

Inhaltsverzeichnis

1	Elemente der Funktionalanalysis	1
1.1	Elemente der Masstheorie	1
1.2	Hilberträume	4
1.2.1	Inäquivalenz von Normen	6
1.2.2	Der Raum $L^2(\mathbb{R}^n, d\mu)$	7
1.3	Operatoren	7
1.3.1	Konvergenzbegriffe für Operatoren	10
1.3.2	Das Stonesche Theorem	11
1.4	Fourier Transformation	11
1.5	Direkte Summen und Tensorprodukte	13
1.6	Bemerkungen zum Spektraltheorem	14
1.6.1	Projektorwertige Masse und Integration	15
1.6.2	Die Definition des Spektrums	16
1.6.3	Das Spektraltheorem	18
1.7	Algebren	19
1.8	Spur, Spurklasse, Hilbert-Schmidt Operatoren	21
1.9	Die bra-ket Notation	23
2	Die grundlegende Struktur	25
2.1	Eine algebraische Betrachtung der klassischen Mechanik	25
2.1.1	Klassische Kinematik	25
2.1.2	Klassische Dynamik	29
2.2	Kinematik in der Quantenmechanik	30
2.2.1	Zustände	31
2.2.2	Zur Induktion von Wahrscheinlichkeitsmassen	32
2.3	Heisenbergsche Vertauschungsrelationen	33
2.3.1	Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren	34
2.4	Die Schrödingersche Darstellung	35
2.4.1	Observable	35
2.4.2	Zur Eindeutigkeit der Schrödingerschen Darstellung	35
2.4.3	Darstellung von Zuständen durch Dichtematrizen	38
2.4.4	Darstellung von Zuständen durch Hilbert-Schmidt Operatoren	41
2.4.5	Die Heisenbergsche Unschärferelation	42
2.5	Zusammengesetzte Systeme	44
2.6	Dynamik	45
2.6.1	Physikalische Automorphismen	45
2.6.2	Die Zeitevolution reiner Zustände	47

2.6.2.1	Autonome Systeme	48
2.6.2.2	Nichtautonome Systeme	48
2.6.3	Schrödinger-Bild für reine Zustände	49
2.6.4	Heisenberg-Bild	50
2.6.5	Schrödinger-Bild für allgemeine Zustände	50
2.6.6	Wechselwirkungsbild	51
2.6.7	Korrespondenzregel	52
2.6.8	Auszüge aus der Spektraltheorie von Schrödinger Operatoren	55
2.6.9	Vom Spektrum zur Evolution der Zustände	56
2.7	Kopenhagen Heuristik	57
2.8	Klassische Mechanik - Quantenmechanik	59
3	Einfache quantenmechanische Systeme	61
3.1	Das kräftefreie Teilchen	62
3.2	Eindimensionale Probleme mit stückweise konstanten Potentialen	65
3.3	Der harmonische Oszillator	69
3.3.1	Der analytische Zugang	70
3.3.2	Der algebraische Zugang	73
3.3.3	Beweis, dass wir das Eigenwert-Problem vollständig gelöst haben	75
3.4	Zweikörperprobleme mit Coulomb-Wechselwirkung	78
3.4.1	Das Wasserstoffatom	80

Kapitel 1

Elemente der Funktionalanalysis

In diesem Kapitel werden wir Eigenschaften von Hilberträumen (insbesondere des Raumes $L^2(\mathbb{R}^n, d\mu)$) und von Operatoren auf Hilberträumen skizzieren, die grösstenteils aus der MMP-Vorlesung bekannt sind. Dazu starten wir mit der Definition eines Masses und gehen nach allgemeinen Bemerkungen zu Banach- und Hilberträumen über zur Diskussion des Raumes $L^2(\mathbb{R}^n, d\mu)$. Anschliessend folgt ein kurzer Abriss über Operatoren auf $L^2(\mathbb{R}^n, d\mu)$. Das Kapitel schliesst mit Bemerkungen zur Spektraltheorie von Operatoren, der Definition von C^* -Algebren, der Spurklasse und Hilbert-Schmidt Operatoren. Die ganze Präsentation ist so oberflächlich wie nur möglich gehalten. Die tatsächliche Beschreibung der angeschnittenen Themen gehören in eine Vorlesung über Funktionalanalysis. Weiter sei auf die Bücher [Reed80], [Lieb97] und [Rudin73] verwiesen.

1.1 Elemente der Masstheorie

Analysis ist die Kunst Grenzwerte zu finden. In einer einführenden Vorlesung über Analysis lernt man das Riemann-Integral kennen. Das Problem dieses Integrals ist, dass es nur für eine spezielle Klasse von Funktionen definiert ist, welche nicht abgeschlossen ist unter dem punktweisen Limes von Folgen von Funktionen. Analysis mit diesem Integrationsbegriff ist demnach vergleichbar mit der Arbeit mit rationalen Zahlen bei gleichzeitigem Ausschluss der irrationalen Zahlen. Wir beginnen mit der Definition einer σ -Algebra, gebrauchen dies zur Definition von Massen und zeigen, wie die Integration einer Funktion bzgl. eines Masses definiert ist. Der Lebesguesche Zerlegungssatz liefert eine anschauliche Darstellung allgemeiner Masse. Diese Resultate werden wir in der Diskussion der Spektraltheorie von Operatoren auf dem Hilbertraum benötigen um Projektionsmasse zu definieren, welche das Fundament für das Spektraltheorem bilden.

Definition 1.1. Sei X eine beliebige Menge. Eine nicht-leere Familie \mathcal{A} von Teilmengen $A \subset X$ heisst σ -Algebra, falls

- (i) $X \in \mathcal{A}$,

- (ii) $A \in \mathcal{A}$ impliziert $X \setminus A \in \mathcal{A}$,
- (iii) $A_1, A_2, \dots \in \mathcal{A}$ impliziert $\bigcup_{n=1}^{\infty} A_n \in \mathcal{A}$.

Beispiel 1.1 (Borelsche σ -Algebra). Sei (X, d) ein metrischer Raum. Die Metrik d definiert eine Familie $\tilde{\mathcal{A}}$ von offenen Mengen auf X . Die Borelsche σ -Algebra $\mathcal{B}(X)$ des metrischen Raumes (X, d) ist die kleinste σ -Algebra, welche die offenen Teilmengen $\tilde{\mathcal{A}}$ enthält, d.h. $\mathcal{B}(X)$ setzt sich zusammen aus $\tilde{\mathcal{A}}$ und der minimalen Anzahl zusätzlicher Teilmengen von X , so dass die Forderungen an eine σ -Algebra erfüllt werden. Ein Element aus $\mathcal{B}(X)$ heisst *Borel-Menge*.

Ein Mass ist eine Vorschrift, die jeder Teilmenge eine reelle Zahl oder Unendlich zuordnet.

Definition 1.2. Ein auf einer σ -Algebra \mathcal{A} definierte Funktion $\mu : \mathcal{A} \rightarrow \mathbb{R} \cup \infty$ heisst *Mass*, falls

- (i) $\mu(A) \geq 0, \forall A \in \mathcal{A}$,
- (ii) $\mu(\emptyset) = 0$,
- (iii) $A_1, A_2, \dots \in \mathcal{A}$ und $A_k \cap A_l = \emptyset$ für $k \neq l$ impliziert

$$\mu\left(\bigcup_{n=1}^{\infty} A_n\right) = \sum_{n=1}^{\infty} \mu(A_n).$$

Das Tripel (X, \mathcal{A}, μ) heisst *Massraum*. *Nullmengen* B sind Elemente von \mathcal{A} mit der Eigenschaft $\mu(B) = 0$. Ein Mass μ heisst *Wahrscheinlichkeitsmass*, falls $\mu(X) = 1$ (d.h., falls das Mass normiert ist). Ein auf einer Borelschen σ -Algebra definiertes Mass nennt man *Borelsches Mass*.

Beispiel 1.2 (Dirac-Mass). Sei X eine Menge, \mathcal{A} eine σ -Algebra auf X und $y \in X$ beliebig. Dann ist die Abbildung

$$\delta_y(A) = \begin{cases} 1, & \text{falls } y \in A, \\ 0, & \text{sonst,} \end{cases}$$

ein bzgl. der σ -Algebra \mathcal{A} definiertes Mass, das unter dem Namen *Dirac-Mass* bekannt ist.

Beispiel 1.3 (Lebesgue-Mass). Sei $(X, d) = (\mathbb{R}^n, d)$ ein metrischer Raum mit einer beliebigen Metrik auf \mathbb{R}^n (alle Metriken sind äquivalent auf endlich-dimensionalen Räumen). Dann existiert eine *eindeutige* σ -Algebra \mathcal{A} auf (\mathbb{R}^n, d) und ein *eindeutiges* Mass λ auf \mathcal{A} , welches den folgenden Eigenschaften genügt:

- (i) Jede offene Menge in \mathbb{R}^n ist in \mathcal{A} . Folglich gilt $\mathcal{B}(X) \subset \mathcal{A}$.
- (ii) Aus $A \in \mathcal{A}, \lambda(A) = 0$ und $B \subset A$ folgt $B \in \mathcal{A}$ und $\lambda(B) = 0$.
- (iii) Sei M ein n -dimensionaler Quader in \mathbb{R}^n mit Seitenlängen $(b_1 - a_1), \dots, (b_n - a_n)$. Dann gilt: $M \in \mathcal{A}$ und $\lambda(Q) = (b_1 - a_1) \cdot \dots \cdot (b_n - a_n)$
- (iv) Das Mass λ ist translationsinvariant, d.h. $\lambda(x + A) = \lambda(A)$ für alle $x \in \mathbb{R}^n$ und alle $A \in \mathcal{A}$.

Das Mass λ stimmt also auf Riemann-messbaren Mengen mit dem Riemannschen Volumen überein. Das Mass λ heisst *Lebesgue-Mass*.

Sei X eine Menge und \mathcal{A} eine σ -Algebra für X . Eine Funktion $f : X \rightarrow \mathbb{R} \cup \{\infty\}$ heisst *messbar*, falls das Urbild $f^{-1}((a, \infty])$ von $(a, \infty] \subset \mathbb{R}$ für alle $a \in \mathbb{R}$ in \mathcal{A} liegt. Der Begriff der Messbarkeit bezieht sich somit nur auf eine σ -Algebra und nicht auf ein Mass. Eine Funktion heisst *elementar* oder *simpel*, falls sie von der Form

$$f = \sum_{k=1}^N f_k \chi_k$$

($f_k \in \mathbb{R}$) ist. Dabei ist N endlich und die Funktionen χ_k sind die charakteristischen Funktionen auf Mengen $A_1, \dots, A_N \in \mathcal{A}$. Wichtig für die Definition von Integralen ist das folgende Resultat: Für jede messbare, nicht-negative Funktion f existiert eine Folge punktweise monoton wachsender Elementarfunktionen, die punktweise gegen f konvergiert. Das heisst, jede nicht-negative Funktion f kann beliebig genau durch Elementarfunktionen approximiert werden.

Sei (X, \mathcal{A}, μ) ein Massraum. Das Integral einer messbaren Funktion f über X wird mit dem *Symbol*

$$\int_X f d\mu$$

bezeichnet. Es ist folgendermassen definiert: In einem ersten Schritt definieren wir

$$f_+(x) := \begin{cases} f(x), & \text{falls } f(x) > 0 \\ 0, & \text{sonst} \end{cases}$$

und

$$f_-(x) := \begin{cases} -f(x), & \text{falls } f(x) < 0 \\ 0, & \text{sonst.} \end{cases}$$

Demnach gilt: $f = f_+ - f_-$, wobei f_+ und f_- nicht-negative Funktionen sind. Man definiert

$$\int_X f d\mu := \int_X f_+ d\mu - \int_X f_- d\mu.$$

Nun sollte also das Integral nicht-negativer Funktionen g definiert werden. Zuvor haben wir erwähnt, dass nicht-negative Funktionen durch Elementarfunktionen punktweise beliebig genau approximiert werden können. Dies motiviert

$$\int_X g d\mu := \sup \left\{ \int_X s d\mu : s \text{ ist eine Elementarfunktion so dass } 0 \leq s(x) \leq g(x) \right\}.$$

Die Integration von Elementarfunktionen $s = \sum_{n=1}^N s_n \chi_n$ ist definiert über

$$\int_X s d\mu := \sum_{n=1}^N s_n \mu(A_n).$$

Für komplex-wertige Funktionen $f = f_1 + if_2$ ist das Integral definiert durch

$$\int_X f d\mu := \int_X f_1 d\mu + i \int_X f_2 d\mu$$

Noch eine Bemerkung zur Notation: Wenn wir einen Ausdruck der Form $m d\mu$ hinschreiben, meinen wir das Mass bzgl. dem das Integral einer Funktion f die Form

$$\int f \cdot m d\mu$$

hat, wobei $d\mu$ dem Mass μ entspricht. Wie üblich in der Analysis werden wir anstelle von $d\lambda$ (das Integrationssymbol des Lebesgueschen Masses) häufig dx verwenden.

Wir schliessen diesen Abschnitt mit dem Lebesgueschen Zerlegungssatz von allgemeinen Massen auf \mathbb{R} . Dafür sind aber noch drei Definitionen ausstehend: Erstens, sei (X, \mathcal{A}, μ) wie zuvor ein Massraum. Ein Mass $\mu_{ac} : \mathcal{A} \rightarrow \mathbb{R}$ heisst *absolut-stetig* bzgl. dem Mass μ , falls $\mu(A) = 0$ die Gleichung $\mu_{ac}(A) = 0$ impliziert für alle $A \in \mathcal{A}$. Zweitens, ein Mass μ_{sc} ist *singulär-stetig* bzgl. dem Mass μ , falls sich der Träger des Masses μ_{sc} aus μ -Nullmengen zusammensetzt. Drittens, ein Mass ist *diskret*, falls sein Support höchstens abzählbar ist. Diskrete Masse ξ mit Träger auf der Menge $\{x_k\}_{k=1}^N$ können als Linearkombination von Dirac-Massen geschrieben werden:

$$\xi(A) = \sum_{k=1}^N p_k \delta_{x_k}(A).$$

Insbesondere darf $N = \infty$ sein. Falls wir das Referenzmass für Absolutstetigkeit und Singulärstetigkeit nicht explizit angeben, meinen wir Absolutstetigkeit und Singulärstetigkeit bzgl. dem Lebesgue-Mass λ .

Theorem 1.1.1 (Lebesguescher Zerlegungssatz). *Sei μ ein Borelsches Wahrscheinlichkeitsmass auf \mathbb{R} . Dann existieren $N \leq \infty$ reelle Zahlen $\{\lambda_i\}_{i=1}^N$, N positive Zahlen $\{p_n\}_{n=1}^N$, ein bzgl. dem Lebesgue-Mass absolut-stetiges Mass μ_{ac} und ein bzgl. dem Lebesgue-Mass singulär-stetiges Mass μ_{sc} , so dass*

$$\mu = \sum_{n=1}^N p_n \delta_{\lambda_n} + \mu_{ac} + \mu_{sc}$$

(*ac.* steht für *absolut continuous*; *sc.* für *singular continuous*).

Gemäss dem Satz von Radon und Nikodym existiert eine positive, Lebesgue-messbare Funktion $m : \mathbb{R} \rightarrow [0, \infty)$, so dass

$$\mu_{ac}(A) = \int_A m(\lambda) d\lambda$$

für jede Lebesgue-messbare Menge A .

1.2 Hilberträume

In diesem Abschnitt formulieren wir die wichtigsten Definitionen, welche in Beziehung stehen zu den in der Quantenmechanik auftretenden unendlich-dimensionalen Räumen. Die algebraische Behandlung von unendlich-dimensionalen Räumen (d.h. Mathematik ohne die Bildung von Grenzwerten)

ist nicht sehr ertragreich. Eine sehr viel spannendere Theorie entsteht, wenn man Methoden aus der Algebra, der Analysis (und der Topologie) kombiniert. Eine auf diese Weise resultierende grundlegende Struktur ist der Banachraum, welcher eine Kombination eines komplexen Vektorraums und eines vollständigen metrischen Raums ist:

Definition 1.3. Ein *Banachraum* ist ein komplexer oder reeller Vektorraum V mit einer Norm bzgl. derer V vollständig ist.

