zu können. Ich möchte sie in einer etwas summarischen Weise in drei Gruppen einteilen: Die Reihe der „Klassiker“, die Gruppe der eigentlichen, relativ kompakten Lehrbücher und einige besonders umfangreiche Werke mit Handbuchcharakter. Zu den Klassikern gehören unter anderen [Dirac (1996)], [Pauli (1980)], [Heisenberg (1958)], die auch heute noch mit großem Gewinn zu lesen sind und die ich der Leserin, dem Leser mit Nachdruck empfehle. Zur dritten Gruppe gehören [Messiah (1991)], [Cohen-Tannoudji et al. (1977)], [Galindo und Pascual (1990)], die vielleicht für einen ersten Zugang und zum Lernen zu umfangreich sind, die aber als Handbücher für spezielle Fragestellungen und als Zugang zur Originalliteratur sehr gut geeignet sind. Die Literaturliste gibt eine Auswahl von Lehrbüchern in deutscher und englischer Sprache, außerdem einige spezialisierte Monographien zu Teilgebieten der Quantenmechanik (Streutheorie, Relativistische Quantenmechanik, Drehgruppe in der Quantentheorie u. a.) und einige mathematische Texte, anhand derer man die in der Quantentheorie angesprochene Mathematik vertiefen kann.

Ähnlich wie für die Mechanik werde ich in Band 4, der die relativistische Quantenmechanik und eine Einführung in die Quantenfeldtheorie behandelt, für beide Teile der Quantentheorie einige historische Anmerkungen einfügen.

Auch der in diesem Band behandelte Stoff ist durch die „Feuerprobe“ meiner Vorlesungen im Rahmen des Mainzer Theoriekursus gegangen und sein Aufbau ist dabei mehrfach geändert und – so hoffe ich – ständig verbessert worden. Dies gibt mir Gelegenheit, den Studierenden, meinen Mitarbeitern und Mitarbeiterinnen sowie meinen Kollegen zu danken, die durch Fragen, Kritik oder Diskussionen viel zu seiner Ausgestaltung beigetragen haben. Die Zusammenarbeit mit den Teams des Springer-Verlags war wie gewohnt ausgezeichnet, wofür ich stellvertretend Herrn Dr. H.-J. Kölsch und Herrn C.-D. Bachem herzlich danken möchte.

Mainz, im August 1999

Florian Scheck

Die Prinzipien der Quantentheorie

Einführung

Dieses Kapitel befaßt sich mit dem formalen Rahmen der Quantenmechanik: ihren mathematischen Hilfsmitteln, der Verallgemeinerung und Abstraktion des Zustandsbegriffs, der Darstellungstheorie und einer ersten Fassung der Postulate, auf denen die Quantentheorie beruht.

Was den mathematischen Rahmen angeht, so macht die Quantenmechanik regen Gebrauch vom Begriff des Hilbertraums, der Theorie der linearen Operatoren, die auf dem Hilbertraum definiert sind, und der Funktionalanalysis im allgemeinen. Das sind für sich genommen große und wichtige Gebiete, deren auch nur auszugsweise Darstellung den Rahmen dieses Buches bei weitem sprengen würde. Ich begnüge mich daher mit einer etwas pragmatischen Vorgehensweise, bei der alle für die Quantentheorie wichtigen Definitionen und Methoden eingeführt, aber nicht ausführlich begründet werden. Einige der allgemeinen Begriffe werden anhand von Matrixdarstellungen plausibel und – nach Möglichkeit – anschaulich gemacht, bei denen man viele der aus der Linearen Algebra vertrauten Methoden übertragen kann, auch wenn die Matrizen, mit denen man hier zu tun hat, häufig unendlichdimensional sind.

Inhalt

3.1 Darstellungstheorie	159
3.2 Der Begriff des Hilbert-Raums	167
3.3 Lineare Operatoren auf Hilbert-Räumen	177
3.4 Quantenmechanische Zustände	190
3.5 Zwischenbilanz	200
3.6 Schrödinger- und Heisenberg-Bild	202

3.1 Darstellungstheorie

Observable, die per Definition klassische Größen sind, werden in der Quantenmechanik durch selbstadjungierte Operatoren dargestellt. In den physikalischen Beispielen, die wir bis hierher studiert haben, definieren die Eigenfunktionen dieser Operatoren vollständige Systeme von Basisfunktionen, die orthogonal und entweder quadratintegrabel und daher auf 1 normierbar oder auf δ -Distributionen normierbar sind. Für die zugehörigen Eigenwertspektren gibt es drei Möglichkeiten:

1. Das Spektrum kann *rein diskret* sein. Beispiele hierfür sind das Quadrat des Bahndrehimpulses ℓ^2 und eine seiner Komponenten, z. B. ℓ_3 . Beide Operatoren sind auf der S^2 , der Einheitskugel im \mathbb{R}^3 , definiert, ihre Eigenfunktionen $Y_{\ell m}(\theta, \phi)$ sind orthonormiert und vollständig.

Ein anderes Beispiel ist der Hamiltonoperator des Kugeloszillators,

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + \frac{1}{2}m\omega^2 r^2, \quad (3.1)$$

der über dem \mathbb{R}^3 definiert ist und dessen Spektrum und Eigenfunktionen wir in Abschn. 1.9.4 hergeleitet haben.

