Inhaltsverzeichnis

1 Wiederholung

Die Quantenmechanik wird durch Zustandsvektoren und lineare Operatoren auf (im allgemeinsten Fall) unendlichdimensionalen Hilberträumen beschrieben. Den mathematischen Formalismus liefert die Funktionalanalysis. Zunächst werden die wohlbekannten wichtigen Definitionen gegeben.

1.1 Hilberträume und Lineare Operatoren

1.1.1 Hilberträume

Skalarprodukt zwischen beliebigen $\psi,\ \phi \in H$ ist durch die drei folgenden Bedingungen definiert:

i) $(\psi, a\phi + b\chi) = a(\psi, \phi) + b(\psi, \chi)$

ii) $(\psi, \phi) = (\phi, \psi)^*$

iii) $(\psi, \psi) \geq 0$, $(\psi, \psi) = 0 \Longleftrightarrow \psi = 0$.

Als eine wichtige direkte Folgerung aus der Definition ist die Stetigkeit des Skalarproduktes hervorzuheben. Ein weiterer für die Einführung des Hilbertraums notwendiger Begriff ist der Begriff einer Cauchy-Folge. Die Folge $(\phi_n)_{n \in \mathbb{N}}$ ist eine Cauchy-Folge, wenn zu jedem $\varepsilon > 0$ ein N ex. mit

$$\|\varphi_n - \varphi_m\| \leq \varepsilon \forall m, n \geq N.$$

Einen Vektorraum $(H, (\cdot,\cdot)_H)$ nennt man einen Hilbertraum, wenn Skalarprodukt $(\cdot,\cdot)_H$ auf H definiert ist und H vollständig ist, d.h. jede Cauchy-Folge in H konvergiert.

Weiterhin bezeichnet man einen Hilbertraum separabel, wenn er eine abzählbare Orthonormalbasis besitzt. Im Folgenden werden separable Hilberträume betrachtet.

1.1.2 Orthogonale Untervektorräume

Nun führen wir eine für die Quantenmechanik wichtige Sorte von Untervektorräumen ein, nämlich die orthogonalen Untervektorräume.

Sei $M \subset H$ Untervektorraum, $M^\perp = \{\psi \in H | (\psi, \phi) = 0\ \forall \phi \in M\}$ ist die Menge aller Vektoren, die orthogonal zu allen Vektoren in M sind. Zwei Untervektorräume M und N sind orthogonal, wenn $\forall\ \psi \in M,\ \phi \in N$ gilt $(\phi, \psi) = 0$. Sind $M_1,\ M_2,\ M_3, \ldots,\ M_n$ orthogonale Untervektorräume mit $H = M_1 + \cdots + M_n$ nennt man die Summe dieser Untervektorrä1ume die direkte Summe. Es gilt dann

$$H = M_1 \oplus\ M_2 \oplus \cdots \oplus M_n = \sum_i \oplus M_i$$

das heißt jedes Element ψ aus H lässt sich eindeutig zerlegen in

$$\psi = \psi_{M_1} + \psi_{M_2} + \cdots + \psi_{M_n}$$

wobei $\psi_{M_i}\ \in\ M_i \quad 1 = 1, \ldots, n$ ist.[1]

[1] aus $H = M_1 + \cdots + M_n$ folgt per Definition der Summe die Zerlegung, die Orthogonalität gewährleistet die Eindeutigkeit

1.1.3 Funktionale

Funktionale sind lineare Abbildungen von H nach $\mathbb{K}$, d.h. $F : H \to \mathbb{K}$ mit

$$i)\ F(\psi + \phi) = F(\psi) + F(\phi) \quad ii)\ F(a\psi) = aF(\psi)$$

Als erstes wichtiges Ergebnis der Funktionalanalysis wird hier ohne Beweis der Darstellungssatz von Riesz vorgestellt. Dieser stellt durch den Skalarprodukt einen Zusammenhang zwischen den Funktionalen und den Elementen de Hilbertraums her.

Satz: Ist H^* der Raum aller stetigen Funktionale auf H(Dualraum). Dann ist $j : H \to H^*$ def. durch $j(\psi)(\phi) = (\phi, \psi)$ ein isometrischer Isomorphismus. Also: zu jedem stetigen Funktional F gibt es einen eindeutigen Vektor $\phi_F \in H$ mit $F(\psi) = (\phi_F, \psi)$ und es gilt sogar $\|F\| = \|\phi_F\|$.

