Gerhard Gerlich

Eine neue Einführung in die statistischen und mathematischen Methoden der Quantentheorie

Vieweg · Braunschweig

Dr. *Gerhard Gerlich* ist Privatdozent am Lehrstuhl B für
Theoretische Physik der Technischen Universität Braunschweig

Verlagsredaktion: *Alfred Schubert*

CIP-Kurztitelaufnahme der Deutschen Bibliothek

Gerlich, Gerhard
Eine neue Einführung in die statistischen und
mathematischen Methoden der Quantentheorie.
– 1. Aufl. – Braunschweig: Vieweg, 1977.
(Reihe Wissenschaft)
ISBN-13: 978-3-528-06828-8 e-ISBN-13: 978-3-322-85338-7
DOI: 10.1007/978-3-322-85338-7

1977

Satz: Vieweg, Braunschweig

ISBN-13: 978-3-528-06828-8

Vorbemerkungen

Es handelt sich hier um eine Einführung in die mathematischen Grundlagen der Quantentheorie, Quantenstatistik und – in gewisser Hinsicht sogar – der gesamten statistischen Physik. Meist wird die Mathematik der Quantentheorie als geometrische Hilbertraumtheorie gebracht, bei der gewisse Formeln wahrscheinlichkeitstheoretisch bzw. statistisch interpretiert werden. Bei dieser Darstellung wird umgekehrt vorgegangen. Es kann gezeigt werden, daß sich die mathematischen Grundlagen der Quantentheorie aus einer einfachen, natürlich erscheinenden Weiterführung der Maß- und Wahrscheinlichkeitstheorie ergeben, zu der man gelangt, wenn man sich überlegt, wie Aussagen über physikalische Beziehungen formuliert werden können. Hierbei zeigt es sich, daß die Begriffssysteme der Mengenlehre und Maßtheorie zur Beschreibung physikalischer Zusammenhänge besonders geeignet sind. So lassen sich z. B. viele physikalische Gesetzmäßigkeiten durch Aussagen über Mengenrelationen ausdrücken, deren Elemente Mengenpaare sind. Ohne wesentliche Erweiterung erhält man bei dieser Betrachtungsweise mit Begriffen der Maßtheorie eine mathematische Struktur, die hier mit dem Begriff „Paare von Maßmannigfaltigkeiten" gekennzeichnet wird. In Wirklichkeit werden solche Maßmannigfaltigkeiten eigentlich schon in der klassischen Physik, insbesondere der Elektrodynamik, Relativitätstheorie und klassischen statistischen Mechanik verwendet. Nur liegt in den meisten Darstellungen bei Verwendung der reellen Mannigfaltigkeiten in der Physik die Betonung mehr auf gewissen topologischen Eigenschaften, die experimentell nicht überprüfbar sind, während die Maßstruktur als nicht so wesentlich betrachtet wird. Die Schwerpunkte sollten aber eigentlich umgekehrt gesetzt werden. Macht man z. B. in der Mannigfaltigkeit eine Wahrscheinlichkeitsaussage, kann man dies mit einer Wahrscheinlichkeitsdichte beschreiben. Wahrscheinlichkeitsdichten sind aber nur sinnvoll bezüglich eines gewissen Maßes, das für eine Klasse von Teilmengen der Mannigfaltigkeit definiert ist. Da bei den in der klassischen Physik verwendeten Mannigfaltigkeiten differenzierbare Wahrscheinlichkeitsdichten vollständig ausreichen, ist die Einschränkung auf differenzierbare (Maß-)Mannigfaltigkeiten nicht sehr einschneidend. In der Quantentheorie kommen aber auch nicht-differenzierbare Mannigfaltigkeiten vor, für die praktisch nur noch die Maßstruktur wichtig ist.