2. Das Spektrum kann *rein kontinuierlich* sein. Beispiele für diesen Fall sind der Operator des Impulses \mathbf{p} eines Teilchens, der Ortsoperator \mathbf{x} und der Operator der kinetischen Energie $\mathbf{p}^2/(2m)$.
3. Das Spektrum kann aber auch *sowohl diskrete als auch kontinuierliche Anteile* haben. Ein wichtiges Beispiel ist der Hamiltonoperator, der das Wasserstoffatom beschreibt,

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta - \frac{e^2}{r}, \quad (3.2)$$

und den wir in Abschn. 1.9.5 studiert haben. Andere Beispiele sind Hamiltonoperatoren der Ein-Teilchen-Bewegung, in denen das Potential $U(r) = -U_0 \Theta(R_0 - r)$, also ein anziehender Kasten mit endlichem Radius ist. Ähnlich wie im Wasserstoffatom gibt es bei $E < 0$ gebundene Zustände, bei $E > 0$ solche, die im Kontinuum liegen.

Es sei nun $\psi_\alpha(\mathbf{x})$ oder, allgemeiner, $\psi_\alpha(t, \mathbf{x})$ der quantenmechanische Zustand eines physikalischen Systems, der durch die Quantenzahl(en) α charakterisiert ist. In der Tat kann α für mehr als eine Quantenzahl stehen, man denke nur an einen der diskreten Bindungszustände des Wasserstoffatoms, wo α für das Tripel (n, ℓ, m) steht. Die Fouriertransformation von ψ_α

$$\tilde{\psi}_\alpha(t, \mathbf{p}) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \int d^3x \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \mathbf{p} \cdot \mathbf{x}\right) \psi_\alpha(t, \mathbf{x})$$

ist eindeutig; mit ihr besitzen wir eine Entwicklung der physikalischen Wellenfunktion

$$\psi_\alpha(t, \mathbf{x}) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \int d^3p \exp\left(+\frac{i}{\hbar} \mathbf{p} \cdot \mathbf{x}\right) \tilde{\psi}_\alpha(t, \mathbf{p})$$

nach den Eigenfunktionen

$$\varphi(\mathbf{p}, \mathbf{x}) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \exp\left(\frac{i}{\hbar} \mathbf{p} \cdot \mathbf{x}\right) \quad (3.3)$$

des Impulsoperators. Daß diese nicht quadratintegrierbar und daher nicht im üblichen Sinne normierbar sind, spielt dabei keine Rolle, denn die Vollständigkeit läßt sich ebenso mit Hilfe der δ -Distribution formulieren. Die Funktion $\tilde{\psi}_\alpha(t, \mathbf{p})$ ist ebenso gut geeignet wie die Funktion $\psi_\alpha(t, \mathbf{x})$, den Zustand mit den Quantenzahlen „ α “ zu beschreiben. Deshalb spricht man im ersten Fall von der *Impulsraumdarstellung* des betrachteten Zustandes, im zweiten Fall von seiner *Ortsraumdarstellung*.

In der Ortsraumdarstellung des Zustandes „ α “ ist $|\psi_\alpha(t, \mathbf{x})|^2$ die Wahrscheinlichkeitsdichte der Bornschen Interpretation, d. h. $|\psi_\alpha(t, \mathbf{x})|^2 d^3x$ ist die Wahrscheinlichkeit, das Teilchen zur Zeit t in einer infinitesimalen Umgebung des Punkts \mathbf{x} zu finden. Analog hierzu ist $|\tilde{\psi}_\alpha(t, \mathbf{p})|^2 d^3p$ die Wahrscheinlichkeit, das Teilchen zur Zeit t in einer ε -Umgebung des Punkts \mathbf{p} im Impulsraum nachzuweisen.

Es sei A eine Observable, deren Eigenwertspektrum voll diskret und – der Einfachheit halber – nicht entartet angenommen ist. Ihre Eigenwerte seien mit a_n , ihre Eigenfunktionen mit φ_n bezeichnet, d. h.

$$A\varphi(\mathbf{x}) = a_n\varphi_n(\mathbf{x}).$$

Das System $\{\varphi_n\}$ sei vollständig und auf 1 normiert. Wenn die Zustandsfunktion $\psi_\alpha(t, \mathbf{x})$ ebenfalls (absolut) quadratintegrabel ist, dann läßt sie sich nach diesem Basissystem entwickeln,

$$\psi_\alpha(t, \mathbf{x}) = \sum_n \varphi_n(\mathbf{x}) c_n^{(\alpha)}(t) \quad \text{mit} \quad c_n^{(\alpha)}(t) = \int d^3x \varphi_n^*(\mathbf{x}) \psi_\alpha(t, \mathbf{x}).$$

Die Gesamtheit aller Entwicklungskoeffizienten $\{c_n^{(\alpha)}(t)\}$ gibt zu jedem Zeitpunkt eine vollständige Beschreibung des Zustands α , die Größe $|c_n^{(\alpha)}(t)|^2$ ist die Wahrscheinlichkeit, bei einer Messung der Observablen A an dem durch die Wellenfunktion ψ_α beschriebenen Zustand den Eigenwert a_n zu finden.

