7. Mathematische Bemerkung

7.1 Motiv

Gegenüber der klassischen Mechanik bedarf die Quantenmechanik einiger neuer mathematischer Werkzeuge, die hier skizziert werden.

Das von einem strikten Lokalisierungsprinzip geleitete Teilchenbild wird im 3-dimensionalen **Ortsraum** $\mathbb{R}^3$ durch drei reelle Koordinaten $(x_1, x_2, x_3) \in \mathbb{R}^3$ entworfen. In der klassischen Mechanik wird die Bewegung eines Massenpunktes durch die Ortskoordinaten und durch die Impulsdaten $(p_1, p_2, p_3) \in \mathbb{R}^3$ vollständig beschrieben. (Zur Erinnerung: $p = m \cdot v$.) Die drei Impulskomponenten sind, wie die drei Ortskoordinaten, reelle Zahlen. Die Impulsdaten bilden den **Impulsraum**. Ortsraum und Impulsraum sind mathematisch isomorph. Sie werden zum sogenannten **Phasenraum** (eines einzelnen Massenpunktes)

$$\mathbb{R}^3 \times \mathbb{R}^3 \cong \mathbb{R}^6, \qquad (x_1, x_2, x_3, p_1, p_2, p_3) \in \mathbb{R}^6$$

zusammengefasst.

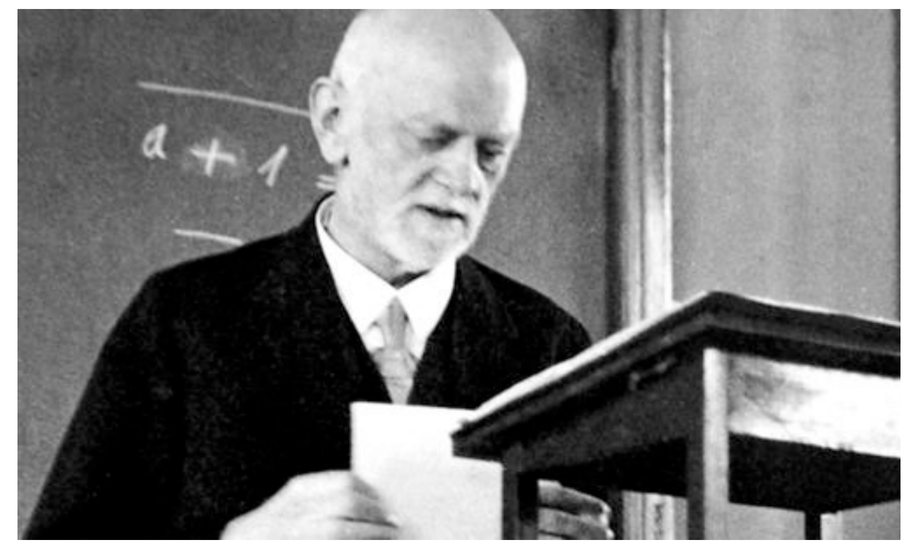
In der klassischen Mechanik bestimmen die vollständigen Phasenraumdaten den physikalischen Zustand des Systems.

In der Quantenmechanik wird die gleichzeitige Kenntnis von Ort und Impuls ausgeschlossen. Das folgt aus der Heisenbergschen Vertauschungsrelation und explizit aus der Heisenbergschen Unschärferelation; die Unschärferelation folgt aus der Vertauschungsrelation (siehe nächstes Kapitel „Grundstruktur der Quantentheorie"). Damit ist der Phasenraum $\mathbb{R}^6$ der klassischen Mechanik als Raum der physikalischen Zustände der Quantenmechanik ausgeschlossen.