Der wesentliche Unterschied der hier gebrachten Darstellung der Quantentheorie ist darin zu sehen, daß bei der üblichen Quantentheorie die Ereignisse der Physik *nur* mit den Projektionsoperatoren eines Hilbertraums bzw. mit den zugehörigen abgeschlossenen linearen Teilräumen beschrieben werden können, während bei der hier gebrachten Theorie die Ereignisse in natürlicher Weise auch als *Elemente* des natürlichen Vektorraums (Hilbertraums) betrachtet werden können. Wenn man die folgenden Aussagen betrachtet, die nach meiner Meinung mit anderen Theorien in dieser Form nicht erhalten werden, muß man berücksichtigen, daß das Verständnis der üblichen Theorien nicht einheitlich ist. Insbesondere bin ich der Meinung, daß einige der von mir als neu bezeichneten Gesichtspunkte schon implizit in der ursprünglichen „Transformationstheorie" und der „Diracschen Darstellung" der Quantentheorie enthalten sind, ohne aber ihrer wirklichen Bedeutung entsprechend dargestellt zu werden.

1. Die Quantentheorie wird auf dem Grundkonzept der Übergangswahrscheinlichkeit und nicht der Wahrscheinlichkeitsamplituden aufgebaut, wobei die Formel für die Übergangswahrscheinlichkeit auch für das kontinuierliche, nicht nur für das diskrete Spektrum verwendbar ist.
2. Die diskreten Eigenwerte von Operatoren werden durch Konvention (das verwendete theoretische Modell) festgelegt, nicht durch Messungen.
3. In der so aufgebauten Quantentheorie lassen sich wichtige physikalische Beziehungen ohne Korrespondenzprinzip mathematisch formulieren. Das Korrespondenzprinzip wird erst bei sehr fortgeschrittener Idealisierung der statistischen Modelle wichtig.
4. Es wird gezeigt, wie *jede* statistisch verteilte reellwertige Größe mit Hilbertraumoperatoren beschrieben werden kann (Umkehrung des Eigenwertproblems der Quantenmechanik).

5. Es konnte auf das Axiom verzichtet werden, daß der Verband aller physikalischen Fragen isomorph zum Verband aller abgeschlossenen linearen Teilräume eines Hilbertraums ist, ohne daß ein Teil der Mathematik der Quantentheorie verloren ging. Die Integrationsräume haben sogar mehr Eigenschaften als der „abstrakte" Hilbertraum.

6. Es kann eine Möglichkeit zur Erweiterung der üblichen Quantentheorie angegeben werden, die sich äußerlich dadurch beschreiben läßt, daß Wahrscheinlichkeitsdichten nicht nur als $| \ |^2$ geschrieben werden können, sondern auch als $f(| \ |)$, wobei f eine nichtnegative Funktion ist, die nur für Null gleich Null ist, ohne daß irgendwelche wichtigen algebraischen Beziehungen verloren gingen. Die Ereignisse mit der Wahrscheinlichkeit Null sind dann unabhängig von der gewählten Funktion f. Die Nullstellen der Wahrscheinlichkeitsdichten sind für alle Funktionen f an der gleichen Stelle. Als idealisierte Beugungsfigur kann dann nicht nur $|\sin x/x|^2$, sondern auch $f(|\sin x/x|)$ verwendet werden, ohne daß sich etwas an den algebraischen Beziehungen verändert.

7. Die Axiome, die den wesentlichen Teil des mathematischen Apparats festlegen, gelten für die Quantenmechanik *und* die klassische Mechanik. Insbesondere ist die Formel für die idealisierte Übergangswahrscheinlichkeit gleich. Nur die in dieser Formel vorkommende lineare Abbildung U zwischen den natürlichen Vektorräumen kann in der Quantenmechanik weniger einfach sein.