Falls das Spektrum von A entartet ist, muß man zusätzlich über die Basisfunktionen der Unterräume zu festem Eigenwert a_n summieren. Ein Beispiel für eine Observable mit rein diskrettem, allerdings entartetem Spektrum ist der Hamiltonoperator des Kugeloszillators (3.1), wobei $a_n = E_{n\ell}$ und

$$\varphi_v(\mathbf{x}) = R_{n\ell}(r) Y_{\ell m}(\theta, \phi), \quad v \equiv (n, \ell, m).$$

Falls A ein Spektrum hat, das sowohl diskrete als auch kontinuierliche Anteile hat, so lautet die Entwicklung der Wellenfunktion in einer symbolischen, aber einleuchtenden Schreibweise

$$\psi_\alpha(t, \mathbf{x}) = \sum_\nu d_\nu^{(\alpha)}(t) \varphi_\nu(\mathbf{x}) + \int d\nu d^{(\alpha)}(t, \nu) \varphi(\nu, \mathbf{x}).$$

Das klassische Beispiel für diesen Fall ist der Hamiltonoperator (3.2) des Wasserstoffatoms.

Als erstes Ergebnis halten wir fest, daß man den Zustand „ α “ wahlweise durch die Angabe von

$$\psi_\alpha(t, \mathbf{x}) \quad \text{oder} \quad \tilde{\psi}_\alpha(t, \mathbf{p}) \quad \text{oder} \\ \{c_n^{(\alpha)}(t)\} \quad \text{oder} \quad \{d_\nu^{(\alpha)}(t), d^{(\alpha)}(t, \nu)\} \quad (3.4)$$

darstellen kann. Es liegt daher nahe, den Begriff „quantenmechanischer Zustand“ zu abstrahieren, indem man ihn von jeder spezifischen Darstellung löst, und umgekehrt die Freiheit zu nutzen, bei konkreten Betrachtungen oder in praktischen Rechnungen diejenige Darstellung auszuwählen, die der jeweiligen Situation angepaßt ist. Ein vielleicht noch wichtigerer Bonus dieser Abstraktion des Zustandsbegriffs ist der, daß man jetzt auch solche Systeme behandeln kann, für die es kein klassisches Analogon gibt.

In einem gewissen Sinn stellen die Transformationen zwischen verschiedenen, aber äquivalenten Darstellungen ein Analogon der kanonischen Transformationen der Mechanik Hamiltonscher Systeme dar. Ähnlich wie dort ist das physikalische System, hier also seine Wellenfunktion invariant, seine Darstellung in einer der skizzierten, konkreten Formen ist eine Art „Koordinatenwahl“, die geschickt oder ungeschickt sein kann, auf jeden Fall aber einer spezifischen Fragestellung angepaßt sein soll. Natürlich müssen wir das Umrechnen von Wellenfunktionen und von Operatoren zwischen verschiedenen Darstellungen genauer untersuchen, doch bevor wir dies tun, führen wir eine besonders für die Praxis wichtige Schreibweise ein, die der gewünschten Abstraktion gut Rechnung trägt.

3.11 Diracsche Bracket-Schreibweise

Abstrahiert man den durch die Quantenzahl(en) α charakterisierten Zustand von seinen speziellen Darstellungen (3.4), so ist es oft nützlich, ihn in der symbolischen Form $|\alpha\rangle$ zu schreiben. Diese Notation geht auf Dirac zurück, der dieses Symbol mit „ket“, das dazu duale Objekt $\langle\alpha|$ mit „bra“ bezeichnete – unter Anspielung auf das Aufbrechen des englischen Wortes *bracket*, also der spitzen Klammern $\langle\cdots|\cdots\rangle$ in $\langle\cdots|$ und $|\cdots\rangle$. Es lohnt sich, diese Notation etwas genauer zu erklären: Da die Schrödinger-Gleichung eine lineare Gleichung ist, sind Linearkombinationen ihrer Lösungen selbst wieder Lösungen. Ein physikalischer Zustand in einer der Formen (3.4) ist daher ein (verallgemeinerter) *Vektor* in einem linearen Vektorraum über \mathbb{C} , den wir weiter unten genauer charakterisieren werden. Was den vier Darstellungen (3.4) gemeinsam ist, ist die Linearität und der physikalische Inhalt, der in der Angabe der Quantenzahlen α kodiert ist. Sie unterscheiden sich lediglich dadurch, daß wir den Zustand einmal durch quadratintegrale Funktionen über dem Ortsraum \mathbb{R}^3 , einmal durch solche Funktionen über dem Impulsraum \mathbb{R}_p^3 , einmal durch einen Spaltenvektor mit unendlich vielen Komponenten konkretisieren. Mit der Diracschen Schreibweise $|\cdots\rangle$ wird die invariante Information, nämlich der Vektorcharakter des Zustandes und sein physikalischer Inhalt zusammengefaßt, sie steht aber für *alle* Darstellungen. Wenn $|\alpha\rangle$ ein Vektor ist, und $\langle\beta|\alpha\rangle$ die komplexe Zahl

$$\int d^3x \psi_\beta^*(t, \mathbf{x}) \psi_\alpha(t, \mathbf{x}) \quad \text{bzw.} \quad \int d^3p \tilde{\psi}_\beta^*(t, \mathbf{p}) \tilde{\psi}_\alpha(t, \mathbf{p}) \quad \text{bzw.} \\ \sum_{n=0}^{\infty} c_n^{(\beta)*} c_n^{(\alpha)},$$

dann bedeutet das, daß $\langle\beta|$ eine Linearform ist, die auf Vektoren der Art $|\alpha\rangle$ wirkt und dabei eine komplexe Zahl liefert, sie also *dual* zu diesen ist. Im Ortsraum beispielsweise ist $|\alpha\rangle$ die Wellenfunktion $\psi_\alpha(t, \mathbf{x})$, während $\langle\beta|$ den Integraloperator

$$\int d^3x \psi_\beta^*(t, \mathbf{x}) \bullet$$

darstellt, der auf die durch den Punkt gekennzeichnete Leerstelle wirkt.