Obwohl der Ortsraum und der Impulsraum mathematisch isomorph sind, ist der Zahlenraum $\mathbb{R}^3$ den Anforderungen einer Struktur eines quantenmechanischen Zustandsraums nicht gewachsen. Zu diesen Anforderungen gehört, die Korrespondenz zwischen Teilchen und Welle zu implementieren. Auf der Ebene der Zahlentripel im $\mathbb{R}^3$ ist das nicht zu leisten. Eine hinreichend reichhaltige Struktur gibt es auf der Ebene der Funktionenräume. Auf dieser Ebene lässt sich die Vertauschungsrelation formulieren. Als maßgeschneidertes mathematisches Objekt zur Repräsentation des quantenmechanischen Zustandsraums stellt sich der Raum der bezüglich des sogenannten „Lebesgue-Maßes" quadratintegrierbaren Funktionen über dem Raum $\mathbb{R}^3$ heraus. Dieser Raum $L^2(\mathbb{R}^3)$ erfüllt die mathematischen Kriterien eines sogenannten „Hilbertraums".

Die Interpretation der Quantenmechanik ist seit ihrem Beginn bis heute umstritten. Doch der mathematische Rahmen der Quantenmechanik ist unbestritten. Für die Diskussion des Verständnisses der Quantenmechanik ist damit der Hilbertraum eine zuverlässige Referenz. Der Hilbertraum $L^2(\mathbb{R}^3)$ kommt im häufig verwendeten Begriff der ψ-Funktion vor. Die Diskussion der Interpretation der Quantenmechanik wird zu einem wesentlichen Teil auf die Diskussion der Bedeutung der ψ-Funktion abgewälzt.

7.2 Eine historische Notiz



goettinger-tageblatt.de

David Hilbert (* Königsberg, 1862, † Göttingen, 1943)

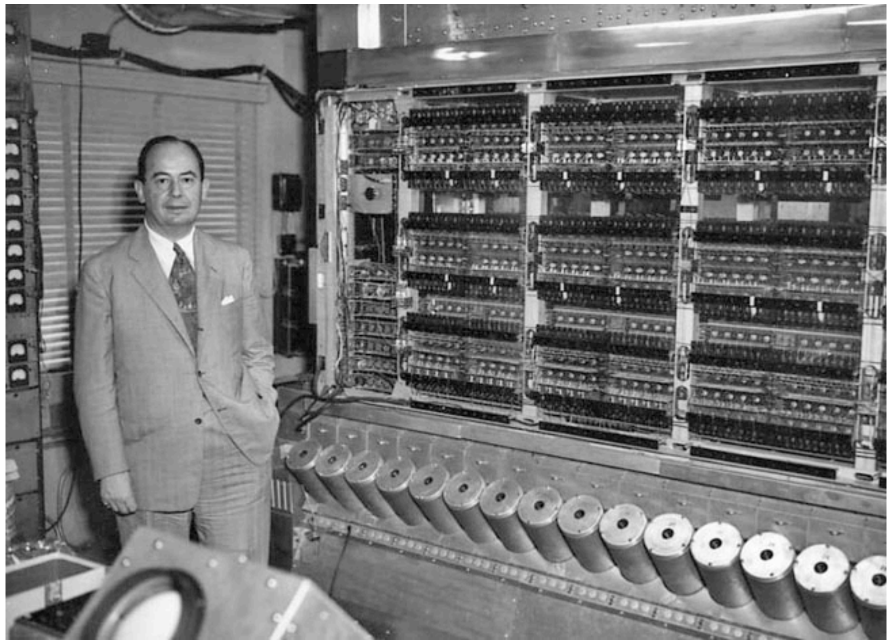
Theorie der algebraischen Zahlkörper,
Axiomatisierung der Mathematik,
Integralgleichungen, **„Hilbert-Raum“** (1909),
Lösung der Boltzmann-Gleichung,
Variationsprinzip für die Einsteinschen Gleichungen.

Beim internationalen Mathematiker-Kongreß 1900 in Paris präsentierte er 23 mathematische Probleme des 20. Jahrhunderts. Die Hälfte ist bis heute nicht gelöst.

en.wikipedia.org

Hermann Weyl (* Elmshorn, 1885, † Zürich, 1955)
ETH Zürich (1913); Göttingen (1930), Nachfolger Hilberts;
Institute for Advanced Study, Princeton (1933-1951).