8. Anstelle eines Eigenwertproblems in *einem* Hilbertraum hat man ein Eigenwertproblem für die Funktionen eines Integralkerns einer Integraltransformation zwischen den natürlichen Vektorräumen. Diese Funktionen sind z. B. die „uneigentlichen Eigenfunktionen" und müssen nicht quadratintegrabel sein. Die Integraltransformationen sind die in 7. genannten Abbildungen U. Sie beschreiben in der Quantenmechanik die eigentlichen physikalischen Beziehungen und stimmen mit den Transformationen der „Darstellungswechsel" der üblichen Quantentheorie überein. Man kann dies das „Superpositionsprinzip" der Quantentheorie nennen.

9. Die Abbildungen U der klassischen Mechanik lassen sich noch einfacher als mit Integraltransformationen beschreiben. Die zugehörigen idealisierten Übergangswahrscheinlichkeiten sind für alle in 6. genannten Funktionen *identisch*. Die klassische Mechanik und Quantenmechanik unterscheiden sich also durch diese nicht vorhandene bzw. vorhandene Abhängigkeit der idealisierten Übergangswahrscheinlichkeit von f.
10. Es kann auf einfache Weise angegeben werden, welche Quantentheorien „verborgener Parameter" nicht möglich sind.
11. Versucht man die Beugungsfigur in einem diskreten Ortsraum zu beschreiben – eine Möglichkeit, die in Maßmannigfaltigkeiten gegeben ist – ist es nötig, im Geschwindigkeitsraum die möglichen Meßwerte zu begrenzen. Macht man dies mit der Lichtgeschwindigkeit, erhält man als kleinste Länge im Ortsraum die halbe Comptonwellenlänge. Für die erhaltene Beugungsfigur divergiert im Unterschied zur üblichen das zentrierte zweite Moment nicht.
12. Bei dieser Quantentheorie mit diskretem Ortsraum erfüllen die Orts- und Geschwindigkeitsoperatoren die gleichen Vertauschungsrelationen wie im kontinuierlichen Fall. Deshalb hat der harmonische Oszillator die gleichen Differenzen der Eigenwerte.

Da es praktisch ausgeschlossen ist, von *einer* üblichen Darstellung der Quantentheorie zu sprechen, wird ein Teil dieser Aussagen wohl erst dann verständlich sein, wenn angegeben wird, welche Quantentheorie als „üblich" gelten soll. Zur Erläuterung wird deshalb der Aufbau einer „üblichen" Quantentheorie schematisch der hier dargestellten gegenübergestellt.

Klassische Beschreibung eines physikalischen Systems durch kanonische Variablen. Kanonisches Übersetzen: kanonische Variable → Operatoren eines Hilbertraums.	Ereignisse der Physik sind meßbare Mengen A von Ereignisverbänden. Zu einer Klasse gleichwertiger Meßgeräte gehört ein Ereignisverband, der von Alternativen erzeugt wird.
Operatorenalgebra eines Hilbertraums.	Meßbare Mengen entsprechen meßbaren Indikatorfunktionen.

Statistische Interpretation, Hilbertraumelemente sind physikalische „Zustände“, der Erwartungswert ist $(\phi, A\phi)$.

Lösung des Eigenwertproblems: $(\phi, A\phi) = \int \lambda d_\lambda(\phi, E_\lambda \phi) = \int \lambda dF(\lambda)$ bzw. $A\phi_a = a\,\phi_a$.

Die Eigenwerte sind die möglichen Meßwerte, der Zustand ϕ bestimmt die Verteilungsfunktion $F(\lambda)$ für die Meßwerte λ.

Das natürliche Maß μ_G kennzeichnet die möglichen Meßwerte einer Klasse gleichwertiger Meßgeräte.

Die Indikatorfunktionen *eines* Ereignisverbandes, deren μ_G-Maß endlich ist, erzeugen den natürlichen Vektorraum E einer Klasse gleichwertiger Meßgeräte, der zu einem Integrationsraum vervollständigt werden kann.

Die Eigenfunktionen ϕ_a liefern die Transformationen U des Darstellungswechsels.