Beispiel 1.4. Der Raum $C(\mathbb{R})$ der stetigen, reellen Funktionen von \mathbb{R} nach \mathbb{R} sind ein Banachraum bzgl. der Norm

$$\|f\| := \max_{x \in \mathbb{R}} |f(x)|.$$

Nun kommen wir zur Definition der sogenannten Hilberträume. Diese (häufig unendlich-dimensionalen) Vektorräume bilden die direkte Verallgemeinerung der endlichdimensionalen Vektorräume \mathbb{R}^n und \mathbb{C}^n , die man aus der Vorlesung ‘Lineare Algebra’ kennt. Sie sind spezielle Banachräume, für die das nicht-lineare Objekt, die Norm, ausgedrückt wird durch ein lineares Objekt, das Skalarprodukt.

Definition 1.4. Ein Hilbertraum \mathcal{H} ist ein Banachraum, auf dem ein Skalarprodukt definiert ist, so dass

$$\|v\| = \sqrt{\langle v, v \rangle}.$$

Es ist das Skalarprodukt, das uns erlaubt geometrische Intuition aus endlichdimensionalen Räumen in Hilberträumen zu gebrauchen (wenigstens bis zu einem gewissen Grad). In einem Hilbertraum über den reellen Zahlen ist es sogar möglich den *Winkel* ϕ zwischen zwei Elementen v und w über

$$\cos \phi := \frac{\langle v, w \rangle}{\|v\| \|w\|}$$

zu definieren, da das Skalarprodukt in diesem Fall reellwertig ist. Auch wenn dieser Ausdruck für komplexe Hilberträume nicht mehr sinnvoll ist, gibt es dennoch den Begriff der Orthogonalität: Zwei Elemente v und w heißen *orthogonal*, falls $\langle v, w \rangle = 0$.

Eine Familie orthonormaler Elemente $\{v_i\}_i$ heisst *vollständig*, falls kein Element $w \in \mathcal{H}$ existiert, das verschieden ist vom Nullvektor, und das orthogonal ist zu allen Elementen von $\{v_i\}_i$. In diesem Fall bildet das System $\{v_i\}_i$ im folgendem Sinn eine Basis des Hilbertraums \mathcal{H} :

Satz 1.1. Sei \mathcal{H} ein Hilbertraum, $\{v_i\}_{i \in I}$ ($I \subset \mathbb{N} \cup \infty$) ein vollständiges orthonormales System (VONS) und sei $v \in \mathcal{H}$ beliebig. Dann gilt: die Reihe

$$\sum_{i \in I} \langle v_i, v \rangle v_i$$

konvergiert nach v in der Norm von \mathcal{H} .

(Beweis: [Reed80] Seite 45.) Es gilt zu beachten, dass *ein VONS im algebraischen Sinn keine Basis des Hilbertraums definiert! Der Raum der endlichen Linearkombinationen von Elementen des VONS füllen nicht den gesamten Raum aus.* Weiter gilt, dass jeder Hilbertraum vollständige, orthonormierte Systeme enthält. Alle diese Systeme haben gleiche Kardinalität.

Anstelle von “VONS” werden in der Literatur auch die Begriffe “orthonormale Hilbertbasis” oder einfach “orthonormale Basis” verwendet. Wir werden uns ausschliesslich mit separablen Hilberträumen beschäftigen. *Separable Hilberträume* \mathcal{H} sind Hilberträume, die eine abzählbar-unendliche Teilmenge enthalten, die dicht ist in \mathcal{H} . Folglich besitzen diese Räume vollständige, orthonormierte Systeme, die *abzählbar* sind.

Beispiel 1.5. Wir definieren den Raum l_2 als den Raum der abzählbar-unendlichen Folgen $\{x_j\}_{j=1}^{\infty}$ von komplexen Zahlen mit der Eigenschaft

$$\sum_{j=1}^{\infty} |x_j|^2 < \infty.$$

Auf l_2 lässt sich über

$$\langle \{x_j\}_j, \{y_j\}_j \rangle := \sum_{j=1}^{\infty} \bar{x}_j y_j$$

ein Skalarprodukt definieren. Alle separablen Hilberträume sind isomorph zum Hilbertraum l_2 .

Eine Bijektion von einem metrischen Raum in einen anderen, der die Abstände erhält, heisst *Isometrie*. Eine Abbildung L von einem Hilbertraum \mathcal{H} in die komplexen Zahlen heisst *lineares Funktional*, falls

$$L(\lambda_1 v_1 + \lambda_2 v_2) = \lambda_1 L(v_1) + \lambda_2 L(v_2)$$

für alle $\lambda_1, \lambda_2 \in \mathbb{C}$ und für alle $v_1, v_2 \in \mathcal{H}$. Eine Abbildung L von einem Hilbertraum \mathcal{H} in die komplexen Zahlen heisst *stetiges lineares Funktional*, falls L ein lineares Funktional ist mit der Eigenschaft

$$L(v_i) \rightarrow L(v)$$

für jede Folge $\{v_j\}_{j=1}^{\infty}$, die in der durch das Skalarprodukt induzierten Norm nach v konvergiert. Der Raum der *stetigen linearen Funktionalen* auf \mathcal{H} ist der zu \mathcal{H} gehörende *Dualraum* \mathcal{H}^* .

1.2.1 Inäquivalenz von Normen

Ein in unendlich-dimensionalen Räumen neu auftretendes Phänomen ist die Inäquivalenz von Normen. Zwei Normen $\|\cdot\|_1$ und $\|\cdot\|_2$ auf einem Raum X heissen *äquivalent*, falls positive, endliche Konstanten C_1 und C_2 existieren, so dass

$$C_1 \|x\|_1 \leq \|x\|_2 \leq C_2 \|x\|_1$$

für alle $x \in X$. Wenn also eine Folge bzgl. einer Norm konvergiert, konvergiert sie auch bzgl. jeder äquivalenten Norm. In endlich-dimensionalen Räumen sind alle

Normen äquivalent, so dass nicht für jede Konvergenz spezifiziert werden muss, bzgl. welcher Norm die Konvergenz Gültigkeit hat. In unendlich-dimensionalen Räumen gilt die Äquivalenz der Normen nicht mehr! Konvergenz bzgl. einer bestimmten Norm impliziert also *nicht* die Konvergenz bzgl. jeder anderen Norm. Dies führt dazu, dass bei der Formulierung von Sätzen in der Funktionalanalysis häufig angegeben werden muss, bzgl. welcher Norm diese und jene Eigenschaft Gültigkeit hat. Besonders oft werden die Begriffe starke Konvergenz und schwache Konvergenz verwendet.

Definition 1.5. Sei \mathcal{H} ein Hilbertraum und $\{v_j\}_{j=1}^{\infty}$ eine unendliche Folge in \mathcal{H} . Dann konvergiert die Folge $\{v_j\}_{j=1}^{\infty}$ *stark* gegen $v \in \mathcal{H}$, falls sie in der durch das Skalarprodukt induzierten Norm konvergiert (Symbolisch: $v_j \xrightarrow{s} v$). Die Folge $\{v_j\}_{j=1}^{\infty}$ konvergiert *schwach* gegen $v \in \mathcal{H}$, falls

$$\lim_{j \rightarrow \infty} L(v_j) = L(v)$$

für alle $L \in \mathcal{H}^*$ (Symbolisch: $v_j \xrightarrow{w} v$).

1.2.2 Der Raum $L^2(\mathbb{R}^n, d\mu)$

Die Raum $L^p(\mathbb{R}^n, d\mu)$, $p \geq 1$, von Funktionen von \mathbb{R}^n nach \mathbb{C} sind definiert über

$$L^p(\mathbb{R}^n, d\mu) := \{f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{C} \mid f \text{ ist } \mu\text{-messbar und } |f|^p \text{ ist } \mu\text{-integrierbar}\}.$$

Es sind Vektorräume. Um dies zu sehen, muss man zeigen, dass komplexe Linearkombinationen $\mu_1 f + \mu_2 g$ von Funktionen $f, g \in L^p(\mathbb{R}^n, d\mu)$ wieder in $L^p(\mathbb{R}^n, d\mu)$ liegen. Dies ist eine direkte Konsequenz der Ungleichung $|a + b|^p \leq 2^{p-1}(|a|^p + |b|^p)$. Auf $L^p(\mathbb{R}^n, d\mu)$ definiert man die Norm

$$\|f\|_p := \left(\int_{\mathbb{R}^n} |f|^p d\mu \right)^{1/p}$$

(die Dreiecksungleichung entspricht dann der Minkowski-Ungleichung, die aus der Analysis-Vorlesung bekannt sein dürfte). Wir werden im folgenden für das Mass $d\mu$ meist das Lebesguesche Mass benutzen und dieses mit dx bezeichnen. Die Vektorräume $L^p(\mathbb{R}^n, d\mu)$ sind vollständig in der Norm $\|\cdot\|_p$ und haben somit die Struktur von Banachräumen. Alle diese Banachräume sind separierbar, d.h., sie enthalten eine dichte (bzgl. der Norm $\|\cdot\|_p$) Teilmenge, die abzählbar ist.

Für uns wird nur der Raum $L^2(\mathbb{R}^n, d\mu)$ von Bedeutung sein, weil sich für diesen das Skalarprodukt

$$\langle f, g \rangle := \int_{\mathbb{R}^n} dx \overline{f(x)} g(x)$$

finden lässt, welches die Norm $\|f\|_2$ über $\|f\|_2^2 = \langle f, f \rangle$ induziert. Der Banachraum $L^2(\mathbb{R}^n, d\mu)$ hat also die Struktur eines *separierbaren Hilbertraums*.

1.3 Operatoren

Sei \mathcal{H} ein Hilbertraum (also z.B. $\mathcal{H} = L^2(\mathbb{R}^n, dx)$, wobei dx dem Lebesgue-Mass entspricht). Wie eine reelle Funktion $f : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ ein Definitionsbereich $\mathcal{D}(f) \subset \mathbb{R}$ hat, hat eine Abbildung von \mathcal{H} auf sich einen Definitionsbereich.

Definition 1.6. Ein *linearer Operator* eines Hilbertraums \mathcal{H} ist das Paar $(A, \mathcal{D}(A))$. Dabei bezeichnet A eine lineare Abbildung

$$A : \mathcal{D}(A) \rightarrow \mathcal{H}, \quad \psi \mapsto A\psi,$$

und $\mathcal{D}(A)$ ist ein dichter linearer Unterraum in \mathcal{H} . Der Raum $\mathcal{D}(A)$ heisst *Definitionsbereich von A* . Sei $(B, \mathcal{D}(B))$ ein zweiter linearer Operator auf \mathcal{H} . Die Operatoren $(A, \mathcal{D}(A))$ und $(B, \mathcal{D}(B))$ sind gleich, symbolisch $A = B$, falls $A\psi = B\psi$ für alle $\psi \in \mathcal{D}(A)$ und $\mathcal{D}(A) = \mathcal{D}(B)$.

Die hier benützte Schreibweise $(A, \mathcal{D}(A))$ ist nicht üblich und soll nur verdeutlichen, wie wichtig die Angabe des Definitionsbereichs eines Operators ist. Von nun an werden wir aber (der Bequemlichkeit halber) nur noch in der Form “ A ” auf den Operator $(A, \mathcal{D}(A))$ verweisen. Des weiteren ist die Annahme, dass $\mathcal{D}(A)$ dicht ist in \mathcal{H} nicht Standard. In unserer Abhandlung wird diese Annahme jedoch immer erfüllt sein.

Definition 1.7. Sei A ein linearer Operator auf einem Hilbertraum \mathcal{H} . Der Operator B heisst *positiv*, falls $\langle \psi, B\psi \rangle \geq 0$ für alle $\psi \in \mathcal{H}$. Man benützt in diesem Fall die Notation $B \geq 0$ und $B \leq A$, falls $A - B \geq 0$.

Definition 1.8. Der zu $(A, \mathcal{D}(A))$ *adjungierte* Operator $(A^*, \mathcal{D}(A^*))$ ist folgendermassen definiert: Sei $\tilde{\psi} \in \mathcal{H}$ ein Vektor, so dass

$$\langle \psi, A\phi \rangle = \langle \tilde{\psi}, \phi \rangle$$

für alle $\phi \in \mathcal{D}(A)$. Die Menge der Vektoren $\psi \in \mathcal{H}$ für welche ein solches $\tilde{\psi} \in \mathcal{H}$ existiert, bilden den Definitionsbereich $\mathcal{D}(A^*)$ des adjungierten Operators A^* . Auf $\mathcal{D}(A^*)$ ist A^* über

$$A^*\psi = \tilde{\psi}$$

definiert. Dieser Operator ist eindeutig.

Nun folgen die Begriffe “Hermitesch” und “selbstadjungiert”, deren Definitionen (anders als im endlich-dimensionalen) sich unterscheiden.

Definition 1.9. Ein Operator $(A, \mathcal{D}(A))$ ist *Hermitesch*, falls

$$\langle \phi, A\psi \rangle = \langle A\phi, \psi \rangle$$

für alle $\phi, \psi \in \mathcal{D}(A)$, d.h. $A^*\phi = A\phi$ für alle $\phi \in \mathcal{D}(A)$. Ein Operator $(B, \mathcal{D}(B))$ ist *selbstadjungiert*, falls B Hermitesch ist und $\mathcal{D}(B) = \mathcal{D}(B^*)$. Ein Operator T heisst *normal*, falls

$$TT^* = T^*T$$

erfüllt ist.

Wir bemerken, dass jeder selbstadjungierte Operator Hermitesch ist, die Umkehrung im Allgemeinen aber falsch ist. So ist der Impulsoperator aus den folgenden Beispielen zwar Hermitesch aber nicht selbstadjungiert. Jeder selbstadjungierte Operator ist normal.

Beispiel 1.6. Der Ortsoperator x (siehe nächstes Kapitel) eines Teilchens mit Konfigurationsraum \mathbb{R} ist der Operator “Multiplikation mit x ” auf $L^2(\mathbb{R}, dx)$,

$$(x\psi)(x) := x \cdot \psi(x)$$

für alle $x \in \mathbb{R}$. Es lässt sich zeigen, dass $\mathcal{D}(x)$ dicht liegt in \mathcal{H} .

Beispiel 1.7. Der Impulsoperator p (siehe nächstes Kapitel) eines Teilchens mit Konfigurationsraum \mathbb{R} ist der Operator $\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x}$ auf $L^2(\mathbb{R}, dx)$. Der zugehörige maximale Definitionsbereich ist

$$\mathcal{D}(p) = \{ \psi \in L^2(\mathbb{R}, dx) \mid \psi' \in L^2(\mathbb{R}, dx) \}.$$

Beispiel 1.8. Der betrachtete Hilbertraum sei $L^2([0, 1], dx)$ und wir setzen als Nebenbedingung, dass $\psi(0) = \psi(1) = 0$. Der Definitionsbereich dieses Operators ist somit

$$\mathcal{D}(p) = \{ \psi \in L^2([0, 1], dx) \mid \psi' \in L^2([0, 1], dx) \text{ und } \psi(0) = \psi(1) = 0 \}.$$

Der Impulsoperator $p = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x}$ ist Hermitesch, weil

$$\langle \phi, p\psi \rangle - \langle p\phi, \psi \rangle = \int_0^1 dx \bar{\phi}(x) p\psi(x) - \overline{p\phi(x)} \psi(x) = \frac{\hbar}{i} [\bar{\phi}\psi]_0^1 = 0.$$

Des Weiteren zeigt diese Rechnung, dass $\mathcal{D}(p) \subset \mathcal{D}(p^*)$, da beispielsweise jede konstante Funktion $\phi = c, c > 0$ in $\mathcal{D}(p^*)$ aber nicht in $\mathcal{D}(p)$ liegt.

Definition 1.10. Die *Operatornorm* $\|A\|$ eines Operators A ist definiert durch

$$\|A\| := \sup_{0 \neq \psi \in \mathcal{H}} \frac{\|A\psi\|}{\|\psi\|}.$$

Ein Operator heisst *beschränkt*, falls seine Norm beschränkt ist, d.h. $\|A\| < \infty$. Andernfalls heisst A *unbeschränkt*. Den Raum der beschränkten Operatoren bezeichnen wir mit $\mathcal{B}(\mathcal{H})$.