Integralgleichungen, Eigenwertprobleme und Spektraldarstellungen,
Theorie der algebraischen und analytischen Funktionen,
Theorie und Darstellung kontinuierlicher Gruppen, Zahlentheorie,
mathematische Logik.
„Raum, Zeit und Materie“ (1918),
„Gruppentheorie und Quantenmechanik“ (1928).



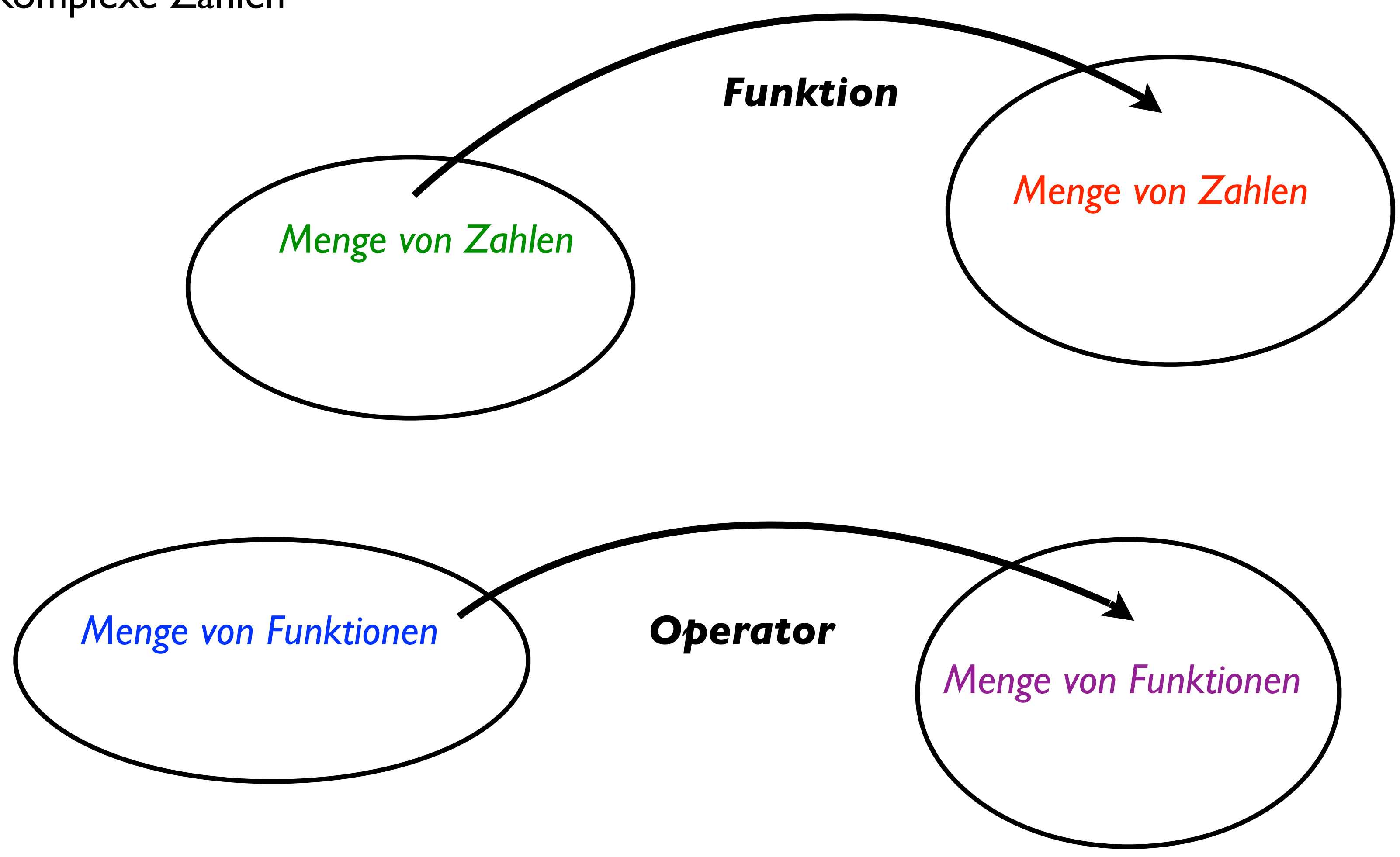
theregister.co.uk

John von Neumann (* Budapest, 1903, † Washington, 1957)
Göttingen (1926/1927), Zusammenarbeit mit Hilbert;
Berlin (1928-1933), Institute for Advanced Study, Princeton (1933),
Los Alamos (1943), Mitarbeit im Manhattan-Projekt zum Bau
einer Atombombe.