Zunächst wundert man sich über diese Definition der Abbildung, aber die Abbildung ist ja in erster Linie durch die Wirkung auf die abzubildenen Elemente definiert.
Aufgrund der Existenz dieses Satzes kann die Diracschreibweise eines Operators mithilfe eines Bravektors gerechtfertigt werden.

1.1.4 Lineare Operatoren und Matrizen

Operatoren sind lineare Abbildungen von H in einen beliebigen Hilbertraum H', wobei $H' = H$ oder $H' = \mathbb{K}$ auch möglich sind. Auf dem Raum der Operatoren kann man eine Norm definieren:

$$\|A\| = \sup_{\|\psi\| \leq 1} \left\{ \|A\psi\| \middle| \psi \in H \right\}$$

Man kann zeigen, dass ein Operator A genau dann stetig ist wenn seine Norm beschränkt ist, d.h. $\|A\| < \infty$

1.1.5 Unitäre Operatoren

Für die Physik sind die unitären Operatoren von besonderer Bedeutung. Ein Operator U ist unitär, wenn er einen inversen Operator besitzt und

$$\|U\psi\| = \|\psi\| \ \forall \psi \in H \qquad \text{gilt.}$$

Diese Definition ist äquivalent zu folgendem Zusammenhang:

$$(U\psi, U\phi) = (\psi, \phi) \ \forall \phi, \psi \in H$$

1.1.6 Selbstadjungierte Operatoren

Der adjungierte Operator $A^\dagger$ eines stetigen linearen Operators ist definiert durch

$$(\phi, A^\dagger \psi) = (A\phi, \psi) \qquad \forall\ \phi,\ \psi.$$

Dieser ist wohledefiniert, denn aus dem Darstellungssatz von Riesz folgt :
$F(\psi) := (\phi, A\psi)$ stetig $\Rightarrow\ \exists\ \chi_F$ mit $(\chi_F, \psi) = F(\psi)$
d.h. $A^\dagger \phi = \chi_F$ und $(A^\dagger \phi, \psi) = (\phi, A\psi)$.
Weiter nennt man den Operator A selbstadjungiert oder Hermitesch, wenn $A^\dagger = A$ ist.

Nach dem zweiten Postulat der Quantenmechanik wird eine physikalische Messgröße durch einen im Zustandsraum wirkenden Operator beschrieben. Dieser Operator ist eine Observable, was bedeuted, dass dieser selbstadjungiert ist und man aus seinen Eigenvektoren eine Orthonormalbasis bilden kann.

Es besteht eine Analogie stetiger Linearer Operatoren zur komplexen Zahlenebene: definieren wir den Realteil und den Imaginärteil wie folgt:

$$\begin{aligned} Re\ A &= \frac{1}{2}(A + A^\dagger) \\ Im\ A &= \frac{1}{2i}(A - A^\dagger) \\ A &= Re\ A + i \cdot Im\ A \end{aligned}$$

so gilt $A = Re\ A$ für A Hermitesch.
Unitäre Operatoren entsprechen den komplexen Zahlen der Länge 1, da sie ja die Länge eines Vektors nicht verändern.
Diese Analogie wird später durch den Satz von Stone erweitert.

1.2 Projektionsoperatoren

Ist M ein Untervektorraum und $M^\perp$ der dazu orthogonale Raum, so kann jedes Element ψ zerlegt werden in: $\psi = \psi_M + \psi_{M^\perp}$.
Ein Projektionsoperator E_M ist definiert durch

$$E_M \psi = \psi_M \quad \forall \psi.$$

Ein stetiger beschränkter Operator E ist ganau dann ein Projektionsoperator, wenn gilt

$$E \cdot E = E = E^\dagger.$$

Sind $E_1,\ E_2$ Projektionsoperatoren auf $M_1,\ M_2$ und $E_1 E_2 = E_2 E_1$, dann projeziert $E_1 E_2$ auf $M_1 \cap M_2$.
Sind $E_1,\ E_2$ orthogonal, dann projeziert $E_1 + E_2$ auf $M_1 \oplus M_2$.
Und weiter folgt

$$H = M_1 \oplus M_2 \oplus \cdots \oplus M_n \qquad \Rightarrow \qquad \sum_k E_k = 1$$