Beachte, dass beschränkte Operatoren $(A, \mathcal{D}(A))$ auf dem gesamten Hilbertraum definiert werden können, d.h. $\mathcal{D}(A) = \mathcal{H}$.

Viele mathematische Probleme in der Quantenmechanik rühren daher, dass auftretende Operatoren unbeschränkt sind. Beispiele sind der Ortsoperator x und der Impulsoperator p .

Definition 1.11. Ein beschränkter linearer Operator von einem Banachraum in einen anderen heisst *Isomorphismus*, falls er bijektiv und stetig ist und eine stetige Inverse hat. Falls zusätzlich die Norm erhalten ist, ist dieser Operator ein sog. *isometrischer Isomorphismus*.

Definition 1.12. Zwei Hilberträume \mathcal{H}_1 und \mathcal{H}_2 sind *isomorph*, falls ein linearer Operator U existiert der \mathcal{H}_1 surjektiv auf \mathcal{H}_2 abbildet mit der Eigenschaft

$$\langle Ux, Uy \rangle_{\mathcal{H}_2} = \langle x, y \rangle_{\mathcal{H}_1}$$

für alle $x, y \in \mathcal{H}_1$. In diesem Fall ist U ein *unitärer* Operator.

Allgemeine quantenmechanische Zustände können durch sog. kompakte Operatoren dargestellt werden.

Definition 1.13. Ein beschränkter Operator $T : \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}$ heisst *kompakt*, falls die Folge $\{T\psi_n\}_n$ für jede beschränkte Folge $\{\psi_n\}_n$ eine in \mathcal{H} konvergente Teilfolge enthält.

Theorem 1.3.1 (Hilbert-Schmidt Theorem). *Sei A ein kompakter, selbstadjungierter Operator auf einem Hilbertraum \mathcal{H} . Dann gilt: es existiert ein VONS $\{\psi_n\}_n$ in \mathcal{H} , so dass*

$$A\psi_n = \lambda_n\psi_n,$$

wobei $\lambda_n \rightarrow 0$ für $n \rightarrow \infty$.

Beweis: siehe Seite 203 in [Reed80]. Zum Schluss noch einen Satz auf welchen wir im Rahmen der Streutheorie verweisen werden.

Satz 1.2 (Neumann Reihen). Sei T ein Operator mit der Eigenschaft $|\lambda| > \|T\|$ (Operatornorm). Dann gilt:

$$\frac{1}{\lambda - T} = \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{\lambda} \left(1 + \sum_{k=1}^N \left(\frac{T}{\lambda} \right)^k \right),$$

wobei die Konvergenz bzgl. der Operatornorm verstanden werden muss.

1.3.1 Konvergenzbegriffe für Operatoren

Im Abschnitt über Hilberträume haben wir gelernt, dass zwei Normen auf unendlich-dimensionalen Räumen im Allgemeinen nicht äquivalent sind. Der (Banach-)Raum $\mathcal{L}(\mathcal{H})$ der linearen Operatoren von einem Hilbertraum \mathcal{H} auf sich ist ein Beispiel eines unendlich-dimensionalen Raums. Folglich ist für jede Konvergenz zu spezifizieren bzgl. welcher Norm die Konvergenz formuliert ist. Wir geben nun die drei häufigsten Konvergenz-Begriffe im Raum $\mathcal{L}(\mathcal{H})$ an.

Definition 1.14. Drei häufig verwendete Konvergenz-Begriffe für Folgen im Banachraum $\mathcal{L}(\mathcal{H})$:

- (i) Unter *Konvergenz in der Operatornorm* verstehen wir die Konvergenz bzgl. der Norm

$$\|T\| = \sup_{\psi \neq 0} \frac{\|T\psi\|_{\mathcal{H}}}{\|\psi\|_{\mathcal{H}}}.$$

- (ii) Eine Folge von linearen Operatoren $\{T_n\}_n$ *konvergiert stark* (symbolisch: $T_n \xrightarrow{s} T$ oder $s\text{-}\lim_{n \rightarrow \infty} T_n = T$) gegen T , falls

$$\|T_n\psi - T\psi\|_{\mathcal{H}} \rightarrow 0$$

für alle $\psi \in \mathcal{H}$.

- (iii) Eine Folge von linearen Operatoren $\{T_n\}_n$ *konvergiert schwach* (symbolisch: $T_n \xrightarrow{w} T$ oder $w\text{-}\lim_{n \rightarrow \infty} T_n = T$) gegen T , falls

$$|l(T_n\psi) - l(T\psi)| \rightarrow 0$$

für alle $\psi \in \mathcal{H}$ und für alle $l \in \mathcal{H}^*$. Da \mathcal{H} ein Hilbertraum ist, bedeutet $T_n \xrightarrow{w} T$, dass alle Matrixelemente $\langle \phi, T_n\psi \rangle$ gegen $\langle \phi, T\psi \rangle$ konvergieren.

1.3.2 Das Stonesche Theorem

Definition 1.15. Eine Familie von Operatoren $\{U(t)\}_{t \in \mathbb{R}}$ heisst stark-stetige, 1-parametrische, unitäre Gruppe auf \mathcal{H} , falls

- (i) Der Operator $U(t)$ ist unitär für alle $t \in \mathbb{R}$ (Unitarität).
- (ii) $U(t+s) = U(t)U(s)$ für alle $s, t \in \mathbb{R}$ (1-parametrische Gruppe).
- (iii) $U(t) \xrightarrow{s} U(t_0)$ für $t \rightarrow t_0$ (Stark-Stetigkeit).

Wie das später folgende Spektraltheorem ist das Stonesche Theorem von zentraler Bedeutung für die Quantenmechanik. Insbesondere wird es in unserer Begründung für die Schrödinger Gleichung eine zentrale Rolle einnehmen.

Theorem 1.3.2 (Stone). (I) Sei A ein selbstadjungierter Operator auf \mathcal{H} und $U(t) := e^{-itA}$. Dann gilt:

- (i) $U(t)$ ist unitär $\forall t \in (\mathbb{R})$ und für alle Zeiten t, s gilt:

$$U(t)U(s) = U(t+s).$$

- (ii) $U(t)$ ist stark stetig in t .

- (iii) Für alle $\psi \in \mathcal{D}(A)$ gilt:

$$\frac{i}{t}(U(t)\psi - \psi) \xrightarrow[t \rightarrow 0]{s} A\psi,$$

und somit:

$$i \frac{\partial}{\partial t} U(t)\psi = AU(t)\psi.$$

- (iv) Falls

$$s\text{-}\lim_{t \rightarrow 0} \frac{i}{t}(U(t)\psi - \psi)$$

existiert, dann ist $\psi \in \mathcal{D}(A)$.

(II) Sei $\{U(t)\}_{t \in \mathbb{R}}$ eine stark-stetige, 1-parametrische, unitäre Gruppe auf \mathcal{H} . Dann existiert ein selbstadjungierter Operator A auf \mathcal{H} mit der Eigenschaft, dass

$$U(t) := e^{-itA}.$$

für alle $t \in \mathbb{R}$.

1.4 Fourier Transformation

Fouriertransformationen sind ein essentielles Werkzeug für die Behandlung quantenmechanischer Systeme. Ziel dieses Abschnitts ist es, die grundlegendsten Eigenschaften von Fouriertransformationen in Erinnerung zu rufen. Der Nutzen von Fouriertransformationen liegt darin begründet, dass sie es erlauben die Operationen Ableitung und Faltung in Multiplikationsoperatoren zu verwandeln. Im folgenden bezeichnet $\mathcal{S}(\mathbb{R}^n)$ den Schwartz-Raum über \mathbb{R}^n , und $\mathcal{S}'(\mathbb{R}^n)$ bezeichnet den zu $\mathcal{S}(\mathbb{R}^n)$ dualen Raum.

Definition 1.16. Sei $f \in \mathcal{S}(\mathbb{R}^n)$. Die *Fourier Transformation* \hat{f} von f ist definiert durch

$$\hat{f}(\mathbf{k}) := \frac{1}{(2\pi\hbar)^{n/2}} \int_{\mathbb{R}^n} e^{-\frac{i}{\hbar}\mathbf{x}\cdot\mathbf{k}} f(\mathbf{x}) d\mathbf{x},$$

wobei $\mathbf{x}\cdot\mathbf{k} = \sum_{i=1}^n x_i k_i$. Die *inverse Fourier Transformation* \check{f} von f ist definiert durch

$$\check{f}(\mathbf{x}) := \frac{1}{(2\pi\hbar)^{n/2}} \int_{\mathbb{R}^n} e^{\frac{i}{\hbar}\mathbf{x}\cdot\mathbf{k}} f(\mathbf{k}) d\mathbf{k}.$$

Theorem 1.4.1 (Fourier Theorem). *Die Fourier Transformation ist eine lineare Bijektion von $\mathcal{S}(\mathbb{R}^n)$ nach $\mathcal{S}(\mathbb{R}^n)$. Die zur Fourier Transformation inverse Abbildung ist die inverse Fourier Transformation, d.h.*

$$f = \hat{\hat{f}} = \check{\check{f}}.$$

(Beweis: [Reed80] Seite 320.) Die Fourier Transformation kann für Funktionen definiert werden, für welche die zuvor definierten Integrale gar keinen Sinn ergeben; sie lässt sich auf grössere Räume von Funktionen erweitern. Insbesondere existiert eine Erweiterung der Fourier Transformation für Funktionen in $L^2(\mathbb{R}^n, dx)$. Damit wird die Fourier Transformation zu einem zentralen Werkzeug in der Quantenmechanik. Da die definierenden Integrale für L^2 -Funktionen nicht definiert sein müssen, muss man die Fourier Transformation als Grenzwert von L^1 -Funktionen definieren. All dies ist Inhalt des folgenden Theorems.

Theorem 1.4.2 (Plancherel Theorem). *Die Fourier Transformation kann von $\mathcal{S}(\mathbb{R}^n)$ auf eindeutige Art und Weise zu einer unitären Abbildung von $L^2(\mathbb{R}^n, dx)$ auf $L^2(\mathbb{R}^n, dx)$ erweitert werden. Die inverse Fourier Transformation wird zur Adjungierten der Fourier Transformation. Zur expliziten Berechnung der Fourier Transformation von Funktionen f in $L^2(\mathbb{R}^n, dx)$ konstruiert man in $L^1(\mathbb{R}^n, dx)$ eine Folge $\{f_n\}$ von Funktionen, die in der Norm $\|\cdot\|_2$ gegen f konvergiert. Die Fourier Transformation der Funktion f ist dann der $\|\cdot\|_2$ -Limes der Folge $\{\hat{f}_n\}$.*

(Beweis: [Reed80] Seite 327.) Zur expliziten Berechnung der Fourier Transformation einer L^2 -Funktion f benötigen wir also eine Folge von L^1 -Funktionen, die in der Norm $\|\cdot\|_2$ gegen f konvergiert. Konkret kann dies in der Form

$$\hat{f}(\mathbf{k}) = \lim_{R \rightarrow \infty} \frac{1}{(2\pi\hbar)^{n/2}} \int_{\|\mathbf{x}\| \leq R} e^{-\frac{i}{\hbar}\mathbf{x}\cdot\mathbf{k}} f(\mathbf{x}) d\mathbf{x}.$$

realisiert werden, wobei “lim” der Limes in der $\|\cdot\|_2$ -Norm bedeutet. (Beachte, dass für jede L^2 -Funktion f die Funktion

$$f_R(\mathbf{x}) := \chi_{\{\|\mathbf{x}\| \leq R\}} f(\mathbf{x})$$

eine L^1 -Funktion ist, die im Limes $R \rightarrow \infty$ gegen f konvergiert.)

Die *Faltung* zweier Funktionen f und g auf \mathbb{R}^n ist definiert durch

$$(f * g)(\mathbf{x}) := \int_{\mathbb{R}^n} d\mathbf{y} f(\mathbf{x} - \mathbf{y})g(\mathbf{y}).$$

Weitere Eigenschaften der Fourier Transformation:

$$(i) (f \cdot g)^\wedge(\mathbf{k}) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{n/2}}(\hat{f} * \hat{g})(\mathbf{k}),$$

$$(ii) \overline{\hat{f}(\mathbf{k})} = (\bar{f})^\wedge(-\mathbf{k}),$$

$$(iii) \left(\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x_j} f\right)^\wedge(\mathbf{k}) = k_j \hat{f}(\mathbf{k}),$$

$$(iv) (x_j f)^\wedge(\mathbf{k}) = i\hbar \frac{\partial}{\partial k_j} \hat{f}(\mathbf{k}).$$

Im Rahmen der Streutheorie werden wir auf das Riemann-Lebesgue Lemma verweisen:

Theorem 1.4.3 (Riemann-Lebesgue Lemma). *Die Fourier Transformation kann von $\mathcal{S}(\mathbb{R}^n)$ auf eindeutige Art und Weise zu einer beschränkten Abbildung von $L^1(\mathbb{R}^n, dx)$ nach $C_\infty(\mathbb{R}^n)$ (d.h. die stetigen Funktionen, die im Unendlichen verschwinden) erweitert werden.*

(Beweis: [Reed80] Seite 327.)

1.5 Direkte Summen und Tensorprodukte

In diesem Abschnitt beschreiben wir, wie man aus zwei Hilberträumen \mathcal{H}_1 und \mathcal{H}_2 neue Hilberträume konstruieren kann.

Definition 1.17. Seien \mathcal{H}_1 und \mathcal{H}_2 zwei Hilberträume. Die *direkte Summe* $\mathcal{H}_1 \oplus \mathcal{H}_2$ ist die Menge aller Paare (x, y) mit $x \in \mathcal{H}_1$ und $y \in \mathcal{H}_2$. Diese Menge wird zu einem Hilbertraum, wenn wir das Skalarprodukt gemäss

$$\langle (x_1, y_1), (x_2, y_2) \rangle := \langle x_1, x_2 \rangle_{\mathcal{H}_1} + \langle y_1, y_2 \rangle_{\mathcal{H}_2}$$

definieren.

Es gibt verschiedene Varianten das Tensorprodukt einzuführen (in der linearen Algebra wird es häufig mit Hilfe der sog. universellen Eigenschaft definiert). Wir wählen hier einen sehr direkten Zugang.

Seien \mathcal{H}_1 und \mathcal{H}_2 zwei Hilberträume und $\phi_1 \in \mathcal{H}_1$ und $\phi_2 \in \mathcal{H}_2$. Dann definieren wir das Symbol $\phi_1 \otimes \phi_2$ als die bilineare Form

$$\phi_1 \otimes \phi_2(\psi_1, \psi_2) := \langle \psi_1, \phi_1 \rangle \langle \psi_2, \phi_2 \rangle$$

auf $\mathcal{H}_1 \times \mathcal{H}_2$. Weiter definieren wir den linearen Raum V als den Raum der endlichen Linearkombinationen von Elementen aus $\{\phi_1 \otimes \phi_2 \mid \phi_1 \in \mathcal{H}_1, \phi_2 \in \mathcal{H}_2\}$. Auf V lässt sich durch lineare Erweiterung der Definition

$$\langle \alpha \otimes \beta, \gamma \otimes \delta \rangle := \langle \alpha, \gamma \rangle_{\mathcal{H}_1} \langle \beta, \delta \rangle_{\mathcal{H}_2}$$

ein Skalarprodukt auf V definieren.

Definition 1.18. Das *Tensorprodukt* $\mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2$ ist die Vervollständigung des soeben eingeführten Vektorraums V in der durch das Skalarprodukt definierten Norm.

Wenn $\{\psi_k\}_k$ und $\{\phi_j\}_j$ VONS in \mathcal{H}_1 und \mathcal{H}_2 sind, so realisiert $\{\psi_k \otimes \phi_j\}_{k,j}$ ein VONS in $\mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2$. Des weiteren ist die Operation “ \otimes ” bilinear:

- (i) $(\phi_1 + \phi_2) \otimes \psi = \phi_1 \otimes \psi + \phi_2 \otimes \psi$,
- (ii) $(\lambda\phi) \otimes \psi = \lambda(\phi \otimes \psi)$,
- (iii) $\phi \otimes (\psi_1 + \psi_2) = \phi \otimes \psi_1 + \phi \otimes \psi_2$,
- (iv) $\phi \otimes (\lambda\psi) = \lambda(\phi \otimes \psi)$.