Wie man sieht, ist die Diracsche Notation eine etwas pragmatische Schreibweise, die für viele praktische Rechnungen nützlich und daher im physikalischen Alltag weit verbreitet ist. Die mathematische Literatur macht praktisch keinen Gebrauch davon, vermutlich weil sie nicht eindeutig ist¹ und unter Umständen mißverständlich sein kann. Wir werden sie im folgenden oft, aber nicht durchweg verwenden, und wollen sie hier zunächst durch einige einfache Beispiele illustrieren:

Beispiel 3.1

Es möge $|n\rangle$ das Basissystem charakterisieren, das zum vlldiskreten, zunächst nichtentarteten Eigenwertspektrum einer Observablen A gehört. Dann gilt $\langle m|n\rangle = \delta_{mn}$. Die Entwicklung eines physikalischen Zustands nach dieser Basis, die im Ortsraum die Form $\psi_\alpha(t, \mathbf{x}) = \sum \varphi_n(\mathbf{x}) a_n^{(\alpha)}(t)$ hat, hat die

¹So kann z.B. $|n\rangle$ das Basissystem $\varphi_n(x)$ von stationären Eigenfunktionen des eindimensionalen harmonischen Oszillators in allen Darstellungen bedeuten, könnte aber auch für ein anderes, vlldiskretes System mit einem anderen Hamiltonoperator stehen.

abstrakte, darstellungsunabhängige Form

$$|\alpha\rangle = \sum_n |n\rangle \langle n|\alpha\rangle .$$

Hierbei ist $\langle n|\alpha\rangle$, der Entwicklungskoeffizient nach dem Zustand „ n “, in der Ortsraumdarstellung somit

$$\langle n|\alpha\rangle = (\varphi_n, \psi_\alpha) = \int d^3x \varphi_n^*(\mathbf{x}) \psi_\alpha(t, \mathbf{x}) = \langle \alpha|n\rangle^* .$$

Die Entwicklung eines „bra“ lautet entsprechend

$$\langle \beta| = \sum_m \langle m|\beta\rangle^* \langle m| .$$

Das Skalarprodukt zweier Zustände in dieser Notation

$$\langle \beta|\alpha\rangle = \sum_{n,m} \langle m|\beta\rangle^* \langle n|\alpha\rangle \delta_{mn} = \sum_n \langle \beta|n\rangle \langle n|\alpha\rangle$$

ist konkret durch

$$\int d^3x \psi_\beta^*(t, \mathbf{x}) \psi_\alpha(t, \mathbf{x}) = \sum_n a_n^{(\beta)*} a_n^{(\alpha)}$$

gegeben, wobei die linke Seite im Ortsraum, die rechte Seite in der A -Darstellung gilt.

Wenn die Basis zu einer Observablen mit diskretem, entartetem Spektrum gehört oder zu einer Observablen mit gemischtem Spektrum, so ist die Summe über n im ersten Fall durch entsprechende Mehrfachsummen, im zweiten Fall durch Summe und Integral zu ersetzen. Ein Beispiel für den ersten Fall haben wir bei den gemeinsamen Eigenfunktionen zu ℓ^2 und zu ℓ_3 vorliegen, wo wir die Basis in der Diracschen Notation als $|\ell m\rangle$ schreiben; ein Beispiel für den zweiten bilden die Eigenfunktionen des Hamiltonoperators des Wasserstoffatoms.

Beispiel 3.2

Die Vollständigkeitsrelation nimmt in der *bra*- und *ket*-Notation die symbolische, aber sofort verständliche Form

$$\sum_{n=0}^{\infty} |n\rangle \langle n| = \mathbb{1} \quad \text{bzw.} \quad \sum_n |n\rangle \langle n| + \int dv |v\rangle \langle v| = \mathbb{1} \quad (3.5)$$

für den rein diskreten bzw. den gemischten Fall an. Würde man etwa den zweiten Ausdruck im Ortsraum ausschreiben, so wäre er

$$\begin{aligned} \sum_n \varphi_n(\mathbf{x}) \int d^3x' \varphi_n^*(\mathbf{x}') \bullet + \int dv \varphi_n(v, \mathbf{x}) \int d^3x' \varphi_n^*(v, \mathbf{x}') \bullet \\ = \int d^3x' \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}') \bullet; \end{aligned}$$

der Punkt steht wieder für die Leerstelle, kürzt also die Wellenfunktion ab, auf die der Ausdruck wirkt. Diese ausführliche Schreibweise ist weniger übersichtlich als die abstrakte und allgemeinere Notation.