Beispiele
Betrachten wir $\mathbb{R}^3$, Unterräume sind die x-Achse (M_x), die y-Achse (M_y) und die z-Achse (M_z), sodass folgt:
$\mathbb{R}^3 = M_x \oplus M_y \oplus M_z$ Projektionsoperatoren(Matrizen) auf diese Unterräume sind

$$P_x = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad P_y = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad P_z = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}.$$

Man sieht leicht, dass $P_x \cdot P_x = P_x,\ P_x \cdot P_y = 0,\ P_x + P_y + P_z = E$.
Betrachte weiter einen beliebigen Hilbertraum H und einen eindimensionalen Untervektorraum, welcher durch ψ mit $\|\psi\| = 1$ aufgespannt wird. Dann folgt

$$E\phi = (\phi, \psi)\psi$$

In der Dirac-Schreibweise kann man den Projektionsoperator darstellen als: $E = |\psi\rangle\langle\psi|$ mit

$$E|\phi\rangle = |\psi\rangle\langle\psi|\phi\rangle = \langle\psi|\phi\rangle|\psi\rangle.$$

Ist $\phi_1, \phi_2, \phi_3, \ldots$ ONB, so gilt

$$E_k E_j = \delta_{kj} E_j \text{ und damit } \sum_j |\phi_j\rangle\langle\phi_j| = 1$$

2 Spektralzerlegung und der Satz von Stone

2.1 Eigenwerte und Eigenvektoren in endlichdimensionalen Hilberträumen

Sei B ein linearer Operator auf einem Vektorraum H, so ist b ein Eigenwert von B wenn es einen Vektor $\psi \neq 0$ gibt mit

$$B\psi = b\psi$$

ψ ist dann der Eigenvektor zu dem Eigenwert b. Ist b Eigenwert von B so ist $(B - b \cdot 1)$ nicht bijektiv.
In endlich-dimensionalen Vektorräumen lässt sich jede normale ($AA^\dagger = A^\dagger A$) Matrix diagonalisieren, d.h. es gibt eine Basis aus Eigenvektoren[2].
Die Menge der Linearkombinationen zu einem bestimmten Eigenwert nennt man einen Eigenraum. Ist die Matrix diagonalisierbar, so lässt sich der Vektorraum in Eigenräume der Matrix zerlegen.

2.2 Spektralzerlegung in endlichdimensionalen Räumen

Zunächst wolen wir anhand der endlichdimensionalen Räumen den Begriff der spektralen Familie einführen, um den dann auf unendlichdimensionale Räume zu erweitern.
Dazu starten wir mit der Darstellung eines hermiteschen Operators mithilfe der Projektionsoperatoren. Dieses ist ja wegen des reellen (oder komplexen) Spektralsatz in endlichdimensionalen Räumen immer möglich.

$$A = \sum_{k=1}^{m} a_k I_k \qquad \text{mit Ordnung } a_1 < a_2 < \cdots < a_m$$

Die Projektionsoperatoren sind orthogonal: $I_j I_k = \delta_{jk} I_k$
Vollständigkeit drücken wir aus durch: $\sum_{k=1}^{m} I_k = 1$
Die Projektionsoperatoren auf die Eigenräumen sind

$$I_k = \sum_s |a_k, s\rangle\langle a_k, s|$$

und damit der Operator A

$$A = \sum_k a_k \sum_s |a_k, s\rangle\langle a_k, s|$$

[2]Reeller Spektralsatz

Für jedes $x \in \mathbb{R}$ definieren wir damit:

$$E_x = \sum_{a_k \leq x} I_k$$

daraus folgt

$$E_x E_y = E_x = E_y E_x \text{ für } x \leq y.$$

Definieren wir nun weiter

$$dE_x = E_x - E_{x-\varepsilon} \qquad \text{so, dass kein } a_j \text{ zwischen } x-\varepsilon \text{ und } x \text{ liegt,}$$

so können wir damit die wohlbekannten Gleichungen wie folgt darstellen:

$$\begin{array}{ccc} \sum_k I_k = 1 & \text{entspricht} & \int_{-\infty}^{\infty} dE_x = 1 \\ A = \sum_k a_k I_k & \text{entspricht} & A = \int_{-\infty}^{\infty} s dE_s \\ dE_x \neq 0 & \Leftrightarrow & x = a_j \quad \text{Eigenwert.} \end{array}$$