Für die Räume quadratintegrabler Funktionen gilt der folgende Satz, der für die Quantenmechanik zusammengesetzter Systeme und für die Behandlung von Teilchen mit Spin von grosser Bedeutung ist.

Satz 1.3. Für die Räume quadratintegrabler Funktionen gilt:

- (i) Es existiert ein eindeutiger unitärer Isomorphismus von $L^2(\mathbb{R}^n, dx) \otimes L^2(\mathbb{R}^m, dy)$ nach $L^2(\mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^m, dxdy)$, so dass $f(x) \otimes g(y) \mapsto f(x)g(y)$.
- (ii) Es existiert ein eindeutiger unitärer Isomorphismus von $L^2(\mathbb{R}^n, dx) \otimes \mathbb{C}^m$ nach

$$\bigoplus_{k=1}^m L^2(\mathbb{R}^n, dx),$$

so dass $f(x) \otimes g \mapsto f(x)g$.

(Beweis: [Reed80] Seite 52.)

Definition 1.19. Seien $\mathcal{H}_1, \mathcal{H}_2$ Hilberträume, $\{\phi_j\}_j \subset \mathcal{H}_1, \{\psi_k\}_k \subset \mathcal{H}_2$ VONS und $A_1 \in \mathcal{B}(\mathcal{H}_1), A_2 \in \mathcal{B}(\mathcal{H}_2)$ beschränkte Operatoren. Dann ist das Tensorprodukt $A_1 \otimes A_2$ ein linearer Operator auf $\mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2$, der durch

$$(A_1 \otimes A_2) \left(\sum_{i,j} c_{ij} \phi_i \otimes \psi_j \right) = \sum_{i,j} c_{ij} ((A_1 \phi_i) \otimes (A_2 \psi_j)).$$

definiert wird.

Der Operator $A_1 \otimes A_2$ ist beschränkt,

$$\|A_1 \otimes A_2\| = \|A_1\| \cdot \|A_2\|$$

in der Operatornorm, und

$$(A_1 \otimes A_2)^* = A_1^* \otimes A_2^*.$$

1.6 Bemerkungen zum Spektraltheorem

Das Spektraltheorem wird uns eine vollständige Beschreibung aller selbstadjungierter Operatoren liefern. Der Fakt, dass die Observablen in der Quantenmechanik als selbstadjungierte Operatoren dargestellt werden, und dass die experimentellen Messwerte mit Elementen des Spektrums dieser selbstadjungierten Operatoren übereinstimmen, unterstreicht die Wichtigkeit des Spektraltheorems für die Quantenmechanik. Es existieren zahlreiche Möglichkeiten das Spektraltheorem zu formulieren. Wir liefern hier nur eine davon, für welche wir projektorwertige Masse einführen müssen.

1.6.1 Projektorwertige Masse und Integration

Im vorliegenden Abschnitt erklären wir, wie man eine Funktion bzgl. einem sog. projektorwertigen Mass integriert. Wie im Falle der üblichen Integration ist dieses Integral über den Limes einer Folge von integrierten Elementarfunktionen definiert. Dabei beschränkt sich die Beschreibung auf den Fall beschränkter Operatoren. Die Idee hinter der spektralen Darstellung unbeschränkter Operatoren ist dieselbe. Die tatsächliche Diskussion unbeschränkter Operatoren ist aber mathematisch subtiler und findet hier keinen Platz.

Definition 1.20. Ein Projektor S ist ein linearer Operator mit der Eigenschaft $S^2 = S$. Ein Projektor S ist ein orthogonaler Projektor, falls zusätzlich $S = S^*$ gilt.

Für die Operatornorm eines Projektors gilt offenbar $\|S\| = 1$, ausser wenn $S = 0$.

Definition 1.21. Sei \mathcal{A} eine σ -Algebra auf \mathbb{R} . Ein *projektorwertiges Mass* P ist eine Abbildung

$$P : \mathcal{A} \rightarrow \mathcal{B}(\mathcal{H}), \quad P : \Delta \rightarrow P_\Delta,$$

welche die folgenden Eigenschaften aufweist:

- (i) $P_\Delta^2 = P_\Delta, P_\Delta^* = P_\Delta$ für alle $\Delta \in \mathcal{A}$,
- (ii) $P_\emptyset = 0, P_{\Delta=(-a,a)} = \mathbb{I}$ für ein $a \in \mathbb{R}$,
- (iii) Es sei $\Delta = \bigcup_n \Delta_n$ mit $\Delta_i \cap \Delta_j = \emptyset$ für $i \neq j$. Dann gilt: die Summe aller Operatoren P_{Δ_n} konvergiert in der Operatornorm gegen P_Δ :

$$P_\Delta = \lim_{N \rightarrow \infty} \sum_{n=1}^N P_{\Delta_n}.$$

Beachte, wie sehr die Definition der projektorwertigen Masse der Definition des üblichen Mass-Begriffs gleicht. Aus den Eigenschaften projektorwertiger Masse lässt sich die Identität

$$P_{\Delta_1} P_{\Delta_2} = P_{\Delta_1 \cap \Delta_2}$$

ableiten. Des weiteren wird über jedes projektorwertige Mass P und über jeden normierten Vektor $\phi \in \mathcal{H}$ ein Wahrscheinlichkeitsmass auf \mathbb{R} definiert:

$$\Delta \mapsto \langle \phi, P_\Delta \phi \rangle$$

Eine naheliegende Frage ist, ob es möglich ist eine Funktion f bzgl. einem projektorwertigen Mass zu integrieren. Dies ist in der Tat der Fall. Das Resultat ist ein Operator auf \mathcal{H} , der mit dem Symbol

$$\int f dP$$

bezeichnet wird. Dieses Symbol definiert man nahezu gleich wie im Falle der üblichen Integration. Man benötigt dazu aber die Definition der Norm $\|\cdot\|_{\text{ess}}$:

Definition 1.22. Sei \mathcal{A} eine σ -Algebra auf \mathbb{R} , P ein *projektorwertiges Mass*, f eine reellwertige, \mathcal{A} -messbare Funktion, N die Familie derjenigen offenen Mengen $D \subset \mathbb{R}$ mit der Eigenschaft, dass $P_{f^{-1}(D)} = 0$, und $T := \bigcup_{D \in N} D \subset \mathbb{R}$. Dann ist der *wesentliche Wertebereich* von f die Menge $\mathbb{R} \setminus T$. Die Funktion f heisst *wesentlich beschränkt*, falls der wesentliche Wertebereich von f beschränkt ist. In diesem Fall existiert das wesentliche Supremum $\|f\|_{\text{ess}}$ von f , das über

$$\|f\|_{\text{ess}} := \sup\{|\lambda| \in \mathbb{R} \mid \lambda \text{ liegt im wesentlichen Wertebereich von } f\}.$$

Das wesentliche Supremum ist eine Norm für die Funktionen f .

Streng genommen ist $\|\cdot\|_{\text{ess}}$ erst dann eine Norm, wenn man Funktionen f und g identifiziert, falls $f = g + h$ mit $\|h\|_{\text{ess}} = 0$. Darauf gehen wir aber nicht weiter ein. Wir haben die Grösse $\|f\|_{\text{ess}}$ mit “ess” indiziert, weil der wesentliche Wertebereich im Englischen “essential range” heisst.

Nehme nun an, die Funktion f sei eine Funktion von \mathbb{R} nach \mathbb{R} , und dass wir über eine Menge $X \subseteq \mathbb{R}$ integrieren möchten. In einem ersten Schritt definieren wir

$$f_+(x) := \begin{cases} f(x), & \text{falls } f(x) > 0 \\ 0, & \text{sonst} \end{cases}$$

und

$$f_-(x) := \begin{cases} -f(x), & \text{falls } f(x) < 0 \\ 0, & \text{sonst.} \end{cases}$$

Demnach gilt: $f = f_+ - f_-$, wobei f_+ und f_- nicht-negative Funktionen sind. Nun definiert man

$$\int_X f dP := \int_X f_+ dP - \int_X f_- dP.$$

Als nächstes sollte also das Integral nicht-negativer g Funktionen definiert werden. Für jede nicht-negative Funktion g existiert eine Folge $\{g_k\}_k$ von Elementarfunktionen, die in der $\|\cdot\|_{\text{ess}}$ -Norm gegen g konvergiert. Das Integral ist dann definiert als

$$\int_X g dP := \lim_{k \rightarrow \infty} \int_X g_k dP$$

(Konvergenz bzgl. der Operatornorm), wobei

$$\int_X g_k dP := \sum_{\Delta \in \mathcal{C}} g_{\Delta}^{(k)} P_{\Delta}$$

für

$$g_k = \sum_{\Delta \in \mathcal{C}} g_{\Delta}^{(k)} \chi_{\Delta}$$

(\mathcal{C} bezeichnet die zur Elementarfunktion $g^{(k)}$ gehörende Partition von \mathbb{R}).

1.6.2 Die Definition des Spektrums

Definition 1.23. Sei T eine linearer Operator auf einem Hilbertraum \mathcal{H} . Dann gilt: Das *Spektrum* $\sigma(T)$ von T ist die Menge

$$\sigma(T) := \mathbb{C} \setminus \rho(T)$$

wobei

$$\rho(T) := \{\lambda \in \mathbb{C} \mid T - \lambda \mathbb{I} \text{ ist eine Bijektion, deren Inverse beschränkt ist}\}.$$

Typischerweise ist eine der folgenden Eigenschaften eines Operators T dafür verantwortlich, dass $T - \lambda$ nicht invertierbar ist (d.h. kein beschränkter inverser Operator zu $T - \lambda$ existiert):

- (i) Die Gleichung $(T - \lambda)\psi = 0$ hat eine Lösung $\psi \neq 0$ in \mathcal{H} . In diesem Fall nennt man ψ eine *Eigenvektor* von T zum *Eigenwert* λ .
- (ii) Die Gleichung $(T - \lambda)\psi = 0$ hat "beinahe" eine Lösung $\psi \neq 0$ in \mathcal{H} in dem Sinn, dass eine Weyl-Folge (siehe nachfolgende Definition) $\{\psi_n\}_{n=1}^{\infty} \subset \mathcal{H}$ für T und λ existiert.

Definition 1.24 (Weyl Folge). Sei T ein selbstadjungierter, Schrödingerscher Operator und $E \in \sigma(T)$ beliebig. Dann ist eine Folge $\{\psi_n\}_{n=0}^{\infty}$ eine *Weyl Folge* zu T für $\lambda \in \sigma(T)$, falls

$$\begin{aligned} \|\psi_n\| &= 1, \quad \forall n \\ \int_{|x| \leq R} |\psi_n(x)|^2 d^3x &\rightarrow 0, \quad \text{für } n \rightarrow \infty, \quad \forall R < \infty \\ \|(T - \lambda)\psi_n\| &\rightarrow 0, \quad \text{für } n \rightarrow \infty. \end{aligned} \quad (1.1)$$

Definition 1.25. Das *Punktspektrum* eines Operators T ist die Menge

$$\sigma_p(T) = \{\lambda \in \mathbb{C} \mid \lambda \text{ ist ein isolierter Eigenwert endlicher Multiplizität}\}, \quad (1.2)$$

wobei ein Eigenwert λ isoliert ist, falls eine offene Umgebung $\lambda \in \mathbb{C}$ existiert, die keine weiteren *Eigenwerte* enthält. Die Multiplizität eines Eigenwerts ist die Dimension des Kerns der Abbildung $(T - \lambda)$.

Mit Hilfe des weiter unten folgenden Spektraltheorems lässt sich zeigen, dass jedes isolierte Element des Spektrums (d.h. es existiert eine offene Umgebung dieses Elements, die keine weiteren Elemente des Spektrums enthält) ein Eigenwert ist.

Definition 1.26. Das *kontinuierliche Spektrum* eines Operators T ist die Menge

$$\sigma_c(T) = \{\lambda \in \mathbb{C} \mid \text{Es existiert eine Weyl-Folge für } T \text{ und } \lambda\}. \quad (1.3)$$

Satz 1.4 (Weyl Kriterium). Sei T ein selbstadjungierter Operator. Dann gilt:

$$\sigma(T) = \sigma_p(T) \cup \sigma_c(T). \quad (1.4)$$

Die Zerlegung (1.4) des Spektrums ist im allgemeinen *nicht* disjunkt.

Das Spektrum ist im unendlich-dimensionalen Fall sehr viel schwieriger zu verstehen als im endlich-dimensionalen Fall: Im endlich-dimensionalen Fall besteht das Spektrum ausschliesslich aus Eigenwerten, d.h. für jede Zahl $\lambda \in \sigma(T)$ existiert ein Vektor $v \in \mathbb{C}^n$, so dass

$$Tv = \lambda v.$$

Dies trifft im unendlich-dimensionalen Fall nicht mehr zu! Natürlich gilt, dass jeder Eigenwert des Operators T im Spektrum $\sigma(T)$ liegt. Die Aussage, dass jedes Element des Spektrums ein Eigenwert ist, ist jedoch falsch.

Beispiel 1.9. Auf dem Folgenraum l_2 definieren wir den Operator T als

$$T(x_1, x_2, x_3, \dots) := (0, x_1, x_2, x_3, \dots).$$

Der Operator T verschiebt also alle Folgenglieder um eine Position nach rechts. Dieser Operator hat keine Eigenwerte. Sein Spektrum ist jedoch nicht-leer:

$$\sigma(T) = \{\lambda \in \mathbb{C} \mid |\lambda| \leq 1\}.$$

Diese Behauptungen werden in den Übungen bewiesen.

Das Spektrum eines selbstadjungierten Operators S ist reell:

$$\sigma(S) \subset \mathbb{R}.$$

Das Spektrum eines unitären Operators U liegt auf dem Einheitskreis in \mathbb{C} :

$$\sigma(U) \subset \{z \in \mathbb{C} \mid |z| = 1\}.$$

Satz 1.5. Das Spektrum eines kompakten Operators besteht aus abzählbarvielen nicht-verschwindenden Eigenwerten endlicher Multiplizität und der Zahl 0 (immer ein Element des Spektrums), die kein Eigenwert zu sein braucht. Falls doch, muss dieser Eigenwert $\lambda = 0$ nicht gezwungenermaßen endliche Multiplizität haben.

Dieser Satz ist eine Konsequenz des Hilbert-Schmidt Theorems.

1.6.3 Das Spektraltheorem

Nun sind wir in der Lage das für die Quantenmechanik fundamentale Spektraltheorem zu formulieren. Eine Einführung in die Spektraltheorie findet sich beispielsweise in [Rudin73].

Theorem 1.6.1 (Spektraltheorem). *Jeder selbstadjungierte Operator A auf einem Hilbertraum \mathcal{H} bestimmt ein projektorwertiges Mass $P_\Delta^{(A)}$, die sog. spektralen Projektoren, mit der Eigenschaft, dass*

$$A = \int_{\mathbb{R}} \lambda dP^{(A)}.$$

Dieses Theorem versetzt uns in die Lage Funktionen von selbstadjungierten Operatoren zu bilden, beinahe als ob diese skalare Größen wären: Sei g eine messbare Funktion von \mathbb{R} nach \mathbb{R} . Dann gilt:

$$g(A) = \int_{\mathbb{R}} g(\lambda) dP^{(g(A))}, \quad P_\Delta^{(g(A))} = P_{g^{-1}(\Delta)}^{(A)}$$

und

$$g(A)^* = \bar{g}(A).$$

Seien g_1 und g_2 Funktionen von \mathbb{R} nach \mathbb{R} . Dann gilt:

$$(g_1 \cdot g_2)(A) = g_1(A) \cdot g_2(A).$$

Weiter gilt:

$$B := g_1(A) + ig_2(A)$$

ist auf ganz $\mathcal{D}(A)$ definiert und vertauscht mit seiner Adjungierten

$$B^* = g_1(A) - ig_2(A).$$

Beispiel 1.10. Sei A ein selbstadjungierter Operator. Dann gilt:

$$e^{itA} = \cos(tA) + i \sin(tA)$$

und

$$(e^{itA})^* = \cos(tA) - i \sin(tA) = e^{-itA}.$$

Wir nennen ein projektorwertiges Mass P *absolut-stetig*, falls das auf \mathbb{R} induzierte Wahrscheinlichkeitsmass

$$\langle \phi, P_{(\cdot)} \phi \rangle : \Delta \mapsto [0, 1]$$

absolut-stetig ist. (Die Mengen Δ sind Elemente der σ -Algebra \mathcal{A} über \mathbb{R} bzgl. derer das projektorwertige Mass definiert ist.) Das projektorwertige Mass P heisst *singulär-stetig*, falls das auf \mathbb{R} induzierte Wahrscheinlichkeitsmass singulär-stetig ist. Nun kommen wir zum Analogon des Lebesgueschen Zerlegungssatzes für Spektralmasse selbstadjungierter Operatoren.