1927 Quantenmechanische Entropie, Operator-Algebren, Spieltheorie, Quantenlogik, Gruppentheorie, Automatentheorie. Von-Neumann-Architektur eines Computers (Programmbefehle und Daten im gleichen Speicher). „Mathematische Grundlagen der Quantenmechanik" (1932).

7.3 Mathematische Grundbegriffe

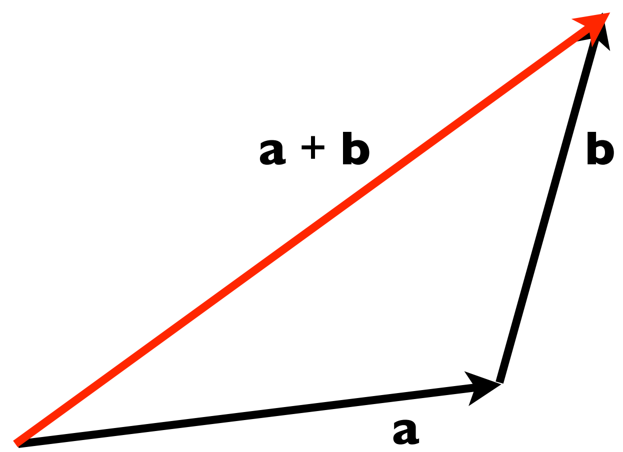
natürliche Zahlen: 1, 2, 3, 4, ...
ganze Zahlen, rationale Zahlen,
reelle Zahlen, komplexe Zahlen



Vektoren haben, im Rahmen der analytischen Geometrie, Richtung und Länge.
In Bezug zu einem festgelegten Koordinatensystem lassen sich Vektoren durch Zahlentupel mit den Koordinatenwerten charakterisieren.

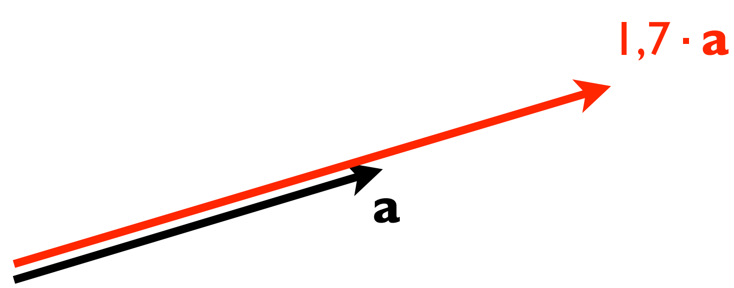
Vektor-Addition:

$$(a_1, a_2, a_3) + (b_1, b_2, b_3) = (a_1+b_1, a_2+b_2, a_3+b_3)$$



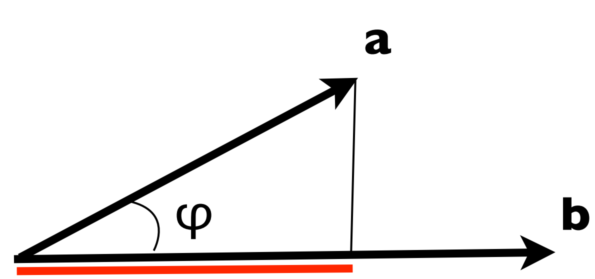
skalare Multiplikation mit Vektoren

$$\lambda \cdot (a_1, a_2, a_3) = (\lambda \cdot a_1,\ \lambda \cdot a_2,\ \lambda \cdot a_3)$$



Skalarprodukt zweier Vektoren

$$a \cdot b = |a|\,|b| \cos \varphi$$



$$|a| = (a_1{}^2 + a_2{}^2 + a_3{}^2)^{1/2}$$

$|a|$ gibt die Länge eines Vektors an.