Die Projektionsoperatoren $P_{\Delta\lambda} = E_{\lambda_2} - E_{\lambda_1}$ der Spektraldarstellungen für alle möglichen Operatoren erzeugen alle möglichen Ereignisse der Physik.

Die Übergangswahrscheinlichkeit für den Übergang vom Zustand ϕ_i in den Zustand ϕ_j ist gegeben durch

$$|(\phi_i, \phi_j)|^2 = (\phi_i, P_{\phi_j}\phi_i) = \mathrm{Spur}(P_{\phi_i}P_{\phi_j})$$

Ungenaue Kenntnis des Ausgangszustands führt zum statistischen Gemisch und Dichteoperator.

Die meßbaren Indikatorfunktionen und damit die Ereignisse der Physik können als Projektionsoperatoren *und* (teilweise) als Elemente des Vektorraums E betrachtet werden.

Die Aussagen der Physik sind Wahrscheinlichkeitsangaben für Ereignispaare unterschiedener Ereignisverbände. Eine von dem Ereignis A des ersten Ereignisverbandes abhängige Wahrscheinlichkeitsverteilung für die Ereignisse B des zweiten Ereignisverbandes wird Übergangswahrscheinlichkeit $q(A; B)$ genannt.

Die Modelle der Physik erlauben die Berechnung idealisierter Übergangswahrscheinlichkeiten mit einer linearen Abbildung U von dem ersten natürlichen Vektorraum E_1 in den zweiten natürlichen Vektorraum E_2, wobei die idealisierte Übergangswahrscheinlichkeit gegeben ist durch

$$q(A;B) = \frac{(U(I_A), I_B U(I_A))}{(U(I_A), U(I_A))}.$$

In der klassischen Mechanik ist $U(I_A)$ wieder eine Indikatorfunktion, in der Quantenmechanik sind allgemeinere Abbildungen möglich.

Die Abbildungen U sind die Transformationen des Darstellungswechsels der üblichen Quantentheorie.

Eine unsichere Kenntnis der Ereignisse des ersten Ereignisverbandes führt für die Übergangswahrscheinlichkeiten zum Dichteoperator.

Es ist keine Frage, daß ich sehr viel Nutzen gezogen habe aus zahlreichen Lehrbüchern der Quantentheorie. Da es keinen Sinn hat, alle diese Lehrbücher aufzuführen, sollen hier nur die Darstellungen genannt werden, die diese Untersuchungen besonders stark beeinflußt haben: Es sind die Bücher von *J. von Neumann* (1932, 1968), *G. W. Mackey* (1963), *G. Ludwig* (1970) und – in diesem Zusammenhang vielleicht etwas überraschend – die „Ergodentheorie" von *E. Hopf* (1937, 1970). Neben einer Einführung in die wichtigsten Ergebnisse der Maßtheorie findet man bei *Hopf* einen einfachen und eleganten Beweis für die Sätze von *M. H. Stone* und *A. Wintner*, indem die Spektraldarstellung einer einparametrigen linearen Gruppe unitärer Operatoren des Hilbertraums auf den Satz von *S. Bochner* zurückgeführt wird. Der Satz von *S. Bochner* liefert die Spektraldarstellung positiv definiter Funktionen, die auch für die

Spektraldarstellung stationärer Vorgänge benötigt wird (Wiener-Chintschin-Theorem). Aus der Spektraldarstellung dieser Gruppe unitärer Operatoren erhält man sofort die Spektraldarstellung selbstadjungierter Operatoren des Hilbertraums. Eine große Hilfe bei der Beantwortung der Frage, welchen Aussagegehalt Meßergebnisse haben, ist besonders die Arbeit von *G. Ludwig* (1970) gewesen, auch wenn sie von einem anderen Ausgangspunkt mit einem anderen Ziel geschrieben worden ist. Ich hatte nicht die Absicht, die Hilbertraumstruktur des für alle Meßgeräte (Effektteile) einheitlichen Hilbertraums durch Eigenschaften der Messungen (Hauptsätze des Messens) zu kennzeichnen. Mein unterschiedlicher Ausgangspunkt hat dazu geführt, daß mir diese Hilbertraumstruktur nicht mehr so entscheidend vorkommt. Denn nach der hier gebrachten Theorie ist die Quantentheorie weniger eine mathematische Theorie selbstadjungierter Operatoren in einem abstrakten Hilbertraum, sondern eine Theorie von Abbildungen zwischen Integrationsräumen.