Die Vollständigkeitsrelation in einem komplexen, unendlichdimensionalen Vektorraum, läßt sich ganz genauso notieren: Sei $\{e_n\}$ mit $e_i = (0, \dots, 0, 1, 0, \dots, 0)^T$ ein System von Basisvektoren, (mit einer 1 als i -tem Eintrag), das diesen Raum aufspannt. Dann ist

$$\begin{aligned} \sum_{n=1}^{\infty} |n\rangle\langle n| &= \sum_{i=0}^{\infty} e_i e_i^\dagger \\ &= \sum_i \begin{pmatrix} 0 \\ \vdots \\ 0 \\ 1 \\ 0 \\ \vdots \end{pmatrix} (0 \dots 0 \ 1 \ 0 \dots) \\ &= \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & \dots \\ 0 & 1 & 0 & \dots \\ 0 & 0 & 1 & \dots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix} = \mathbb{1}. \end{aligned}$$

Beispiel 3.3

Erwartungswerte oder allgemeinere Matrixelemente von Operatoren schreibt man als $\langle\beta|A|\alpha\rangle$, ein Ausdruck, der etwa im Ortsraum das aus Kap. 1 vertraute Integral über den \mathbb{R}^3 ist. Betrachtet man ein solches Matrixelement für das Produkt zweier Operatoren A und B , so kann man in der folgenden, etwas formalen Rechnung die Vollständigkeitsrelation verwenden und die Matrixelemente des Produkts durch Produkte von Matrixelementen der einzelnen Operatoren ausdrücken,

$$\langle\beta|AB|\alpha\rangle = \langle\beta|A \mathbb{1} B|\alpha\rangle = \sum_n \langle\beta|A|n\rangle\langle n|B|\alpha\rangle.$$

Von dieser Rückführung auf die einzelnen Operatoren eines Produkts wird oft Gebrauch gemacht und wir werden bald einige konkrete Beispiele kennenlernen.

Beispiel 3.4

Die Erweiterung auf uneigentliche, d. h. nicht auf 1 normierbare Zustände, ist ohne Schwierigkeiten durchführbar. Bezeichnen wir mit $|x\rangle$ und $|p\rangle$ die Eigenfunktionen des Operators x bzw. p in Diracscher Notation, dann gilt

$$\langle x'|x\rangle = \delta(x' - x), \quad \langle p'|p\rangle = \delta(p' - p).$$

Die Entwicklungskoeffizienten eines physikalischen Zustandes „ α “ nach den Eigenfunktionen von x , die wir nach dem oben Gesagten als $\langle x|\alpha\rangle$ schreiben, sind nichts anderes als $\psi_\alpha(t, x)$, die Ortsraumdarstellung der Wellenfunktion. In diesem Sinne ist die Formel

$$\langle x|p\rangle = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \exp\left(\frac{i}{\hbar} p \cdot x\right) = \langle p|x\rangle^*$$

sofort verständlich: auf der linken Seite steht die Ortsraumdarstellung der Wellenfunktion $|p\rangle$, auf der rechten die Impulsraumdarstellung – konjugiert komplex – der Eigenfunktion $|x\rangle$ des Ortsoperators.

3.12 Transformationen zwischen verschiedenen Darstellungen

Wenn man die Darstellung der Zustände wechselt, werden natürlich auch die Operatoren transformiert, die auf diese Zustände wirken. Für eine erste Orientierung mag man sich an die Beschreibung endlichdimensionaler Vektorräume in der Linearen Algebra erinnern: Sei V ein reeller Vektorraum der Dimension n , $\hat{e} = \{\hat{e}_k\}$, $k = 1, \dots, n$, eine orthonormierte Basis, $\hat{e}_i \cdot \hat{e}_k = \delta_{ik}$. Jede orthogonale Transformation \mathbf{R} überführt sie in eine neue Orthonormalbasis,

$$\hat{e} \mapsto \hat{f} = \mathbf{R}\hat{e}, \quad \mathbf{R}^T \mathbf{R} = \mathbb{1}.$$

Observable in einem solchen \mathbb{R} -Vektorraum sind (hier noch reelle) Matrizen, die in bekannter Weise auf ein beliebiges Element $\mathbf{a} = \sum_k \hat{e}_k c_k^{(a)}$ wirken,

$$\mathbf{A}\mathbf{a} = \sum_k (\mathbf{A}\hat{e}_k) c_k^{(a)} = \sum_{ik} A_{ik} \hat{e}_i c_k^{(a)} \quad \text{mit} \quad A_{ik} = \hat{e}_i \cdot (\mathbf{A}\hat{e}_k).$$

Beachtet man, daß $\mathbf{R}^T = \mathbf{R}^{-1}$ ist, so gilt in der neuen Basis

$$\tilde{A}_{ik} = \hat{f}_i \cdot (\mathbf{A}\hat{f}_k) = \sum_{pq} R_{ip} R_{kq} A_{pq} = (\mathbf{R}\mathbf{A}\mathbf{R}^{-1})_{ik},$$

d. h. der Operator transformiert nach der Regel

$$\mathbf{A} \mapsto \tilde{\mathbf{A}} = \mathbf{R}\mathbf{A}\mathbf{R}^{-1},$$

die man sich anschaulich leicht merken kann: von rechts nach links gelesen „dreht“ \mathbf{R}^{-1} zunächst in die alte Basis „zurück“, dort wirkt der Operator wie zuvor, schließlich wird das Ergebnis wieder in die neue Basis „gedreht“.