Satz 1.6. Sei A ein selbstadjungierter Operator auf einem separablem Hilbertraum \mathcal{H} . Dann existiert

- (i) eine Familie orthogonaler Projektoren $\{P_n\}_{n=1}^N$, $0 \leq n \leq \infty$, so dass $P_n P_m = 0$ für $n \neq m$ und

$$\sum_{n=1}^N P_n \leq 1,$$

- (ii) reelle Zahlen $\{\lambda_n\}_{n=1}^N$, so dass $-\infty < \lambda_1 < \lambda_2 < \dots < \lambda_N < \infty$,

- (iii) und projektorwertige Masse P^{ac} und P^{sc}

mit der Eigenschaft

$$A = \sum_{n=1}^N \lambda_n P_n + \int_{\mathbb{R}} \lambda dP^{\text{ac}} + \int_{\mathbb{R}} \lambda dP^{\text{sc}}.$$

(Notation wie im Lebesgueschen Zerlegungssatz). Für Rechnungen in der Quantenmechanik ist $P^{\text{sc}} = 0$. Die Bilder der Projektoren $\sum_{n=1}^N P_n$, P_{Δ}^{ac} und P_{Δ}^{sc} sind *orthogonal* zueinander. Die Zahlen $\{\lambda_n\}_{n=1}^N$ sind die *Eigenwerte* von A . Man sagt, dass ein Eigenwert λ_n *k-fach entartet* ist, falls das Bild des Projektors P_n k -dimensional ist.

1.7 Algebren

Wir beginnen mit der Repetition der Definition von Algebren und gehen dann direkt über zur Definition von $*$ -Algebren und C^* -Algebren. Die algebraische Struktur, die ihrerseits eine Verschärfung der Vektorraum-Struktur ist, wird weiter präzisiert. In einem ersten Schritt geht man von der Existenz einer Abbildung aus, die man Konjugation nennt. Es entsteht eine $*$ -Algebra. In einem zweiten Schritt kombiniert man diese $*$ -algebraische Struktur mit derjenigen eines *Banachraums*. Es muss hier betont werden, dass die Theorie hinter diesen Begriffen sehr tief ist. Wir führen hier nur die Definitionen ein.

Definition 1.27 (Algebra). Eine *Algebra* A ist ein Vektorraum mit einer Abbildung $A \times A \rightarrow A$, die man Multiplikation nennt und folgende Eigenschaften erfüllen muss:

- (i) $a(b + c) = ab + ac$
- (ii) $(ab)c = a(bc)$
- (iii) $a(\lambda b) = \lambda ab$
- (iv) Es existiert ein Einselement $\mathbb{1}$ für die Multiplikation, d.h. $a\mathbb{1} = \mathbb{1}a = a$ für alle $a \in A$.

für alle $a, b, c \in A$ und alle $\lambda \in \mathbb{C}$.

Das Beispiel für alle Definitionen dieses Abschnitts ist der Vektorraum $M_n(\mathbb{C})$ der komplexen $(n \times n)$ -Matrizen. Dieser wird mit der Matrixmultiplikation zu einer Algebra.

Definition 1.28. Eine $*$ -Algebra ist eine Algebra A zusammen mit einer Abbildung $A \rightarrow A$, die man *Konjugation* nennt und folgende Eigenschaften erfüllen muss:

- (i) $(ab)^* = b^*a^*$
- (ii) $(a + b)^* = a^* + b^*$
- (iii) $(\lambda a)^* = \bar{\lambda}a^*$
- (iv) $a^{**} = a$

für alle $a, b \in A$ und alle $\lambda \in \mathbb{C}$. Das Element a^* nennt man die *Adjungierte* zu a .

Die Algebra $M_n(\mathbb{C})$ bildet mit der Definition $S^* := \bar{S}^T$ der Konjugation eine $*$ -Algebra.

Ein Element a einer $*$ -Algebra A heisst *normal*, falls $aa^* = a^*a$, *Hermiteisch*, falls $a = a^*$, *unitär* falls $aa^* = a^*a = \mathbb{1}$ und *positiv*, falls $a = bb^*$ für ein $b \in A$. Element a ist die *Inverse* von b , falls $ab = ba = \mathbb{1}$ (Notation: $a = b^{-1}$).

Definition 1.29. Eine C^* -Algebra ist eine $*$ -Algebra und ein Banachraum deren Elemente die folgenden Forderungen erfüllen:

- (i) $\|ab\| \leq \|a\|\|b\|$
- (ii) $\|a^*\| = \|a\|$
- (iii) $\|aa^*\| = \|a\|\|a^*\|$
- (iv) $\|\mathbb{1}\| = 1$

für alle $a, b \in A$ und alle $\lambda \in \mathbb{C}$. Das Element a^* nennt man die *Adjungierte* zu a .

Die Algebra $M_n(\mathbb{C})$ der komplexen $n \times n$ -Matrizen ist bzgl. der Operatornorm ein vollständiger Raum und bildet eine C^* -Algebra.

Definition 1.30. Das Spektrum eines Elements a einer Algebra W ist die Menge

$$\sigma(a) := \{z \in \mathbb{C} \mid (a - z)^{-1} \text{ existiert nicht in } W\}.$$

Für das Spektrum von Elementen a einer *-Algebra prüft man leicht nach, dass

$$\sigma(a^*) = \overline{\sigma(a)}.$$

Für Hermitesche Elemente h folgt somit

$$\sigma(h) \subset \mathbb{R}.$$

Für positive Elemente p gilt

$$\sigma(p) \geq 0$$

(der Beweis dieser Eigenschaft ist aufwendiger).

1.8 Spur, Spurklasse, Hilbert-Schmidt Operatoren

Der in Kürze definierte Begriff der Spur verallgemeinert die Definition der Spur auf endlich-dimensionalen Räumen (Summe der Diagonalelemente). Zur Definition gehen wir ähnlich vor wie bei der Definition des Integrals einer Funktion: wir definieren die Spur erst für positive Operatoren. Zumindest selbstadjungierte Operatoren C lassen sich mit Hilfe des Spektraltheorems in einen positiven und einen negativen Teil C_+ und C_- aufspalten. Für die Spur des selbstadjungierten Operators C gilt dann $\text{tr } C = \text{tr } C_+ - \text{tr } C_-$, wie man sich dies von der Definition des Integrals gewohnt ist. Die Familie derjenigen linearen Operatoren A , für welche $\text{tr } |A| < \infty$ ($|A| := \sqrt{A^*A}$) gilt, fasst man unter dem Begriff Spurklasse \mathcal{J}_1 zusammen. Die Spurklasse \mathcal{J}_1 entspricht somit dem Raum $L^1(\mathbb{R}^n, \mu)$. Die Spur $\text{tr}(\cdot)$ realisiert auf \mathcal{J}_1 ein lineares Funktional. Dieses entspricht der linearen Abbildung, die das Integral auf $L^1(\mathbb{R}^n, \mu)$ realisiert. Nach der Darstellung von Eigenschaften der Spurklasse folgt die Betrachtung des Raumes der Hilbert-Schmidt Operatoren, der dem Raum $L^2(\mathbb{R}^n, d\mu)$ entspricht, und der mit der Struktur eines Hilbertraums versehen werden kann. Sämtliche Beweise können in Abschnitt VI.6 in [Reed80] nachgeschlagen werden.

Definition 1.31. Sei \mathcal{H} ein separabler Hilbertraum und $\{\psi_k\}_{k=1}^\infty$ ein VONS in \mathcal{H} . Für jeden positiven linearen Operator A definieren wir

$$\text{tr } A := \sum_{k=1}^{\infty} \langle \psi_k, A\psi_k \rangle.$$

Die im allgemeinen komplexe Zahl $\text{tr } A$ heisst *Spur von A*.

Für *positive* Operatoren gilt: Die Spur ist unabhängig von der Wahl des VONS, die Spur ist linear,

$$\text{tr}(\lambda_1 A_1 + \lambda_2 A_2) = \lambda_1 \text{tr } A_1 + \lambda_2 \text{tr } A_2$$

($\lambda_1, \lambda_2 \geq 0$), die Spur ist invariant unter der Konjugation mit unitärer Operatoren U ,

$$\text{tr}(UAU^{-1}) = \text{tr } A,$$

und $0 \leq A \leq B$ impliziert

$$\operatorname{tr} A \leq \operatorname{tr} B.$$

Definition 1.32. Die Familie der linearen Operatoren A mit der Eigenschaft $\operatorname{tr} |A| < \infty$ nennt man *Spurklasse* \mathcal{J}_1 .

Theorem 1.8.1. Sei $A \in \mathcal{J}_1$ und B ein allgemeiner linearer Operator. Dann gilt:

- (i) \mathcal{J}_1 ist ein Vektorraum.
- (ii) $AB \in \mathcal{J}_1$ und $BA \in \mathcal{J}_1$, d.h. \mathcal{J}_1 ist ein Ideal im Raum der linearen Operatoren.
- (iii) $A^* \in \mathcal{J}_1$.
- (iv) $\operatorname{tr} A^* = \overline{\operatorname{tr} A}$.
- (v) $\operatorname{tr} AB = \operatorname{tr} BA$.
- (vi) $\|A\|_1 := \operatorname{tr} |A|$ definiert eine Norm auf \mathcal{J}_1 bzgl. derer \mathcal{J}_1 vollständig ist. Der Raum \mathcal{J}_1 bildet mit dieser Norm also einen Banachraum.

Für Operatoren der Spurklasse lässt sich die sog. partielle Spur definieren, die man benützt, um den Zustand von Teilsystemen zu ermitteln.

Definition 1.33. Seien $\mathcal{H}_A, \mathcal{H}_B$ separable Hilberträume und R, S Operatoren der Spurklasse auf \mathcal{H}_A resp. \mathcal{H}_B . Dann ist die *partielle Spur* tr_B des Operators $R \otimes S$ bzgl. dem Hilbertraum \mathcal{H}_B definiert als

$$\operatorname{tr}_B (R \otimes S) = R \otimes \operatorname{tr}_B S.$$

Die Definition der partielle Spur allgemeiner linearer Operatoren der Spurklasse auf $\mathcal{H}_A \otimes \mathcal{H}_B$ folgt dann über lineare Erweiterung dieser Operation.

Soviel zur Spurklasse. Nun gehen wir über zur Diskussion des Raumes der Hilbert-Schmidt Operatoren \mathcal{J}_2 , der dem Raum $L^2(\mathbb{R}^n, d\mu)$ entspricht. Wie im Fall von $L^2(\mathbb{R}^n, d\mu)$ lässt sich für den Raum \mathcal{J}_2 ein Skalarprodukt finden, so dass \mathcal{J}_2 zu einem Hilbertraum wird.

Definition 1.34. Ein linearer Operator heisst *Hilbert-Schmidt*, falls $\operatorname{tr} T^*T < \infty$. Der Raum der Hilbert-Schmidt Operatoren wird mit \mathcal{J}_2 bezeichnet.

Theorem 1.8.2. Sei $A, B \in \mathcal{J}_2$ und C ein allgemeiner linearer Operator. Dann gilt:

- (i) \mathcal{J}_2 ist ein Vektorraum.
- (ii) $AC \in \mathcal{J}_2$ und $CA \in \mathcal{J}_2$, d.h. \mathcal{J}_2 ist ein Ideal im Raum der linearen Operatoren.
- (iii) $A^* \in \mathcal{J}_2$.

(iv) Sei $\{\psi_k\}_{k=1}^\infty$ ein VONS in \mathcal{H} . Dann gilt: Bzgl. dem Skalarprodukt

$$\langle A, B \rangle_2 := \text{tr}(A^*B) = \sum_{k=1}^{\infty} \langle \psi_k, A^*B\psi_k \rangle$$

und der dadurch induzierten Norm $\|A\|_2 := \sqrt{\text{tr}(A^*A)}$ ist \mathcal{J}_2 ein Hilbertraum.

(v) Die Definition des Skalarprodukts $\langle \cdot, \cdot \rangle_2$ ist unabhängig vom gewählten VONS.

(vi) $\mathcal{J}_1 \subset \mathcal{J}_2$

(vii) Alle Operatoren in \mathcal{J}_2 sind kompakte Operatoren.

Das unter Punkt (iv) eingeführte Skalarprodukt ist endlich, weil die rechte Seite von

$$2\langle A, B \rangle = \langle A + B, A + B \rangle - \langle A, A \rangle - \langle B, B \rangle$$

für $A, B \in \mathcal{J}_2$ endlich ist.

1.9 Die bra-ket Notation

Es folgt eine kurze Schilderung einer Variante von Diracs bra-ket Notation. Dazu identifiziert man jeden Vektor $\psi \in \mathcal{H}$ mit einer linearen Abbildung $|\psi\rangle$ (genannt *ket*) von \mathbb{C} nach \mathcal{H} definiert durch

$$|\psi\rangle : \mathbb{C} \rightarrow \mathcal{H}, \alpha \mapsto \alpha \cdot \psi.$$

Die Adjungierte $|\psi\rangle^*$ wird mit dem Symbol $\langle\psi|$ bezeichnet (genannt *bra*). Die Abbildung $\langle\psi|$ ist also die lineare Abbildung

$$\langle\psi| : \mathcal{H} \rightarrow \mathbb{C}, \phi \mapsto \langle\psi, \phi\rangle$$

($\phi \in \mathcal{H}$) und damit ein Element des Dualraums \mathcal{H}^* . Die Komposition $\langle\psi| \circ |\phi\rangle$ ist also die Abbildung $\mathbb{C} \rightarrow \mathbb{C}, \alpha \mapsto \langle\psi, \phi\rangle \cdot \alpha$, was dazu führt, dass man die Zahl $\langle\psi, \phi\rangle \in \mathbb{C}$ mit der konstanten Abbildung $\langle\psi||\phi\rangle$ identifiziert:

$$\langle\psi|\phi\rangle := \langle\psi||\phi\rangle \equiv \langle\psi, \phi\rangle \in \mathbb{C}.$$

Andererseits ist die Komposition $|\psi\rangle \circ \langle\phi| := |\psi\rangle\langle\phi|$ eine Abbildung von \mathcal{H} auf sich selbst (oder allgemeiner von \mathcal{H}_1 nach \mathcal{H}_2 , falls $\phi \in \mathcal{H}_1$ und $\psi \in \mathcal{H}_2$). Jede lineare Abbildung S kann formal in der Form

$$S = \sum_i |\beta_i\rangle\langle\alpha_i|$$

geschrieben werden. Sei $\{\gamma_j\}_j$ ein VONS in \mathcal{H} . In diesem Fall ist es üblich die Identität auf \mathcal{H} formal in der Form

$$\mathbb{I} = \sum_j |\psi_j\rangle\langle\psi_j|$$

darzustellen.

Kapitel 2

Die grundlegende Struktur

Ziel dieses Kapitels ist die Beschreibung der heutzutage üblichen Form der Quantenmechanik *spinloser Punktteilchen*. Wir beginnen dafür mit einer kurzen Repetition der klassischen Mechanik, um die Parallelen zwischen der Theorie hinter der klassischen Mechanik und der Theorie hinter der Quantenmechanik zu betonen. Diese Parallelen sind durchaus kein Zufall, da die klassische Theorie aus der quantenmechanischen Theorie hervorgehen muss, und weil sich die Erfinder der Quantenmechanik stark von Analogien mit der klassischen Mechanik leiten liessen. Wir wollen diese Parallelen nutzen, um eine gewisse Motivation für die mathematische Struktur der Quantenmechanik zu liefern. Dabei gehen wir von zwei grundlegenden *Annahmen* aus:

- (i) Die Mathematische Struktur der Quantenmechanik ist die Verallgemeinerung der mathematischen Struktur der klassischen Mechanik (abelsche C^* -Algebra, Zustände als positive, normierte, lineare Funktionale).
- (ii) Die Observablen “Ort” q und “Impuls” p gehorchen der Vertauschungsrelation

$$[x, p] = i\hbar.$$

2.1 Eine algebraische Betrachtung der klassischen Mechanik

In diesem Abschnitt schildern wir eine Sichtweise der klassischen Mechanik, in der die Parallelen zwischen klassischer Mechanik und Quantenmechanik augenfällig werden. Unter “algebraischer Betrachtung” verstehen wir die Arbeit auf dem Raum der Observablen, der zu einer *Algebra* erweitert werden kann.