Definition einer „**Gruppe**“:

Auf einer beliebigen Menge M sei eine Verknüpfung „+“ definiert,
d. h. eine Abbildung: $\varphi_+ : M \times M \to M$ mit $x + y := \varphi_+(x, y)$ für $x, y \in M$,
so dass gilt:

(I.a)	$(x + y) + z = x + (y + z)$ für alle $x, y \in M$	Assoziativgesetz
(I.b)	Es existiert ein Element $0 \in M$ mit $x + 0 = x$ für alle M	Existenz des neutralen Elements
(I.c)	Zu jedem $x \in M$ existiert ein $y \in M$ mit $x + y = 0$	Existenz des Inversen
(I.d)	$x + y = y + x$ für alle $x, y \in M$.	Kommutativgesetz

Kriterien (I.a), (I.b), (I.c), (I.d) definieren eine **kommutative** (additiv geschriebene) **Gruppe**

Definition einer multiplikativ geschriebenen **kommutativen Gruppe**:

Auf einer beliebigen Menge M sei eine Verknüpfung „$*$“ definiert,
d. h. eine Abbildung: $\varphi_* : M \times M \to M$ mit $x * y := \varphi_*(x, y)$ für $x, y \in M$,
so dass gilt:

(II.a)	$(x * y) * z = x * (y * z)$ für alle $x, y \in M$	Assoziativgesetz
(II.b)	Es existiert ein Element $1 \in M$ mit $x * 1 = x$ für alle M	Existenz des neutralen Elements
(II.c)	Zu jedem $x \in M$ existiert ein $y \in M$ mit $x * y = 1$	Existenz des Inversen
(II.d)	$x * y = y * x$ für alle $x, y \in M$.	Kommutativgesetz

Kriterien (II.a), (II.b), (II.c) definieren eine **nicht-kommutative Gruppe**.
Kriterium (II.a) definiert eine **Halbgruppe**.

Verträglichkeit der Addition und Multiplikation in derselben Struktur: **Distributivgesetze**

Auf M sei eine Verknüpfung „+" und eine Verknüpfung „$*$" definiert, so dass gilt:

(III.a) $(x + y) * z = x * z + y * z$ für alle $x, y, z \in M$

(III.b) $z * (x + y) = z * x + z * y$ für alle $x, y, z \in M$

Definition eines (Zahlen-) „**Körpers**":

Eine Menge M mit der Struktur einer additiv geschriebenen kommutativen Gruppe,
und einer multiplikativ geschriebenen kommutativen Gruppe auf den von 0 verschiedenen Elementen von M,
auf der das Distributivgesetz (III.a) (und damit (III.b)) gilt, heißt ein Körper.

Beispiele von Zahlen-Körpern: rationale Zahlen, reelle Zahlen, komplexe Zahlen.

Definition eines Vektorraums

Sei $\mathbb{K}$ ein Körper. Unter einem $\mathbb{K}$-**Vektorraum** versteht man ein Tripel $(V, +, \cdot)$,
gegeben durch eine kommutative Gruppe $(V, +)$ und eine skalare Multiplikation genannte Verknüpfung

$$\cdot : \quad \mathbb{K} \times V \to V, \quad \text{notiert als}$$

$$(\lambda, v) \to \lambda \cdot v,$$

so dass die folgenden Axiome erfüllt sind:

(V.I) $\quad 1 \cdot v = v$

(V.2) $\quad \lambda \cdot (\mu \cdot v) = (\lambda\, \mu) \cdot v$

(V.3) $\quad \lambda \cdot (u + v) = \lambda \cdot u + \lambda \cdot v$

(V.4) $\quad (\lambda+\mu) \cdot v = \lambda \cdot v + \mu \cdot v$

(Oft wird das Zeichen „ · “ für die Multiplikation mit einem Skalar weggelassen, wenn es sich aus dem Kontext ergibt.)