Ein analoges Verhalten hat man bei Vektorräumen über \mathbb{C} mit dem Unterschied, daß die orthogonale Transformation \mathbf{R} durch eine unitäre \mathbf{U} ersetzt werden muß, d. h. $\mathbf{U}\mathbf{U}^\dagger = \mathbb{1} = \mathbf{U}^\dagger\mathbf{U}$, wobei \mathbf{U}^\dagger die transponierte und konjugiert komplexe Matrix ist. Observable sind jetzt nicht mehr reelle, sondern komplexe, hermitesche Matrizen, vgl. Abschn. 1.8.1.

Wir beginnen mit einem Beispiel: Es seien Q^k , $k = 1, 2, 3$, die drei Operatoren des Ortes in kartesischer Basis. Da sie miteinander vertauschen, gilt für jede Lösung $\psi(\mathbf{x})$ der Schrödinger-Gleichung im Ortsraum

$$Q^k \psi(\mathbf{x}) = x^k \psi(\mathbf{x});$$

man sagt auch, daß Q^k multiplikativ wirkt. Entwickelt man diese Funktionen nach den Eigenfunktionen (3.3) des Impulsoperators, so folgt

$$\begin{aligned} Q^k \int d^3 p \varphi(\mathbf{p}, \mathbf{x}) \tilde{\psi}(\mathbf{p}) &= \int d^3 p \varphi(\mathbf{p}, \mathbf{x}) x^k \tilde{\psi}(\mathbf{p}) \\ &= -\frac{\hbar}{i} \int d^3 p \varphi(\mathbf{p}, \mathbf{x}) \frac{\partial}{\partial p_k} \tilde{\psi}(\mathbf{p}). \end{aligned}$$

Dabei haben wir die Relation

$$\exp\left(\frac{i}{\hbar} \mathbf{p} \cdot \mathbf{x}\right) x^k = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial p_k} \exp\left(\frac{i}{\hbar} \mathbf{p} \cdot \mathbf{x}\right)$$

benutzt und haben einmal partiell nach p_k integriert. Diese Gleichung gilt für alle \mathbf{x} . Wenden wir die inverse Fouriertransformation darauf an, dann folgt

$$Q^k \tilde{\psi}(\mathbf{p}) = -\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial p_k} \tilde{\psi}(\mathbf{p}). \quad (3.6)$$

Im Impulsraum werden die Operatoren Q^k durch die ersten Ableitungen nach p_k dargestellt, ganz ähnlich wie die Impulskomponente P_k im Ortsraum durch die erste Ableitung nach x^k dargestellt wird, vgl. (1.58) und Abschn. 1.8.4. Man beachte aber die unterschiedlichen Vorzeichen in (1.58) und in (3.6).

Sei A eine Observable mit einem rein diskreten, nichtentarteten Spektrum, deren Eigenfunktionen im Ortsraum mit $\varphi_n(\mathbf{x})$ bezeichnet seien. Der Zustand ψ läßt sich nach diesen Eigenfunktionen entwickeln, und es ist

$$Q^k \psi(\mathbf{x}) = Q^k \sum_n \varphi_n(\mathbf{x}) c_n = \sum_n x^k \varphi_n(\mathbf{x}) c_n .$$

Andererseits ist das Produkt $x^k \varphi_n(\mathbf{x})$ wieder eine quadratintegrale Funktion, die nach dem Basissystem φ_n entwickelt werden kann. Wenn die Entwicklungskoeffizienten mit $X_{mn}^{(k)}$ bezeichnet werden, dann ist

$$x^k \varphi_n(\mathbf{x}) = \sum_m \varphi_m(\mathbf{x}) X_{mn}^{(k)} \quad \text{mit} \quad X_{mn}^{(k)} = \int d^3x \varphi_m^*(\mathbf{x}) x^k \varphi_n(\mathbf{x}) .$$

Dieses Ergebnis bedeutet folgendes: Der Zustand $\psi(\mathbf{x})$ ist in der A -Darstellung ein (im allgemeinen unendlichdimensionaler) Vektor $\mathbf{c} = (c_1, c_2, \dots)^T$, der Ortsoperator Q^k wird durch die Matrix $\mathbf{X}^{(k)} = \{X_{mn}^{(k)}\}$ dargestellt, und es gilt

$$Q^k \mathbf{c} = \mathbf{X}^{(j)} \mathbf{c} \quad \text{bzw.} \quad Q^k (c_n)^T = \left(\sum_n X_{mn}^{(k)} c_n \right)^T . \quad (3.7)$$

Als Ergebnis halten wir fest, daß der Operator Q^k , der die k -te kartesische Komponente des Ortsoperators beschreibt, ganz unterschiedlich dargestellt werden kann:

- Im Ortsraum durch die Funktion x^k , die multiplikativ wirkt.
- Im Impulsraum durch den Differentialoperator

$$-\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial p_k} .$$

- Im Raum der Eigenfunktionen der Observablen A durch die unendlichdimensionale Matrix

$$X_{mn}^{(k)} = \int d^3x \varphi_m^*(\mathbf{x}) x^k \varphi_n(\mathbf{x}) .$$

Wir können das Beispiel fortsetzen, indem wir uns die j -te kartesische Komponente P_j des Impulsoperators anschauen: Im Ortsraum wird sie durch $(\hbar/i)(\partial/\partial x^j)$, im Impulsraum durch die Funktion p_j , im Raum der Eigenfunktionen von A schließlich durch die Matrix

$$P_{mn}^{(j)} = \int d^3x \varphi_m^*(\mathbf{x}) \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x^j} \varphi_n(\mathbf{x})$$

dargestellt.