2.1.1 Klassische Kinematik

Dieser Abschnitt ist den Begriffen “Zustand” und “Observable” im Rahmen der klassischen Mechanik gewidmet. Zu Beginn einer Mechanik-Vorlesung wird der Zustand eines Punktteilchens im dreidimensionalen Raum als einen Punkt im Phasenraum beschrieben, d.h. durch das Paar $(p, q) \in \mathbb{R}^6$ von Impuls und Ort. Entsprechend ist der Zustand von N Punktteilchen ein Punkt im

Phasenraum \mathbb{R}^{6N} . Diese Definition von “Zustand” werden wir in Kürze verallgemeinern. Zustände der Form (p, q) nennen wir *reine Zustände*. Vorerst sind Observable (salopp formuliert) mathematische Grössen, die jedem Zustand eine Zahl zuordnen, die mit dem experimentellen Messresultat dieser Observablen übereinstimmt. Da die reinen Zustände in der klassischen Mechanik durch die Orts- und Impulskoordinaten eindeutig determiniert werden, sind Observable Funktionen der Orts- und Impulskoordinaten und somit Funktionen auf dem Phasenraum. Die möglichen Messwerte einer Observablen entsprechen dem Wertebereich der Funktion, welche dieser Observablen zugeordnet ist. Dieser Wertebereich ist das sog. *Spektrum* dieser Observable. Beispielsweise ist der Impuls p eine Observable, die für den Zustand (p, q) eines Teilchens auf der reellen Achse den numerischen Wert p liefert. Ein alternatives Beispiel ist die freie Hamiltonfunktion der Form $H(p, q) = p^2$ für ein freies Teilchen auf der reellen Achse. Für den Zustand (p, q) erhalten wir den numerischen Wert $H(p, q) = p^2$.

Damit man in der Lage ist Mathematik zu betreiben, muss man spezifizieren, aus welcher Klasse von Funktionen die Funktionen stammen, die die Observablen des Systems realisieren. Üblicherweise wählt man eine der folgenden Funktionenklassen:

- (i) Polynomiale Funktionen $\text{Pol}(\mathbb{R}^{2n})$,
- (ii) analytische Funktionen $C^\omega(\mathbb{R}^{2n})$,
- (iii) glatte Funktionen $C^\infty(\mathbb{R}^{2n})$ oder glatte Funktionen mit kompaktem Träger $C_0^\infty(\mathbb{R}^{2n})$,
- (iv) stetige Funktionen $C(\mathbb{R}^{2n})$ oder stetige Funktionen mit kompaktem Träger $C_0(\mathbb{R}^{2n})$,
- (v) integrierbare Funktionen wie beispielsweise $L^p(\mathbb{R}^{2n})$,

und viele mehr. Die Zahl n bezeichnet die Anzahl der Freiheitsgrade. Welche Klasse man wählt, hängt von der konkreten Fragestellung ab. Die Klasse der Funktionen sollte nicht zu klein sein, damit wichtige Observablen (wie zum Beispiel die Hamiltonfunktion) in der Funktionenklasse liegen. Weiter gilt es, den Wertebereich der Funktionen zu spezifizieren. Naheliegend ist natürlich die Wahl von reellwertigen Funktionen, da die experimentellen Messergebnisse meist reelle Zahlen sind. Es ist jedoch nicht verboten, auch komplexwertige Funktionen zuzulassen, wenn dies wünschenswert ist. Im experimentellen Sinne observabel sind dann aber natürlich nur die reellwertigen Funktionen, $f = \bar{f}$. Wir entscheiden uns für die folgende Form der Observablenalgebra.

Definition 2.1. Die klassische Observablenalgebra eines Systems mit n Freiheitsgraden ist die abelsche C^* -Algebra $C(\mathbb{R}^{2n})$ der komplexwertigen stetigen Funktionen auf dem Phasenraum (Vollständigkeit bzgl. der sup-Norm). Das assoziative Produkt und die Addition dieser Algebra sind das punktweise Produkt und die punktweise Addition der Funktionen. Die Konjugation “ $*$ ” ist die punktweise komplexe Konjugation der Funktionen.

In der statistischen Mechanik geht man dazu über Systeme zu beschreiben, von denen unsere Kenntnis nur mangelhaft ist.

Beispiel 2.1. Wir betrachten ein Punktteilchen dessen tatsächlicher Zustand (p_0, q_0) unbekannt ist. Wir wissen lediglich, dass sich der Zustand des Teilchens irgendwo im Phasenraum-Volumen $[0, 2] \times [0, 2] \subset \mathbb{R}^2$ aufhält. Diesen Wissensstand beschreiben wir über ein Wahrscheinlichkeitsmass $d\mu(p, q)$, das definiert ist als

$$d\mu(p, q) = \frac{1}{4} \chi_{[0,2] \times [0,2]}(p, q) dpdq.$$

Die Wahrscheinlichkeit, dass sich der Zustand des Teilchens im Phasenraum-Volumen $[1, 5] \times [1, 5]$ aufhält, ist dann durch

$$\int_{[1,5] \times [1,5]} d\mu(p, q) = \int_{[1,5] \times [1,5]} \frac{1}{4} \chi_{[0,2] \times [0,2]}(p, q) dpdq = \frac{1}{4}$$

gegeben.

Dieses Beispiel führt uns auf den folgenden allgemeineren Zustandsbegriff.

Definition 2.2. Der *klassische Zustand* eines mechanischen Systems ist ein Wahrscheinlichkeitsmass $\mu(p, q)$ auf dem Phasenraum.

Der reine Zustand (p, q) eines klassischen Systems ist ein Spezialfall dieses neuen Zustandsbegriffs: das zugehörige Wahrscheinlichkeitsmass ist das Dirac-Mass $\delta_{(p,q)}$. *Beachte, dass ein sinnvoller Zustandsbegriff die Wahrscheinlichkeitsmasse auf den Spektren aller Messgrößen determinieren muss!* Dies ist hier der Fall: sei $f(p, q)$ eine beliebige Observable. Dann ist die Wahrscheinlichkeit, dass $f(p, q) \in [a, b]$ gegeben durch

$$\int_{f^{-1}([a,b])} d\mu(p, q),$$

wobei $f^{-1}([a, b])$ das Urbild des Intervalls $[a, b]$ bezeichnet. Nun kommen wir zu zwei Parametern, welche den Zuständen (d.h. also den Wahrscheinlichkeitsmassen) zugeordnet werden können.

Definition 2.3. Nehme an das System befinde sich in einem zum Wahrscheinlichkeitsmass $\mu(p, q)$ gehörenden Zustand. Der *Erwartungswert* $E_\mu(f)$ einer Observablen f ist dann definiert durch

$$E_\mu(f) := \int f(p, q) d\mu(p, q).$$

Die *Standardabweichung* $(\Delta f)_\mu$ einer Observablen f im Zustand $d\mu(p, q)$ ist definiert durch

$$(\Delta f)_\mu := \sqrt{E_\mu((f - E_\mu(f))^2)} = \sqrt{E_\mu(f^2) - E_\mu(f)^2}.$$

Man erwartet, dass der Erwartungswert mit dem Mittelwert einer unendlichen Messreihe übereinstimmt, falls diese Messreihe aus Experimenten hervor geht, bei denen dieselbe Observable am identischen System mit gleichem Anfangszustand immer wieder von neuem gemessen wird. Die Standardabweichung ist ein Mass dafür wie stark die experimentell ermittelten Messergebnisse um den Erwartungswert schwanken. Für reine Zustände macht man sich leicht klar, dass die Standardabweichung immer Null ist.

Wir beobachten, dass die Zuordnung

$$f \in C(\mathbb{R}^{2n}) \mapsto E_\mu(f) = \int f(p, q) d\mu(p, q)$$

linear ist. Des weiteren gilt natürlich, dass $E_\mu(\bar{f}f) \geq 0$. Diese Beobachtung führt uns auf eine letzte Verallgemeinerung des Zustandsbegriffs. Wir geben diesen nun an und zeigen danach, warum dieser Zustandsbegriff sinnvoll ist, d.h. wir zeigen, dass ein Zustand die Wahrscheinlichkeitsverteilungen aller Messgrößen determiniert.

Definition 2.4. Sei \mathcal{A} eine C^* -Algebra über \mathbb{C} . Ein lineares Funktional $\omega : \mathcal{A} \rightarrow \mathbb{C}$ heisst *positiv*, falls

$$\omega(a^*a) \geq 0$$

für alle $a \in \mathcal{A}$. Ein positives, lineares Funktional ω ist *normiert*, falls

$$\omega(\mathbb{I}) = 1,$$

wobei \mathbb{I} das Einselement der Algebra bezeichnet. Ein *Zustand* ist ein normiertes, positives lineares Funktional auf der Algebra \mathcal{A} . Die Zahl

$$E_\omega(a) := \omega(a)$$

heisst *Erwartungswert* von a im Zustand ω . Die *Standardabweichung* $(\Delta f)_\omega$ einer Observablen f im Zustand ω ist definiert durch

$$(\Delta f)_\omega := \sqrt{E_\omega((f - E_\omega(f))^2)} = \sqrt{E_\omega(f^2) - E_\omega(f)^2}.$$

Im Fall der klassischen Mechanik ist \mathcal{A} die C^* -Algebra $C(\mathbb{R}^{2n})$. Dass dieser neue Zustandsbegriff alle Mess-Wahrscheinlichkeitsverteilungen festlegt, ist Konsequenz des folgenden Satzes.

Satz 2.1 (Rieszscher Darstellungssatz). Jedes positive und normierte lineare Funktional $\omega : C(\mathbb{R}^{2n}) \rightarrow \mathbb{C}$ ist von der Form

$$\omega(f) = \int f(p, q) d\mu(p, q),$$

wobei $d\mu(p, q)$ ein Wahrscheinlichkeitsmass $d\mu(p, q)$ auf dem Phasenraum \mathbb{R}^{2n} ist.

Ein Zustand ω determiniert also das Wahrscheinlichkeitsmass $d\mu(p, q)$ für die Observablen p und q und damit für alle Funktionen $f(p, q)$ in Impuls und Ort über

$$\text{Wahrscheinlichkeit}[f(p, q) \in [a, b]] = \int_{f^{-1}([a, b])} d\mu(p, q).$$

Dies zeigt, dass der soeben definierte Zustandsbegriff sinnvoll ist; er legt fest, wie sich das System in Experimenten verhält.

2.1.2 Klassische Dynamik

Ziel dieses Abschnitts ist die Repetition von Eigenschaften der Dynamik in der klassischen Mechanik.

Definition 2.5. Seien $f, g \in C^1(\mathbb{R}^{2n})$. Dann ist die Poissonklammer $\{f, g\}$ zwischen f und g definiert als

$$\{f, g\} := \sum_{k=1}^n \left(\frac{\partial f}{\partial q_k} \frac{\partial g}{\partial p_k} - \frac{\partial g}{\partial q_k} \frac{\partial f}{\partial p_k} \right).$$

Man mag nun einwenden, dass die Poisson-Klammer nicht für alle Elemente der C^* -Algebra der Observablen $C(\mathbb{R}^{2n})$ definiert ist. Dies ist aus physikalischer Sicht aber kein Problem, da wir physikalisch sinnvolle Observablen ohnehin hinreichend differenzierbar wählen dürfen. Die Algebra der Observablen wird nur derart gross gewählt, um möglichst allgemein zu sein.

Satz 2.2. Eigenschaften der Poissonklammer:

- (i) $\{f, g\} \in C^\infty(\mathbb{R}^{2n})$ für alle $f, g \in C^\infty(\mathbb{R}^{2n})$.
- (ii) $\{\cdot, \cdot\}$ ist komplex-bilinear.
- (iii) $\{f, g\} = -\{g, f\}$ (Antisymmetrie).
- (iv) $\{f, gh\} = \{f, g\}h + g\{f, h\}$ (Leibniz-Regel).
- (v) $\{f, \{g, h\}\} + \{h, \{f, g\}\} + \{g, \{h, f\}\} = 0$ (Jacobi-Identität).
- (vi) $\{q_k, p_l\} = \delta_{kl}$.
- (vii) $\{q_k, p_l^n\} = np_l^{n-1} \delta_{kl}$.
- (viii) $\{p_k, q_l^n\} = -nq_l^{n-1} \delta_{kl}$.

Beim Übergang von der klassischen zur quantentheoretischen Mechanik wird der Kommutator $[\cdot, \cdot]$ die zu Poisson-Klammer analoge Rolle übernehmen. Die im Satz aufgelisteten Eigenschaften werden dann weiterhin Gültigkeit haben. Die Relevanz der Poissonklammer stammt von ihrem Stellenwert bei der Zeitentwicklung: Sei H eine Hamiltonfunktion, f eine Observable und Φ_t der durch H bestimmte Hamiltonsche Fluss $\Phi_t(p, q)$ im Phasenraum. Dann gilt für die Zeitevolution der Observablen f , dass

$$f(p, q; t) := f \circ \Phi_t(p, q) \equiv (\Phi_t^* f)(p, q).$$

Satz 2.3. Sei H eine zeitunabhängige Hamiltonfunktion, f, g Observable und z_1, z_2 komplexe Zahlen. Dann gilt:

- (i) Φ_t^* ist ein $*$ -Automorphismus, d.h.

$$\begin{aligned} \Phi_t^*(z_1 f_1 + z_2 f_2) &= z_1 \Phi_t^*(f_1) + z_2 \Phi_t^*(f_2) \\ \Phi_t^*(fg) &= (\Phi_t^* f)(\Phi_t^* g) \\ \Phi_t^* \bar{f} &= \overline{\Phi_t^* f}. \end{aligned}$$

(ii) Φ_t^* ist eine Poisson-Abbildung, d.h.

$$\Phi_t^*\{f, g\} = \{\Phi_t^*f, \Phi_t^*g\}.$$

(iii) Es gelten die Hamiltonschen Bewegungsgleichungen

$$\dot{f} = \frac{d}{dt}\Phi_t^*f = \{\Phi_t^*f, H\}$$

(iv) Energieerhaltung:

$$\Phi_t^*H = H$$

Zusammenfassend gilt also: *Ein klassisches, mechanisches System wird durch eine C^* -Algebra charakterisiert. Zustände sind positive, normierte, lineare Funktionale auf der C^* -Algebra. Die Zeitentwicklung des Systems ist durch das Hamiltonsche Element der Algebra mit Hilfe der Poissonklammer beschrieben.*

2.2 Kinematik in der Quantenmechanik

Unsere Ziel ist die Formulierung eines mathematischen Modells, in welches wir die folgenden Daten einbetten können:

- (i) Die Observablen sind Elemente einer Algebra, die von den Observablen “Impuls” und “Ort” generiert wird, da “Impuls” und “Ort” die fundamentalen Observablen von spinlosen Punktteilchen sind. Die Observable “Impuls” bezeichnen wir mit dem *Symbol* P , die Observable “Ort” bezeichnen wir mit dem *Symbol* Q .
- (ii) Zu jeder Observablen O ist eine Menge von Messgrößen M_O assoziiert.
- (iii) Ein Zustand bestimmt ein Wahrscheinlichkeitsmass auf den Mengen M_O für alle Observablen O , das die im Experiment beobachteten Verteilungen reproduziert.