Zum äußeren Aufbau ist zu bemerken, daß ich weitgehend mathematische Definitionen, Sätze und Beweise als Anmerkungen gebracht habe, um den mehr physikalischen Teil nicht zu sehr mit mathematischem Stoff zu belasten. Um das Lesen zu vereinfachen, wird am Schluß der Anmerkung die zugehörige Seitenzahl des Haupttextes aufgeführt. Die Anmerkungen sind zum großen Teil auch für den Leser gedacht, der mit der Maß- und Integrationstheorie nicht allzu sehr vertraut ist, damit er zum Verständnis dieses Textes nicht vorher ein Buch über Maßtheorie lesen muß. Aber vielleicht geht es dem Leser nach dem Lesen dieses Bändchens so wie mir, als ich diese Untersuchungen durchführte, daß auch für ihn die Maßtheorie zu dem grundlegenden mathematischen Konzept der theoretischen Physik wird. Da man in der Mathematik als wichtige Grundstruktur meist zuerst die Topologie kennenlernt, hat man leicht das Bestreben, die mathematischen Strukturen der Physik vorwiegend unter topologischen Gesichtspunkten zu sehen. Dabei vergißt man leicht, daß die σ-Algebra als Klasse von Teilmengen die gleiche Rolle in der Maßtheorie spielt wie die Klasse der offenen Teilmengen, die Topologie, in der Topologie – mit dem großen Unterschied, daß physikalische Entscheidungen leichter mit den

Elementen der σ-Algebra beschrieben werden können als mit offenen Mengen.

Der Hauptteil des Textes behandelt die Aufstellung von Arbeitshypothesen. Sie sind zu betrachten als Axiome, die man in physikalischen Theorien plausibel machen, aber nicht herleiten oder beweisen kann. Es sei kurz angemerkt, daß mich erst ein Teil dieser Arbeitshypothesen veranlaßte, das Konzept der Übergangswahrscheinlichkeit – abweichend von der meist üblichen Definition – als ein Maß auf Paaren von Mengen und nicht auf Mengen von Paaren zu definieren. Diese Betrachtungsweise (Paare von Maßmannigfaltigkeiten) scheint mir das angemessene mathematische Konzept zu sein, um auch die bei *G. Ludwig* (1974)[1] angesprochene Vortheorie zu behandeln.

Ich danke allen, insbesondere Herrn Prof. Dr. *E. Henze* und Herrn Prof. Dr. *G. Ludwig*, die die Mühe auf sich genommen hatten, das ursprüngliche Manuskript zu lesen, und die durch ihre Hinweise und Anregungen wesentlich zur weiteren Klärung der auch für mich oft ungewohnten Begriffe beigetragen haben. Ich danke auch allen anderen, mit denen ich über die hier behandelten Probleme sprechen konnte, besonders allen Mitarbeitern unseres Lehrstuhls, Prof. Dr. *H. Primas* mit seinen Mitarbeitern, der „Starnberger Gruppe" um Herrn Dr. *M. Drieschner* und Herrn Prof. Dr. *W. Ochs* darüberhinaus für seine Hinweise zu den Ausführungen über die Entropie. Ganz besonders gilt mein Dank Herrn Prof. Dr. *Egon Richter*, ohne dessen förderndes Interesse diese Arbeit wohl kaum geschrieben worden wäre.

G. Gerlich

---

[1] Die Anmerkungen sind ab S. 116 zusammengefaßt.

Inhaltsverzeichnis