Offensichtlich stehen die Symbole Q^k und P_j für *alle* Darstellungen, stellen also in Wirklichkeit die Abstraktion dieser physikalischen Observablen dar. So lauten die Heisenbergschen Vertauschungsrelationen in abstrakter Form

$$\boxed{[P_j, Q^k] = \frac{\hbar}{i} \delta_{jk} \mathbb{1}, \quad [Q^j, Q^k] = 0, \quad [P_j, P_k] = 0}, \quad (3.8)$$

wobei $\mathbb{1}$ die Zahl 1 oder die unendlichdimensionale Einheitsmatrix ist. Wiederum gilt

- im Ortsraum: $[P_j, Q^k] = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x^j} x^k - x^k \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x^j} = \frac{\hbar}{i} \delta_{jk}$;
- im Impulsraum: $[P_j, Q^k] = p_j \left(-\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial p_k} \right) - \left(-\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial p_k} \right) p_j = \frac{\hbar}{i} \delta_{jk}$;
- im „A-Raum“: $\sum_l [P_{ml}^{(j)} X_{ln}^{(k)} - X_{ml}^{(k)} P_{ln}^{(j)}] = \frac{\hbar}{i} \delta_{jk} \delta_{mn}$.

Es ist nicht schwierig, irgendeine dieser drei Darstellungen in eine der beiden anderen umzurechnen. Zum Beispiel benutzt man bei der Transformation von der Ortsraum- zur A-Darstellung Formeln der Art

$$\begin{aligned} \int d^3x \varphi_m^*(\mathbf{x}) \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x^j} x^k \varphi_n(\mathbf{x}) &= \int d^3x \varphi_m^*(\mathbf{x}) \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x^j} \sum_l \varphi_l(\mathbf{x}) X_{ln}^{(k)} \\ &= \sum_l P_{ml}^{(j)} X_{ln}^{(k)}. \end{aligned}$$

Die Relationen (3.8) beziehen sich im Orts- sowie im Impulsraum auf die Vertauschung einer Funktion mit einem Differentialoperator, im Raum der Eigenfunktionen von A auf die Vertauschung zweier Matrizen. Diese im Grunde einfache Feststellung erhellt einen wichtigen historischen Schritt in der Entwicklung der Quantenmechanik. Während Erwin Schrödinger die Quantenmechanik nichtrelativistischer atomarer Systeme mit Hilfe der nach ihm benannten Differentialgleichung behandelte, entwickelte Werner Heisenberg zusammen mit seinem Lehrer Max Born und mit Pascual Jordan dieselbe Theorie in Gestalt der sogenannten *Matrizenmechanik*. Die beiden Ansätze waren nichts anderes als zwei verschiedene Darstellungen ein und derselben Theorie, nämlich einmal das, was wir jetzt Ortsraumdarstellung nennen, das andere Mal das, was wir als „A-Darstellung“ bezeichnen. Schrödinger selbst hat die Äquivalenz seines Zugangs mit dem Heisenbergschen kurz nach der Entstehung der Quantenmechanik bewiesen.

3.2 Der Begriff des Hilbert-Raums

Nachdem wir in Kap. 1 wichtige Beispiele für selbstadjungierte Hamiltonoperatoren studiert haben, dort auch den Begriff der Orthogonalität in Funktionenräumen und der Vollständigkeit von Basissystemen eingeführt und im vorhergehenden Abschnitt formal unterschiedliche, physikalisch aber äquivalente Darstellungen von Operatoren kennengelernt haben, wollen wir die

Räume, in denen die physikalischen Wellenfunktionen leben, etwas genauer kennenlernen. Der zentrale Begriff ist hier der Hilbert-Raum, der in vielerlei Hinsicht unserer gewohnten Vorstellung von endlichdimensionalen Vektorräumen entspricht, in einigen Aspekten – aufgrund seiner unendlichen Dimension – aber deutlich anders ist. Natürlich würde eine gründliche, mathematisch befriedigende Darstellung nicht nur den Rahmen des Buches sprengen, sondern uns auch vorübergehend weit von den physikalischen Aspekten der Quantentheorie wegführen, die wir lernen und verstehen wollen. Deshalb muß ich mich auf eine verkürzte, in einigen Aspekten mehr qualitative Diskussion beschränken und verweise für ein tieferes Studium auf die Literatur der Mathematik (s. allgemeine Literatur) oder der Mathematischen Physik.²

Es werden hier zunächst einige Bemerkungen vorangestellt, die klarstellen, was wir für die Formulierung der Quantenmechanik brauchen bzw. zur Verfügung stellen wollen. Gleichzeitig motivieren sie die dann folgenden Definitionen.