Für die Bewältigung dieser grossen Aufgabe haben wir bereits viel Arbeit geleistet. Wir haben anhand der klassischen Mechanik eine mathematische Struktur kennengelernt, die es uns erlaubt, diese drei Punkte zu realisieren. Gleichzeitig haben wir die mathematische Struktur der klassischen Mechanik als Spezialfall einer viel grösseren Klasse von mathematischen Strukturen kennengelernt: die Algebra der klassischen Mechanik ist ein Spezialfall einer C^* -Algebra und Zustände sind positive, normierte, lineare Funktionale auf dieser C^* -Algebra. Die Menge der Messgrößen ist in den Spektren der Observablen enthalten. (Beachte, dass das algebraische Spektrum einer skalaren Funktion mit ihrem Wertebereich übereinstimmt). Das Problem mit der Quantenmechanik ist, dass die im quantenmechanischen Regime gemessenen Messgrößen nicht kompatibel sind mit den Vorhersagen der klassischen Mechanik. Es ist nun naheliegend die mathematische Struktur der Quantenmechanik im folgenden Framework zu suchen:

- (i) Die Algebra der Observablen ist eine C^* -Algebra.
- (ii) Die potentiellen Messwerte sind Elemente des Spektrums der Elemente der C^* -Algebra.

(iii) Zustände sind positive, normierte, lineare Funktionale.

Warnung: Unter *Algebra der Observablen* verstehen wir eine C^* -Algebra, welche die physikalischen Observablen enthält. *Observable* (physikalisch sinnvolle) sind Hermitesche Elemente der Algebra der Observablen, da diese reelle Spektren aufweisen. Sie bilden im allgemeinen *keine* C^* -Unteralgebra. Das folgende fundamentale Theorem erlaubt es, die abstrakte Theorie der C^* -Algebren greifbarer zu machen.

Theorem 2.2.1 (Gelfand-Naimark). *Für jede C^* -Algebra \mathcal{A} existiert ein Hilbertraum \mathcal{H} und ein isometrischer $*$ -Homomorphismus Ξ von \mathcal{A} nach $\mathcal{B}(\mathcal{H})$. Mit anderen Worten: Jede C^* -Algebra ist isomorph zu einer C^* -Unteralgebra von der C^* -Algebra $\mathcal{B}(\mathcal{H})$ (bei geeigneter Wahl des Hilbertraums). Wenn \mathcal{A} separierbar ist, dann ist der Hilbertraum \mathcal{H} ein separabler Hilbertraum.*

Zur Realisierung der C^* -Algebra der Observablen brauchen wir somit nicht nach einer abstrakten C^* -Algebra zu suchen. Stattdessen gilt es einen geeigneten separablen Hilbertraum \mathcal{H} zu finden. Obwohl dieser Raum zu gross ist, setzen wir anschliessend die C^* -Algebra der Observablen gleich mit der C^* -Algebra $\mathcal{B}(\mathcal{H})$. Die Observablen sind dann Hermitesche Elemente in $\mathcal{B}(\mathcal{H})$.

2.2.1 Zustände

Wir erinnern uns, dass wir Zustände als positive, normierte, lineare Funktionale auf der Algebra der Observablen $\mathcal{B}(\mathcal{H})$ eingeführt haben. Wir verschärfen diese Definition nun durch eine technische Forderung, die keine physikalischen Konsequenzen hat.

Definition 2.6. Ein Zustand ist ein *lineares Funktional* $\omega : \mathcal{B}(\mathcal{H}) \rightarrow \mathbb{C}$ mit den Eigenschaften

- (i) $\omega(A) \geq 0$, für positive, selbstadjungierte Operatoren A .
- (ii) $\omega(\mathbb{1}) = 1$.
- (iii) Falls $A_i \xrightarrow{w} A$ für $i \rightarrow \infty$, dann gilt: $\lim_{i \rightarrow \infty} \omega(A_i) = \omega(A)$, d.h. ω ist schwach-stetig.

Beachte, dass wir Observablen gemäss dem Gelfand-Naimark Theorem als Operatoren auf einem Hilbertraum \mathcal{H} auffassen können. Die Elemente in \mathcal{H} erlauben es uns mit Hilfe des Skalarprodukts in \mathcal{H} spezielle Zustände zu konstruieren: sei $\psi \in \mathcal{H}$ ein beliebiges Element des Hilbertraums. Die durch

$$\omega_\psi : A \in \mathcal{B}(\mathcal{H}) \mapsto \langle \psi, A\psi \rangle$$

definierte Abbildung ω_ψ ist ein lineares, normiertes, positives und schwach-stetiges Funktional auf der Algebra der Observablen $\mathcal{B}(\mathcal{H})$. Die Abbildung ω_ψ ist also ein Zustand. Beachte, dass alle Elemente im sog. Einheitsstrahl

$$[\psi] := \{e^{i\alpha}\phi \mid \phi \in \mathcal{H}, \alpha \in [0, 2\pi]\}$$

denselben Zustand ω_ψ zur Folge haben. Gemäss der beschriebenen Konstruktion lässt sich also jedem Einheitsstrahl in \mathcal{H} ein Zustand zuordnen.

Definition 2.7. Ein *reiner Zustand* $\omega_{[\psi]}$ ist ein Zustand, der in der Form

$$\omega_{[\psi]}(A) = \langle \psi, A\psi \rangle, \quad \forall A \in \mathcal{B}(\mathcal{H}),$$

geschrieben werden kann. Da folglich eine Bijektion zwischen der Familie der Einheitsstrahlen und den reinen Zuständen existiert, kann man einen reinen Zustand mit $[\psi] \subset \mathcal{H}$ oder mit $\omega_{[\psi]}$ spezifizieren.

Fundamental ist das folgende Theorem über die Beziehung zwischen allgemeinen Zuständen und reinen Zuständen.

Theorem 2.2.2. *Jeder Zustand ω kann in Form einer konvexen Linearkombination von reinen Zuständen geschrieben werden, d.h. es existiert ein VONS $\{\varphi_j\}_{j=1}^{\infty}$ in \mathcal{H} und positive Zahlen $0 \leq \dots \leq p_3 \leq p_2 \leq p_1$ mit $\sum_{k=1}^{\infty} p_k = 1$, so dass*

$$\omega = \sum_{k=1}^{\infty} p_k \omega_{[\varphi_k]}.$$

Umgekehrt definiert jede konvexe Linearkombination von reinen Zuständen $\omega_{[\phi]}$, $\phi \in \mathcal{H}$, einen Zustand.

Wie in den Übungen gezeigt wurde, wird das im Theorem auftretende VONS $\{\varphi_j\}_{j=1}^{\infty}$ nicht eindeutig bestimmt durch ω .

2.2.2 Zur Induktion von Wahrscheinlichkeitsmassen

Ein physikalisch sinnvoller Zustandsbegriff muss Wahrscheinlichkeitsmasse auf den Spektren von Observablen determinieren. Dies haben wir schon im Kapitel über die klassische Mechanik besprochen. Im vorliegenden Abschnitt wollen wir zeigen, dass dies auch im Falle des hier eingeführten Konstrukts “allgemeine C^* -Unteralgebra in $\mathcal{B}(\mathcal{H})$ plus Zustände als positive, normierte, lineare, schwachstetige Funktionale auf der Algebra der Observablen” gilt.

Sei A eine Observable (d.h. ein selbstadjungierter Operator in $\mathcal{B}(\mathcal{H})$) und ω ein Zustand. Der Gebrauch des Spektraltheorems und der Linearität von ω führt auf

$$\begin{aligned} \omega(A) &= \omega \left(\int \lambda dP^{(A)} \right) \\ &\stackrel{“=“}{=} \int \lambda \omega(dP^{(A)}) \\ &= \int \lambda d\mu^{(A)}, \end{aligned} \tag{2.1}$$

wobei

$$\mu^{(A)}(\Delta) := \omega(P_{\Delta}^{(A)}) \tag{2.2}$$

ein Wahrscheinlichkeitsmass ist, da das Funktional ω normiert und positiv ist. Die reelle Zahl $\omega(A)$ ist also der Erwartungswert bzgl. dem Wahrscheinlichkeitsmass $\mu^{(A)}$, das über (2.2) vollständig bestimmt ist durch den Zustand ω , da die Operatoren $P_{\Delta}^{(A)}$ ebenfalls Elemente der Algebra der Observablen sind. Dass diese Wahrscheinlichkeitsmasse tatsächlich die experimentellen Beobachtungen reproduzieren, muss aus theoretischer Sicht als *Postulat* formuliert werden. Genaueres folgt im Abschnitt über die “Kopenhagen Heuristik”.

2.3 Heisenbergsche Vertauschungsrelationen

Welche C^* -Algebra soll's denn nun sein? Bisher haben wir nur nach einer geeigneten Klasse von Theorien gesucht. Es sollte aber klar sein, dass wir die tatsächlich erfolgreiche Theorie nicht auf diese Weise finden werden. Es ist nötig die im Experiment gemessenen Daten zu konsultieren, um aus ihnen Forderungen an die mathematische Struktur abzuleiten, welche dann die tatsächliche Theorie bis auf physikalische Äquivalenz spezifizieren. (Zwei Theorien sind physikalisch äquivalent, falls aus ihnen dieselben Wahrscheinlichkeitsmasse auf den potentiellen Messwerten hervor gehen.) Dass die geeigneten Forderungen gefunden werden konnten, ist in erster Linie der Genialität der Herren W. Heisenberg, W. Thomas, W. Kuhn, P. Jordan und M. Born zu verdanken. Sie haben es vollbracht aus spektroskopischen Untersuchungen die Forderung

$$[q, p] = i\hbar \mathbb{I} \quad (2.3)$$

abzuleiten. Diese Identität ist unter dem Namen *Heisenbergsche Vertauschungsrelation* oder *kanonische Vertauschungsrelation* bekannt. An dieser Stelle muss die von Dirac betonte formale Äquivalenz zwischen der Heisenbergschen Vertauschungsrelation und der klassischen Identität

$$\{q, p\} = 1 \quad (2.4)$$

hervorgehoben werden. Wie wir weiter unten sehen werden, bestimmt die Forderung der Heisenbergschen Vertauschungsrelation die mathematische Struktur (bis auf physikalische Äquivalenz) eindeutig. Dies ist die Aussage des *Stone-von Neumannschen Eindeutigkeitssatzes*. Bevor wir dazu kommen, beschreiben wir zwei explizite Realisierungen der Theorie, welche den Forderungen, dass die gesuchte Theorie aus dem obigen Framework stammt, und dass sie den Heisenbergschen Vertauschungsrelationen genügt, erfüllen. Die zweite Formulierung ist die Schrödingersche Darstellung der Quantenmechanik. Sie ist die heute populärste Form der Quantenmechanik und ist historisch gesehen die zweite Formulierung der Quantenmechanik. Der Übergang von der klassischen Mechanik zu einer expliziten Realisierung der Quantenmechanik heisst *Quantisierung*.

Eine Realisierung auf $M_\infty(\mathbb{C})$

Ein naheliegender Kandidat für eine C^* -Algebra ist die Algebra der komplexen $(n \times n)$ -Matrizen $M_n(\mathbb{C})$. Die Observablen wären in diesem Fall also Funktionen von den $(n \times n)$ -Matrizen P und Q , welche Impuls und Ort repräsentieren, nach $M_n(\mathbb{C})$. Bei der expliziten Definition der Matrizen P und Q ist darauf zu achten, dass die Heisenbergschen Vertauschungsrelationen erfüllt sind. Dass dies im endlich-dimensionalen Fall nicht möglich ist, sieht man sofort, wenn man die Spur der Heisenbergschen Relation $[q, p] = i\hbar \mathbb{I}$ zieht. Die linke Seite ergibt Null, während die rechte Seite gleich $i\hbar$ mal der Dimension des Raumes (d.h. gleich n) ist. Um diesem Widerspruch aus dem Weg zu gehen, geht man zur C^* -Algebra der Matrizen $M_\infty(\mathbb{C})$ auf abzählbar-unendlich-dimensionalen Räumen

über und definiert

$$P := -\frac{i\hbar}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & \cdots \\ -1 & 0 & 1 & 0 & 0 & \\ 0 & -1 & 0 & 1 & 0 & \\ 0 & 0 & -1 & 0 & 1 & \\ \vdots & & & & & \end{pmatrix}$$

und

$$Q := \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & \cdots \\ 1 & 0 & 1 & 0 & 0 & \\ 0 & 1 & 0 & 1 & 0 & \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 1 & \\ \vdots & & & & & \end{pmatrix}.$$

Da diese Matrizen die Heisenbergschen Vertauschungsrelationen erfüllen, stellt diese Form der Matrizenmechanik eine Möglichkeit dar, die Quantenmechanik darzustellen. Da diese Darstellung in der Praxis nur schwierig zu handhaben ist, hat die in Kürze folgende Schrödingersche Darstellung eine sehr viel grössere Popularität erreicht.

2.3.1 Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren

Der *Erzeugungsoperator/Aufstiegsoperator* a^* und der *Vernichtungsoperator/Abstiegsoperator* a sind durch

$$\begin{aligned} a &:= \frac{1}{\sqrt{2\hbar}}(\kappa q + \frac{i}{\kappa} p), \\ a^* &= \frac{1}{\sqrt{2\hbar}}(\kappa q - \frac{i}{\kappa} p) \end{aligned} \quad (2.5)$$

definiert, wobei $\kappa \in \mathbb{C}$ eine beliebige Konstante ist. Die Vertauschungsrelation

$$[a, a^*] = \mathbb{I}$$

ist eine direkte Konsequenz der Heisenbergschen Vertauschungsrelation. Deshalb wird diese Vertauschungsrelation häufig ebenfalls *kanonische Vertauschungsrelation* genannt. Als nächstes definieren wir den *Zähloperator* N :

$$N := a^* a. \quad (2.6)$$

Aus den kanonischen Vertauschungsrelationen für a und a^* folgert man

$$[N, a] = -a, \quad [N, a^*] = a^*, \quad (2.7)$$

respektive

$$(N + 1)a = aN, \quad (N - 1)a^* = a^* N. \quad (2.8)$$

Aus der letzten Identität schliessen wir: Sei $\psi \in \mathcal{H}$ ein Eigenvektor von N mit Eigenwert n . Dann ist $a\psi$ ein Eigenvektor von N mit Eigenwert $(n - 1)$

und $a^*\psi$ ist ein Eigenvektor von N mit Eigenwert $(n + 1)$. Dieses algebraische Phänomen trifft man in der Quantenmechanik und der Quantenfeldtheorie vielerorts an. Beispiele sind der harmonische Oszillator (der Hamiltonoperator ist ein Zähloperator; die Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren bilden Energie-Eigenzustände auf höher gelegene resp. niedriger gelegene Energie-Eigenzustände ab) und der Formalismus “zweite Quantisierung” für die Behandlung der quantenmechanischen Mehrteilchentheorie (der Zähloperator zählt in diesem Fall tatsächlich die Anzahl Teilchen in einem bestimmten Einteilchenzustand; ein Erzeugungsoperator fügt dem Mehrteilchenzustand einen bestimmten Einteilchenzustand hinzu, während der Vernichtungsoperator einen bestimmten Einteilchenzustand entfernt).

2.4 Die Schrödingersche Darstellung

Da wir im Verlauf dieser Vorlesung auf diese Darstellung der Quantenmechanik zurückgreifen werden, beschreiben wir sie etwas detaillierter.

2.4.1 Observable

Sei \mathcal{H} ein Hilbertraum. Dann ist der Raum $\mathcal{B}(\mathcal{H})$ der beschränkten Operatoren auf \mathcal{H} eine C^* -Algebra bzgl. der Operatornorm

$$\|A\| = \sup_{\|\psi\|_{\mathcal{H}}=1} \frac{\|A\psi\|_{\mathcal{H}}}{\|\psi\|_{\mathcal{H}}}.$$

Für die Schrödingersche Darstellung setzen wir $\mathcal{H} = L^2(\mathbb{R}^n, dx)$ für ein System mit n reellwertigen Freiheitsgraden (Beispiel: $\mathcal{H} = L^2(\mathbb{R}^1, dx)$ für ein Teilchen auf der reellen Achse) und definieren

$$p_j := -i\hbar \frac{\partial}{\partial q_j}, \quad q_j := \text{Mult}(q_j),$$

für alle $j = 1, \dots, n$, wobei $\text{Mult}(q_j)$ den Operator bezeichnet, der die Elemente des Hilbertraums mit q_j multipliziert, d.h. $q_j(\psi(q)) = q_j \cdot \psi(q)$. Diese Operatoren sind selbstadjungiert und haben daher ein reelles Spektrum, wie es sein soll.