Die Skalarprodukte schreiben sich damit wie folgt

$$\begin{aligned} (\phi, \psi) &= (\phi, \textstyle\sum_k I_k \psi) & \qquad (\phi, \psi) &= (\phi, \int_{-\infty}^{\infty} dE_x \psi) \\ &= \textstyle\sum_k (\phi, I_k \psi) & &= \int_{-\infty}^{\infty} d(\phi, E_x \psi) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} (\phi, A\psi) &= (\phi, \textstyle\sum_k a_k I_k \psi) & \qquad (\phi, A\psi) &= (\phi, \int_{-\infty}^{\infty} x dE_x \psi) \\ &= \textstyle\sum_k a_k (\phi, I_k \psi) & &= \int_{-\infty}^{\infty} x d(\phi, E_x \psi) \end{aligned}$$

Diese Schreibweise hat eine formale Ähnlichkeit zu dem Riemann-Stieltjes-Integral, welches für eine auf $[a, b]$ stetige Funktion g und eine auf $[a, b]$ monotone Funktion F definiert ist und sich berechnet aus

$$\int_a^b g(x) dF(x) = \lim_{n \to \infty} \sum_{k=1}^{n} g(x_k)\{F(x_k) - F(x_{k-1})\}$$

In unserem Fall folgt mit $\varepsilon = \dfrac{1}{n}$

$$\begin{aligned} \int_a^b x d(\phi, E_x \psi) &= \lim_{n \to \infty} \sum_{k=1}^{n} x_k \{(\phi, E_x \psi) - (\psi, E_{x-\varepsilon})\psi\} \\ &= \lim_{n \to \infty} \sum_{k=1}^{n} x_k (\phi, dE_x \psi) \\ &= \sum_k a_k (\phi, I_k \psi) = (\phi, A\psi) \end{aligned}$$

da $dE_x = I_k$ für $x = a_k$, sonst 0.

2.3 Spektrale Familie

Nun wollen wir das was wir oben bereits in endlichdimensionalen Räumen uns veranschaulicht haben allgemeiner einführen. Eine Familie von Projektoren $E_x \quad x \in \mathbb{R}$ bilden eine spektrale Familie wenn gilt:

(i) $E_x \leq E_y$ oder $E_x E_y = E_x = E_y E_x$ für $x \leq y$ (monoton steigend)

(ii) ist $\varepsilon > 0$, dann $E_{x+\varepsilon} \to E_x$ für $\varepsilon \to 0$ für alle x, ψ (rechtsstetig)

(iii) $E_x \psi \to 0$ für $x \to -\infty$ und $E_x \psi \to \psi$ für $x \to \infty$ für alle ψ

ist $\|\psi\| = 1$ so ist $\|E_x \psi\|$ eine Verteilungsfunktion. Die Ergebnisse unserer vorüberlegungen zu endlichdimensionalien Vektorräumen können auch allegemein bewiesen werden. Hier geben wir einige wichtige Sätze an ohne sie zu beweisen.

Satz: Für jeden selbstadjungierten Operator A existiert eine eindeutige spektrale Familie von Projektionsoperatoren E_x so, dass:

$$(\phi, A\psi) = \int_{-\infty}^{\infty} x d(\phi, E_x \psi)$$

man schreibt

$$A = \int_{-\infty}^{\infty} x dE_x$$

und nennt diese gleichung die Spektralzerlegung von A.

Satz: Für jeden unitären Operator U existiert eine eindeutige spektrale Familie von Projektionsoperatoren E_x so, dass:

$$(\phi, U\psi) = \int_{0}^{2\pi} e^{ix} d(\phi, E_x \psi)$$

man schreibt

$$U = \int_{0}^{2\pi} e^{ix} dE_x$$

Spektralzerlegung von U.

Sei A selbstadjungierter Operator mit der Spektralzerlegung $A = \int x dE_x$. Dann macht E_x einen Sprung in $x = a$ genau dann, wenn a EW von A ist.
Sei U unitärer Operator mit der Spektralzerlegung $U = \int e^{ix} dE_x$. Dann macht E_x einen Sprung in $x = \theta$ genau dann, wenn $e^{i\theta}$ EW von U ist.
Mithilfe der Spektralen Familie können wir ein Spektrum definieren.
Ein Punkt ist im **Spektrum** von A, wenn er nicht im Intervall liegt, wo E_x konstant ist. Das Spektrum ist somit die Menge aller Punkte, wo E_x anwächst.
Steigt E_x kontinuierlich so leigt ein kontinuierliches Spektrum vor. Haben wir Sprungstellen von E_x so liegt ein diskretes Spektrum vor.

