Archiv von Heisenbergs Briefen

von: Werner Heisenberg
an: Pauli
Datum: 24.02.1957
Stichworte: Reziproke versus äquivalente Zustände im Hilbertraum I, II
Ursprung: Pauli Archiv in Genf
Kennzeichen im Pauli Archiv in Genf: heisenberg_0017-1607r
Meyenn-Nummer: 2535

Arosa 24. 2. 57.

Lieber Pauli!

Den Sonntagnachmittag will ich zur Beantwortung Deines kurzen mathematischen Briefs benützen, und morgen eventuell eine Antwort auf den angekündigten ausführlichen Brief anschliessen.

Mit Deinen Ansichten über ψ^{+A} u.s.w. bin ich <u>nicht</u> völlig einverstanden, obwohl es sich zum grossen Teil um eine Bezeichnungsfrage handelt. Aber an einer Stelle hast Du, glaube ich, einen mathematischen Fehler gemacht (in der Definition des Erwartungswerts), der nicht unwichtig ist.

Ich muss etwas weiter ausholen:

Wenn wir einen Vektor durch die Funktion ψ darstellen, so meinen wir (etwa im $N+\theta$-Beispiel) folgendes:

$$|\Psi\rangle = \int dk\, \psi^k \, |1_N, 1_k\rangle + \psi^V \cdot |1_V\rangle \qquad (1).$$

Wenn man zu dieser ket-Darstellung die zugehörige bra-Darstellung angeben will, so muss man, meiner Ansicht nach, von folgenden Forderungen ausgehen:

a) Die bra-Darstellung muss <u>eindeutig</u> aus der ket-Darstellung folgen, und zwar <u>unabhängig</u> davon, ob der Vektor $|\psi\rangle$ alleinsteht, oder Teil eines Systems von Basisvektoren ist.

b) Daher muss zweckmässig $\langle\psi|\psi\rangle$ die <u>Norm</u> des Zustands ψ bedeuten. Allgemeiner entspricht also $\langle\psi'|\psi\rangle$ dem skalaren Produkt von ψ' u. ψ.

Daraus folgt: $\langle 1_N 1_k | 1_N 1_{k'} \rangle = \delta_{kk'}$; $\langle 1_N 1_k | 1_V \rangle = 0$; $\langle 1_V | 1_V \rangle = -1$.

$$\langle \psi | = \int \psi^{*k} dk \langle 1_N 1_k | + \psi^{*V} \langle 1_V |$$

Also wird die Norm:

$$\langle \psi | \psi \rangle = \int dk\, \psi^{*k} \psi^k - \psi^{*V} \psi^V,$$ die man auch als

$$= \int dk\, \psi^*_k \psi^k + \psi^*_V \psi^V$$ schreiben kann,

wenn man $\psi^*_k = \psi^{*k}$ u. $\psi^*_V = -\psi^{*V}$ setzt.

Die letztere Form war bei mir gemeint mit

$\int \psi^+ \psi \, d\tau$. D.h. $\psi^+ = (\psi^*_k, \psi_V)$.

Nun kann man, wenn man ein System von Basisvektoren $|\psi_i\rangle$ hat, mit $\langle \psi_k | \psi_i \rangle = g_{ki}$, natürlich auch ~~klein~~ ein dazu „reziprokes" System von Vektoren ~~k~~

$$|\psi^i\rangle = g^{ik} |\psi_k\rangle$$

einführen u. diese neuen Vektoren durch die Funktionen $\psi^i = g^{ik} \psi_k$ darstellen. Es muss aber hervorgehoben werden, dass $|\psi^i\rangle$ ein <u>anderer</u> Vektor ist, als $|\psi_i\rangle$, dass also <u>nicht</u> etwa ψ^i eine andere Darstellung des Vektors ψ_i ist. ψ^i ist ja mit ψ_i allein gar nicht eindeutig verknüpft; ~~das~~ denn ~~ψ_k~~ ψ^i hängt nicht nur von ψ_i, sondern auch von allen anderen Basisvektoren ab. Wenn man $|\psi_i\rangle$ beibehält, aber die anderen Basisvektoren $|\psi_k\rangle$

ändert, so ändert man im allgemeinen auch $|\psi^i\rangle$.
Ich möchte, in Anlehnung an das „reziproke Gitter" der Kristallographen, die Vektoren $\psi^i\rangle$ die zu den $\psi_i\rangle$ reziproken Vektoren nennen.

Wenn man nun den Erwartungswert eines Operators O im Zustand $|\psi\rangle$ definieren will, so scheint mir die erste und wichtigste Forderung, dass diese Grösse nur vom Zustand $|\psi\rangle$ abhängt und nichts mit der Frage zu tun hat, ob $|\psi\rangle$ allein steht oder Teil eines Basissystems ist. Daher kann dieser Erwartungswert nur durch

$$\bar{O} = \frac{\langle\psi|O|\psi\rangle}{\langle\psi|\psi\rangle}$$

definiert werden. Die von Dir ~~angegebene~~ angegebene Definition

$$\bar{O} = \frac{\langle\psi^i|O|\psi_i\rangle}{\langle\psi^i|\psi_i\rangle = 1}$$

würde ~~aber~~ bedeuten, dass der Erwartungswert nicht nur von ψ_i sondern auch von allen anderen Basisvektoren ψ_k abhänge, was doch völlig unvernünftig ist.

Ich muss also in aller Schärfe an der Behauptung festhalten, dass der Erwartungswert von H im Zustande A den Wert E, im Zustand B aber den Wert ∞ hat.

Die beiden Zustände A u. B sind also keineswegs äquivalent. Es bleibt richtig, dass in dem speziellen Basissystem, das bei Diagonalisierung von H (soweit möglich) entsteht, der ~~Vek~~ Zustand B reziprok zum Zustand A ist. Aber reziprok ist nicht äquivalent. Ich kann meinen Hilbertraum I also auch durch die Forderung charakterisieren, dass er alle die Zustände umfasst, in denen der zu einem unendlichen Erwartungswert der Energie gehörige Zustand B asymptotisch, d.h. als freier Zustand, nicht vorkommt. Entgegen früheren Konzessionen meinerseits ist also A (dargestellt durch $\psi_A = \text{const.}\,\psi^B$) gut, u. B (dargestellt durch $\psi_B = \text{const.}\,\psi^A$) böse.

Noch eine Bemerkung: Die Multiplikationsvorschrift lautet natürlich $\sum_i \langle \psi | O | \Phi_i \rangle \langle \Phi^i | O' | \chi \rangle = \langle \psi | O O' | \chi \rangle$.

D.h. für die Vollständigkeitsrelation muss immer Φ_i mit dem reziproken Zustand Φ^i gekoppelt werden. Man muss allgemein scharf unterscheiden zwischen Relationen, die sich auf einen einzelnen Vektor u. solchen, die sich auf ein Basissystem von Vektoren beziehen. Die bra-ket-Relation gehört zum einzelnen Vektor, ebenso der Erwartungswert. Die Vollständigkeitsrelation u. die Relation zwischen ‚reziprokem' System u. Basissystem dagegen zum Basissystem.

25.2. Da Dein angekündigter Brief heute doch noch nicht kam, schick ich diesen gleich ohne Verlängerung nach Zürich. Viele Grüsse!

Dein W. Heisenberg