Beispiele eines Vektorraums:

$\mathbb{R}^N := \{ (a_1, ..., a_N) \mid a_i \in \mathbb{R}, \ i = 1, \dots, N\}$

$\mathcal{F} := \{ f \mid f : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R} \}$ Funktionen-Raum

Auch der Raum der komplexen Funktionen ist ein Vektorraum über den Körper der komplexen Zahlen.

Definition **Skalarprodukt** (oder **inneres Produkt**)

Sei V ein $\mathbb{K}$-Vektorraum. Eine Abbildung

$\langle \, . \, , \, . \, \rangle \; : \; V \times V \; \to \; \mathbb{K}$ heißt Skalarprodukt (oder inneres Produkt), falls

(IP.1) $\quad \langle x_1 + x_2 , y \rangle \; = \; \langle x_1 , y \rangle + \langle x_2 , y \rangle$

(IP.2) $\quad \langle \lambda x , y \rangle \; = \; \lambda \, \langle x , y \rangle$

(IP.3) $\quad \langle x , y \rangle \; = \; \overline{\langle y , x \rangle}$

(IP.4) $\quad \langle x , x \rangle \; \geq \; 0$

(IP.5) $\quad \langle x , x \rangle \; = \; 0 \; \Leftrightarrow \; x = 0$

für alle $x, x_1, x_2, y \in V$ und für alle $\lambda \in \mathbb{K}$.

Der Überstrich in (IP.3) bedeutet für komplexe Zahlen $z = x + i\,y$ das konjugiert Komplexe: $\overline{z} \; = \; x - i\,y$, wobei x, y reelle Zahlen sind.

Mit Hilfe des Skalarprodukts lässt sich eine Norm („Länge“ des Vektor-Elements)

$$|| x || = \sqrt{\langle x , x \rangle}$$

und eine Metrik definieren, mit der Abstände zwischen den Elementen von V bestimmt werden können:

$$d(x, y) = \sqrt{\langle x - y , x - y \rangle}$$

Mit der Norm ist der Vektorraum V mit den Kriterien (IP.1) bis (IP.5) ein **Prähilbertraum**.

Definition Hilbertraum:

Der mittels der Metrik vervollständigte Prähilbertraum heißt **Hilbertraum**.

(Vervollständigt heißt, dass bezüglich der Metrik die Limites konvergenter Folgen von Elementen des Prähilbertraums V ebenfalls zu V gehören.)

Cauchy-Schwarzsche Ungleichung

Ist V ein IK-Vektorraum mit Skalarprodukt $\langle\, .\, ,\, .\, \rangle$, dann gilt

(35) $\quad | \langle x , y \rangle |^2 \leq \langle x , x \rangle \cdot \langle y , y \rangle \quad$ für alle $x, y \in V$

Gleichheit gilt genau dann, wenn x und y linear unabhängig sind.

N Vektoren $x_1, \ldots , x_N$ heißen linear unabhängig, wenn aus
$\lambda_1 x_1 + \ldots + \lambda_N x_N = 0$ folgt, dass die Skalare (Zahlen) $\lambda_1 = 0, \ldots , \lambda_N = 0$.

Beweis: Sei $\lambda \in \mathbb{K}$ beliebig. Dann gilt:

$$0 \leq \langle x + \lambda y , x + \lambda y \rangle \qquad \textit{Positivität des Skalarprodukts (IP.4)}$$

$$= \langle x , x + \lambda y \rangle + \langle \lambda y , x + \lambda y \rangle \qquad \text{wegen (IP.1)}$$

$$= \overline{\langle x + \lambda y , x \rangle} + \overline{\langle x + \lambda y , \lambda y \rangle} \qquad \text{wegen (IP.3)}$$

$$= \overline{\langle x , x \rangle} + \overline{\langle \lambda y , x \rangle} + \overline{\langle x , \lambda y \rangle} + \overline{\langle \lambda y , \lambda y \rangle} \qquad \text{wegen (IP.1)}$$

$$= \langle x , x \rangle + \langle x , \lambda y \rangle + \langle \lambda y , x \rangle + \langle \lambda y , \lambda y \rangle \qquad \text{wegen (IP.3)}$$

$$= \langle x , x \rangle + \overline{\lambda} \langle x , y \rangle + \lambda \overline{\langle x , y \rangle} + \overline{\lambda} \lambda \langle y , y \rangle \qquad \text{wegen (IP.2) und (IP.3)}$$

Setze $\lambda = -\dfrac{< x, y >}{< y, y >}$, falls $y \neq 0$. Für $y = 0$ ist die Cauchy-Schwarzsche Ungleichung trivial.