2.4 Stone'sches Theorem

Eine wichtige Anwendung der Spekraldarstellung ist die rechentechnische Vereinfachung im Umgang mit Funktionen von Operatoren. Ist A selbstadjungiert mit Spektralzerlegung:

$$A = \int_{-\infty}^{\infty} x \; dE_x,$$

so wird eine Funktion $f(A)$ definiert durch

$$(\phi, f(A)\psi) = \int_{-\infty}^{\infty} f(x)\ d(\phi, E_x\psi).$$

Für $f(x) = x$ ist $f(A) = A$ und damit:

$$\int_{-\infty}^{\infty} x\ d(\phi, E_x\psi) = (\phi, A\psi),$$

für $f(x) = 1$ ist $f(A) = 1$, also

$$\int_{-\infty}^{\infty} d(\phi, E_x\psi) = (\phi, \psi).$$

Weiter wollen wir eine fundamentale Relation zwischen unitären und Hermiteschen Operatoren hier angeben.
Sei

$$H = \int_{-\infty}^{\infty} x\ dE_x.$$

Dann definiert

$$(\phi, U_t\psi) = \int_{-\infty}^{\infty} e^{itx}\ d(\phi, E_x\psi)$$

den unitären Operator $U_t = e^{itH}$ (unitär da $(e^{-itx})^* e^{itx} = 1$) mit

$$U_t U_{t'} = U_{t+t'} \qquad \text{und} \qquad U_0 = 1.$$

Das Stone'sche Theorem liefert die Umkehrung dieser Beziehung. Ist also

$$U_t U_{t'} = U_{t+t'} \quad \text{und} \quad U_0 = 1 \quad \text{und} \quad (\phi, U_t\psi) \text{ stetig in } t$$

dann gibt es einen eindeutigen selbstadjungierten Operator H mit:

$$U = e^{itH}$$

iH ist der sog. infinitisimale Erzeuger von U.
Ein Vektor ψ ist im Definitionebereich von H genau dann, wenn $(1/it)(U_t - 1)\psi$ für $t \to 0$ konvergiert, dann gilt auch $(1/it)(U_t - 1)\psi \to H\psi$.
iH ist der sogenannte infinitisimale Erzeuger von U.
Ist also $U_t\psi$ im Definitionsbereich von H, dann gilt

$$\begin{aligned}
\frac{1}{i\Delta t}(U_{\Delta t} - 1)U_t\psi &\to HU_t\psi \\
\frac{1}{i\Delta t}(U_{t+\Delta t} - U_t)\psi &\to HU_t\psi \\
\text{also für } \Delta t \to 0 \\
-i\frac{\partial}{\partial t}U_t\psi &= HU_t\psi
\end{aligned}$$

Beispiele

- Translationen
  Sei $\tau := (\mathbb{R}, +)$ die Translationsgtuppe und

$$U(t)\psi(x) = \psi(x + t).$$

Der unitäre Operator erfüllt offenbar die Bedingungen

$$U_t U_{t'} = U_{t+t'} \quad \text{und} \quad U_0 = 1 \quad \text{und} \quad (\phi, U_t\psi) \text{ stetig in } t$$

$$\lim_{t\to 0} \frac{U(t)\psi(x) - \psi(x)}{it} = \lim_{t\to 0} \frac{\psi(x+t) - \psi(x)}{it} = \frac{\partial}{i\partial x} = p_x$$

Die x-Komponente des Impulsoperators erzeugt die Translationsbewegung in x-Richtung.

- Ein weiteres wichtiges Beispiel ist der Zeitentwicklungsoperator für ein Problem mit zeitunabhängigem Hamilton-Operator.

$$|\psi(t)\rangle = U(t,t_0)|\psi(t_0)\rangle \qquad U(t,t_0) = e^{\frac{i}{\hbar}H(t-t_0)}$$

Der Hamiltonoperator erzeugt die Zeitentwicklung des Systems.