Bemerkungen

1. An den Schrödingerschen Wellenfunktionen fällt auf, daß sie einerseits über der physikalischen Zeitachse \mathbb{R}_t und über dem gewöhnlichen, physikalischen Raum \mathbb{R}_x^3 definiert sind, andererseits aber in Funktionenräumen \mathcal{H} liegen und dort gewisse Eigenschaften besitzen – wie z. B. quadratintegrabel zu sein. Etwas gelehrter ausgedrückt, ist $\psi_\alpha(t, \mathbf{x})$ über $\mathbb{R}_t \times \mathbb{R}_x^3$ definiert, nimmt aber seine Werte in \mathcal{H} an. Das wirft die Frage auf, wie die Wellenfunktion ψ_α reagiert, wenn wir im physikalischen Raum z. B. Galilei-Transformationen durchführen, also Translationen, Drehungen oder Spezielle Galilei-Transformationen, unter denen die Dynamik (in Gestalt des Hamiltonoperators) invariant ist. Diese Frage, die zu interessanten begrifflichen und praktischen Aussagen führt, wird uns noch ausführlich beschäftigen.

Allerdings wird es bei Systemen, die kein klassisches Analogon haben, auch Wellenfunktionen geben, die nicht oder nur mittelbar auf die Raumzeit Bezug nehmen. Diese Situation wird uns bei der Beschreibung des Spins, d. h. des Eigendrehimpulses von Teilchen begegnen.

2. Ein zentrales Prinzip der Quantentheorie ist das *Superpositionsprinzip*, das besagt, daß mit zwei verschiedenen Lösungen ψ_α und ψ_β der Schrödinger-Gleichung auch jede Linearkombination $\lambda\psi_\alpha + \mu\psi_\beta$, mit $\lambda, \mu \in \mathbb{C}$ zwei komplexen Zahlen, Lösung ist. Der Raum oder die Räume, in denen die Wellenfunktionen definiert sind, müssen daher *lineare* Räume sein, d. h. sie müssen Vektorräume über \mathbb{C} sein.
3. Denken wir an die Bornsche Interpretation, Abschn. 1.4, oder deren Verallgemeinerungen, so ist klar, daß die Räume \mathcal{H} eine *metrische Struktur* tragen müssen, es muß möglich sein, die Norm oder Länge eines Zustands ψ zu definieren und zu messen. Gleichzeitig muß damit auch eine echte *geometrische Struktur* verbunden sein, denn wenn wir beispielsweise danach fragen, mit welcher Wahrscheinlichkeit der Eigenwert a_n der Observablen A im normierten Zustand ψ gemessen wird, dann ist das

²Eine auch für Physiker gut lesbare Darstellung findet man z. B. in [Blanchard und Brünig (1993)].

gleichbedeutend mit der Frage, welchen Wert das Skalarprodukt (φ_n, ψ) der zu a_n gehörenden Eigenfunktion von A mit dem Zustand ψ hat. Anders gesagt, wird hier nach der Projektion von ψ auf φ_n , d. h. nach dem Winkel gefragt, den die beiden Funktionen einschließen.

4. Beides, die metrische und die geometrische Struktur, erhält man durch die richtige Definition des Skalarprodukts von Wellenfunktionen (allgemeiner: Zustandsvektoren). Zugleich wird damit auch der allgemeine, formale Rahmen geschaffen, in dem *Erwartungswerte* von Observablen definiert sind, die ja als die physikalischen Meßgrößen in die Interpretation der Theorie eingehen.

3.2.1 Definition von Hilbert-Räumen

Mit den vorangegangenen Bemerkungen sind wir für die folgende Definition motiviert und vorbereitet:

Definition 3.1

- (I) Ein Hilbert-Raum \mathcal{H} ist ein linearer Vektorraum über den komplexen Zahlen \mathbb{C} .

Die Addition von Elementen $f \in \mathcal{H}$ und $g \in \mathcal{H}$ existiert, $f + g \in \mathcal{H}$, und hat die üblichen Eigenschaften, d. h. sie ist assoziativ, es gibt ein Nullelement, für das $f + 0 = f$ für alle $f \in \mathcal{H}$ gilt, und zu jedem f gibt es $(-f)$ mit $f + (-f) = 0$. Die Multiplikation mit den komplexen Zahlen ist wohldefiniert, sie ist assoziativ und distributiv.

- (II) Über \mathcal{H} ist ein Skalarprodukt definiert

$$(\cdot, \cdot) : \mathcal{H} \times \mathcal{H} \longrightarrow \mathbb{C} : f, g \longmapsto (f, g),$$

das folgende Eigenschaften besitzt:

Das Skalarprodukt (f, g) zweier Elemente $f, g \in \mathcal{H}$ ist \mathbb{C} -linear im zweiten Argument,

$$(f, g_1 + g_2) = (f, g_1) + (f, g_2) \quad \text{und} \quad (f, \lambda g) = \lambda (f, g), \quad \lambda \in \mathbb{C}. \quad (3.9)$$

Das Skalarprodukt (f, f) eines Elements mit sich selbst ist positiv definit und ist genau dann gleich Null, wenn f das Nullelement ist,

$$(f, f) \geq 0 \quad \forall f, \quad (f, f) = 0 \iff f = 0. \quad (3.10)$$

Vertauscht man seine Argumente, so nimmt es seinen konjugiert komplexen Wert an,

$$(g, f) = (f, g)^*. \quad (3.11)$$

- (III) Der Raum \mathcal{H} ist vollständig, d. h. jede Cauchy-Folge f_1, f_2, \dots konvergiert gegen ein Grenzelement f , das in \mathcal{H} liegt,

$$f_n \longrightarrow f, \quad \text{wenn} \quad \lim_{n \rightarrow \infty} \|f_n - f\| = 0. \quad (3.12)$$

- (VI) Der Raum \mathcal{H} hat abzählbar-unendliche Dimension.