Das gewählte λ eingesetzt:

$$0 \;\leq\; \langle\, x - \frac{< x, y >}{< y, y >}\, y \,,\; x - \frac{< x, y >}{< y, y >}\, y \,\rangle$$

$$= \;\langle\, x \,, x \,\rangle \;-\; \frac{\overline{< x, y >}}{< y, y >} \langle\, x \,, y \,\rangle \;-\; \frac{< x, y >}{< y, y >} \overline{\langle\, x \,, y \,\rangle} \;+\; \frac{|< x, y >|^2}{< y, y >^2} \langle\, y \,, y \,\rangle$$

$$= \;\langle\, x \,, x \,\rangle \;-\; \frac{|< x, y >|^2}{< y, y >}$$

Umformung:

$\dfrac{|< x, y >|^2}{< y, y >} \;\leq\; \langle\, x \,, x \,\rangle$. Daraus folgt Gleichung (35). q.e.d.

(Hinweis zur weitergehenden Orientierung: [38|, S. 173 ff.)

[38] Dirk Werner: „Funktionalanalysis“. Springer, Berlin, 2002, S. 173 ff.

Zwischenbilanz

Das Sowohl Welle als auch Teilchen, das wir beim Lichtquant (Photon) kennengelernt haben, erfordert neue mathematische Werkzeuge. Der mathematische Rahmen, der für die klassische Physik, für die Newtonsche Mechanik wie auch für die klassische Elektrodynamik entwickelt worden war, passt für die Quantentheorie nicht mehr. In der Krisenphase der Physik, 1900 - 1925, konstruierte David Hilbert um 1909 den „Hilbert-Raum“, der sich als zentraler mathematischer Schlüssel zur Beschreibung des quantenmechanischen Zustandsraums herausstellen sollte.

Elemente des Hilbertraums lassen sich addieren (sie bilden eine additive kommutative Gruppe).
Diese grundlegende Eigenschaft wird von quantenmechanischen Zustandsfunktionen verlangt.
Damit wird sich das sogenannte „Superpositionsprinzip“ formulieren, nach dem physikalische Zustände „überlagert“ werden können. Es gehört zur Grundlage der Quantenmechanik, was im folgenden Kapitel vorgestellt wird. Die Verbindung von Vektorraum-Struktur mit Skalarprodukt vereinigt im Hilbertraum die Leistungsfähigkeit der analytischen Geometrie (sie kann sagen, wann Vektoren zueinander orthogonal sind) mit der Reichhaltigkeit eines Funktionenraums. So macht Letzteres es möglich, eine Wahrscheinlichkeitsinterpretation der Quantenmechanik einzuführen. Dies werden wir im übernächsten Kapitel „Zur Interpretation der Quantentheorie“ behandeln.

Darüberhinaus werden wir sehen, dass die Operatoren der Quantenmechanik, beispielsweise der Impulsoperator und der Ortsoperator, auf einem Hilbertraum definiert werden.
Während für die Operatoren zusätzlich zur Addition eine Multiplikation definiert wird,
gibt es für die Elemente eines Hilbertraums keine Multiplikation, so dass das Produkt zweier Elemente wieder ein Element des Hilbertraums wäre. Das ist zu unterscheiden vom Skalarprodukt zweier Hilbertraum-Vektoren, das eine Zahl ist. Und auch von der Multiplikation eines Skalars mit einem Hilbertraumvektor.

Auf der Ebene der Operatoren führt die nicht-kommutative Multiplikation ein „Nacheinander“ ein.
Auf der Ebene des Hilbertraums gibt es nur ein „Nebeneinander“.