2.4.2 Zur Eindeutigkeit der Schrödingerschen Darstellung

Wir kommen nun zur Formulierung des Stone-von Neumannschen Eindeutigkeitssatzes. Dieser legitimiert von einem theoretischen Standpunkt den Gebrauch der Schrödingerschen Darstellung der Quantenmechanik, da gemäss diesem Satz alle Realisierungen der Heisenbergschen Vertauschungsrelationen physikalisch äquivalent sind zur Schrödingerschen Realisierung. Der Stone-von Neumannsche Eindeutigkeitssatz wurde 1930 von M. Stone formuliert und 1931 von J. von Neumann bewiesen. Genau genommen wurde dieser Satz nicht für die Heisenbergschen Vertauschungsrelationen bewiesen, sondern für die sog. Weylschen Vertauschungsrelationen, die, wie wir in Kürze sehen werden, formal äquivalent sind zu den Heisenbergschen Vertauschungsrelationen. Wir verzichten auf die Präsentation des Eindeutigkeitssatzes für die Realisierung der Heisenbergschen Vertauschungsrelationen (siehe [Kirillov2004]).

Üblicherweise fordert man, dass die Theorie der Quantenmechanik Teilchen mit beliebig grossen Impuls- und Ortskoordinaten züsst, auch wenn dies möglicherweise unphysikalisch ist. Die Elemente p und q der Algebra der Observablen haben also kein beschränktes Spektrum und *können folglich nicht durch beschränkte Operatoren realisiert werden*. Dies führt auf Probleme bei der Interpretation der Heisenbergschen Vertauschungsrelation

$$[q, p] = i\hbar,$$

da das Produkt unbeschränkter Operatoren nicht wohldefiniert ist: der Definitionsbereich des Produkts unbeschränkter Operatoren könnte $\{0\}$ sein. In diesem Fall hätten die Heisenbergschen Vertauschungsrelationen keine Relevanz. Wir werden nun aber zeigen, dass die Heisenbergschen Vertauschungsrelationen (zumindest formal) äquivalent sind zu den sog. Weylschen Vertauschungsrelationen. Die Weylschen Vertauschungsrelationen involvieren nur beschränkte Operatoren, so dass man sich nicht um die soeben geschilderten Probleme kümmern muss.

In der Schrödingerschen Darstellung gilt

$$q = \text{Mult}(q), \quad p = -i\hbar\partial_q.$$

Da die Operatoren q und p selbstadjungiert sind, erzeugen sie gemäss dem Satz von Stone zwei 1-parametrische unitäre Gruppen

$$U(b) = e^{ibq}, \quad V(a) = e^{iap} = e^{a\hbar\partial_q},$$

für alle $a, b \in \mathbb{R}$. Mit Hilfe der Fourier Transformation schliesst man, dass

$$V(a)\psi(q) = \psi(q + \hbar a).$$

Wir folgern, dass

$$U(b)V(a) = e^{-i\hbar ab}V(a)U(b). \quad (2.9)$$

Diese Vertauschungsrelation heisst *Weylsche Vertauschungsrelation*. Gemäss dem skizzierten Programm zeigen wir als nächstes, dass die Weylschen Vertauschungsrelationen formal äquivalent sind zu den Heisenbergschen Vertauschungsrelationen. Unter “formal äquivalent” verstehen wir, dass wir uns nicht um die Definitionsbereiche unbeschränkter Operatoren kümmern.

Um zu zeigen, dass die Weylschen Vertauschungsrelationen die Heisenbergschen Vertauschungsrelationen (formal) implizieren, differenziert man (2.9) erst nach a und nach b und setzt anschliessend $a = 0$ und $b = 0$. Es bleibt also noch zu zeigen, dass die Heisenbergschen Vertauschungsrelationen die Weylschen Vertauschungsrelationen (formal) implizieren. Für beliebige Potenzreihen

$$F(q) = \sum_{n \geq 0} c_n x^n$$

und

$$G(p) = \sum_{n \geq 0} a_n p^n$$

folgt im Falle der Gültigkeit der Heisenbergschen Vertauschungsrelationen

$$\begin{aligned}
pF(q) - F(q)p &= \sum_{n \geq 0} c_n (pq^n - q^n p) \\
&= \sum_{n \geq 0} -i\hbar n q^{n-1} \\
&= -i\hbar \frac{d}{dq} F(q)
\end{aligned} \tag{2.10}$$

Wir setzen nun $F(q) := \exp(ibq)$, folgern

$$e^{-ibq} p e^{ibq} = p + b\hbar \mathbb{1}$$

und erhalten

$$\begin{aligned}
e^{-ibq} G(p) e^{ibq} &= \sum_{n \geq 0} a_n e^{-ibq} p^n e^{ibq} \\
&= \sum_{n \geq 0} a_n (e^{-ibq} p e^{ibq})^n \\
&= G(p + b\hbar \mathbb{1}).
\end{aligned} \tag{2.11}$$

Der Spezialfall $G(p) = \exp(iap)$ ergibt somit die Weylschen Vertauschungsrelationen

$$e^{iap} e^{bq} = e^{iab} e^{ibq} e^{iap},$$

was zu zeigen war.

Von einem formalen Gesichtspunkt aus spielt es also keine Rolle, ob wir eine Realisierung der Algebra der Observablen suchen, in welcher die Heisenbergschen Vertauschungsrelationen erfüllt sind, oder ob wir eine Realisierung der Algebra der Observablen suchen, in welcher die Weylschen Vertauschungsrelationen erfüllt sind. Auch wenn sich das bisher Gesagte nur auf Systeme mit nur einem Freiheitsgrad bezogen hat, gilt die formale Äquivalenz zwischen den Heisenbergschen Vertauschungsrelationen

$$[q_k, p_j] = i\hbar \delta_{kj}$$

und den Weylschen Vertauschungsrelationen

$$U(b)V(a) = e^{-i\hbar ab} V(a)U(b), \tag{2.12}$$

$a, b \in \mathbb{R}^f$, auch im Fall von Systemen mit f Freiheitsgraden.

Theorem 2.4.1 (Stone-von Neumann). *Sei \mathcal{H} ein separabler Hilbertraum und seien $\{U(b) \mid b \in \mathbb{R}^f\}$ und $\{V(a) \mid a \in \mathbb{R}^f\}$ zwei f -parametrisierte, stetige, unitäre Gruppen von Operatoren auf \mathcal{H} , welche die Weylschen Vertauschungsrelationen erfüllen. Dann gilt: es existiert ein endlich-dimensionaler oder separabler Hilbertraum \mathcal{M} und ein unitärer Isomorphismus*

$$T : \mathcal{H} \rightarrow L^2(\mathbb{R}^f, d^f x) \otimes \mathcal{M},$$

so dass

$$\begin{aligned} TU(b)T^{-1} &= \exp\left(i \sum_j b_j x_j\right) \otimes \mathbb{I}_{\mathcal{M}} \\ TV(a)T^{-1} &= \exp\left(i \sum_j a_j p_j\right) \otimes \mathbb{I}_{\mathcal{M}}, \end{aligned} \tag{2.13}$$

wobei

$$p_j := -i\hbar \frac{\partial}{\partial q_j}, \quad q_j := \text{Mult}(q_j),$$

für alle $j = 1, \dots, n$, wie in der Schrödingerschen Darstellung. Die Operatoren $TU(b)T^{-1}$ und $TV(a)T^{-1}$ wirken also auf den Raum $L^2(\mathbb{R}^f, d^f x)$ wie in der Schrödingerschen Darstellung vorgegeben. Auf den Raum \mathcal{M} wirken sie als Identität.

Dieses Theorem gilt nur für Systeme mit endlich-vielen Freiheitsgraden! Für Systeme mit unendlich-vielen Freiheitsgraden (Beispiel: das elektromagnetische Feld) existieren unendlich-viele inäquivalente irreduzible Darstellungen der Heisenbergschen Vertauschungsrelationen. Im Fall von unendlich-vielen Freiheitsgraden ist es also nicht mehr eindeutig klar, wie die Heisenbergschen Vertauschungsrelationen dargestellt werden sollen!

Da der Isomorphismus T des Theorems unitär ist, sind also alle Realisierungen der C^* -Algebra der Observablen als Operatoren auf einem Hilbertraum physikalisch äquivalent zur Schrödingerschen Darstellung. Dies ist die Rechtfertigung dafür, dass wir uns im folgenden nur noch auf die Schrödingersche Darstellung der Quantenmechanik beziehen werden. Im Kapitel über Spin und Drehimpuls quantenmechanischer Teilchen werden wir lernen, wie wir den im Theorem auftretenden Tensorfaktor \mathcal{M} nutzen können, um die Spinfreiheitsgrade spinbehafteter Teilchen zu beschreiben.

2.4.3 Darstellung von Zuständen durch Dichtematrizen

Bisher haben wir allgemeine Zustände nur in der Form linearer Funktionale kennengelernt. Diese sind in der Praxis aber nur schwierig zu handhaben. Deshalb präsentieren wir nun zwei alternative Darstellungsmöglichkeiten allgemeiner Zustände: die Darstellungen durch Dichtematrizen und durch Hilbert-Schmidt Operatoren.

Die folgende einfache Umformung, die von der Zerlegung in eine konvexe Linearkombination Gebrauch macht, führt uns direkt auf die Definition des statistischen Operators ρ , dessen Matrixdarstellung Dichtematrix genannt wird. Sei ω ein Zustand, $A \in \mathcal{B}(\mathcal{H})$ beliebig. Dann existiert gemäss Theorem 2.2.2 ein

VONS mit zugehörigen orthogonalen Projektoren $\{P_j\}_{j=1}^{\infty}$, so dass

$$\begin{aligned}\omega(A) &= \sum_{j=1}^{\infty} p_j \langle \psi_j, A\psi_j \rangle \\ &= \sum_{j=1}^{\infty} \langle \psi_j, p_j P_j A \psi_j \rangle \\ &= \sum_{k=1}^{\infty} \langle \phi_k, \left(\sum_{j=1}^{\infty} p_j P_j A \right) \phi_k \rangle\end{aligned}\tag{2.14}$$

für beliebige VONS $\{\phi_k\}_k$. Somit gilt

$$\omega(A) = \text{tr} \left(\sum_{j=1}^{\infty} p_j P_j A \right)\tag{2.15}$$

Definition 2.8. Sei ω ein Zustand und $\{\psi_j\}_{j=1}^{\infty}$ ein VONS bzgl. dem sich der Zustand ω in Form einer konvexen Linearkombination mit Koeffizienten $\{p_j\}_{j=1}^{\infty}$ schreiben lässt. Dann ist der dem Zustand ω zugeordnete *statistische Operator* ρ definiert durch

$$\rho := \sum_{j=1}^{\infty} p_j P_j,$$

wobei P_j den zu ψ_j gehörenden orthogonalen Projektor bezeichnet. Eine Matrixdarstellung von ρ nennt man *Dichtematrix*.

Eine kurze Rechnung bestätigt, dass $|\rho| \equiv \sqrt{\rho^* \rho} = \rho$. Für die Spur erhalten wir also ($\{\phi_n\}_{n=1}^{\infty}$ bezeichnet ein beliebiges VONS)

$$\begin{aligned}\text{tr} |\rho| &= \text{tr} \rho \\ &= \sum_{n=1}^{\infty} \langle \phi_n, \rho \phi_n \rangle \\ &= \sum_{n=1}^{\infty} \sum_{k=1}^{\infty} \langle \psi_n, p_k P_k \psi_n \rangle \\ &= \sum_{n,k} p_k |\langle \phi_n, \psi_k \rangle|^2 \\ &= \sum_k p_k \|\phi_n\|^2 \\ &= \sum_k p_k = 1 < \infty.\end{aligned}\tag{2.16}$$

Der Operator ρ ist also ein Element der Spurklasse \mathcal{I}_1 .

Satz 2.4. Es gilt:

- (i) Sei ω ein Zustand. Dann ist der zugehörige statistische Operator ρ ein positiver, selbstadjungierter Operator mit der Eigenschaft $\text{tr}(\rho) = 1$ und

$$\omega(A) = \text{tr} \rho A,$$

$$\forall A \in \mathcal{B}(\mathcal{H}).$$

- (ii) Sei $\rho \in \mathcal{J}_1$ ein selbstadjungierter und positiver Operator mit $\text{tr } \rho = 1$. Dann gilt: Der Operator ρ definiert über

$$\omega(A) := \text{tr } \rho A,$$

$\forall A \in \mathcal{B}(\mathcal{H})$, ein Zustand.

Beweis. Den ersten Teil des Satzes haben wir soeben bewiesen. Zu zeigen bleibt also noch Teil zwei. Sei $\rho \in \mathcal{J}_1$ ein positiver, selbstadjungierter Operator mit $\text{tr } \rho = 1$. Die Selbstadjungiertheit von ρ erlaubt die Anwendung des Spektraltheorems. Da ρ ein Element der Spurklasse ist, ist $\sigma(\rho)$ diskret (Operatoren der Spurklasse sind kompakt und kompakte Operatoren haben diskretes Spektrum). Wir bezeichnen die zugehörigen Eigenwerte mit $\{e_j\}$. Da ρ positiv ist, gilt: $e_j \geq 0$ für alle j . Das Spektraltheorem liefert somit

$$\rho = \sum_{j=1}^{\infty} e_j P_j.$$

Aus der Annahme $\text{tr } \rho = 1$ folgt

$$1 = \text{tr } \rho = \sum_{j=1}^{\infty} e_j \dim \text{Bild}(P_j).$$

In den Bildräumen der spektralen Operatoren $\{P_j\}_j$ lassen sich gemäss Gram-Schmidt vollständige orthonormierte Systeme $\{\{\psi_{k_j}\}_{k_j}\}_j$ konstruieren. Die zu diesen VONS gehörenden orthogonalen Projektoren seien P_{k_j} . Definiere $p_{k_j} := e_j$ für alle k . Wir erhalten somit den Ausdruck

$$\rho = \sum_{j,k} p_{k_j} P_{k_j},$$

der über $\text{tr } \rho A$ einen Zustand definiert, da

$$\text{tr } \rho = \sum_{j=1}^{\infty} e_j \dim \text{Bild}(P_j) = \sum_{j,k} p_{k_j} = 1.$$

□

Sei $\omega_{[\psi]}$ ein reiner Zustand, $\phi \in [\psi]$ beliebig, und P_ϕ der orthogonale Projektor auf $\phi \in [\psi]$. Offensichtlich beschreibt P_ϕ gemäss dem vorangegangenen Satz einen Zustand. Es folgt, dass

$$\omega_{[\psi]}(A) = \langle \phi, A\phi \rangle = \text{tr } P_\phi A.$$

Der durch den statistischen Operator P_ϕ bestimmte Zustand ist also der reine Zustand $\omega_{[\psi]}$. Generell gilt: Ein statistischer Operator ρ beschreibt genau dann einen reinen Zustand falls $\rho^2 = \rho$.

2.4.4 Darstellung von Zuständen durch Hilbert-Schmidt Operatoren

Sei $\omega : \mathcal{B}(\mathcal{H}) \rightarrow \mathbb{C}$ ein Zustand und ρ der entsprechende statistische Operator,

$$\rho = \sum_{j=1}^{\infty} p_j P_j.$$

Definiere

$$\kappa := \sqrt{\rho} = \sum_{j=1}^{\infty} \sqrt{p_j} P_j. \quad (2.17)$$

Aus $\rho = \kappa^* \kappa$ und $\rho \in \mathcal{J}_1$ folgt $\kappa \in \mathcal{J}_2$, d.h. κ ist ein Hilbert-Schmidt Operator. Der grosse Unterschied zwischen \mathcal{J}_1 und \mathcal{J}_2 liegt darin begründet, dass \mathcal{J}_2 ein Hilbertraum mit Skalarprodukt

$$\langle A, B \rangle_2 := \lim_{N \rightarrow \infty} \sum_{k=1}^N \langle \psi_k, A^* B \psi_k \rangle$$

ist. Dies motiviert die Diskussion der Frage, ob sich Hilbert-Schmidt Operatoren eignen, um Zustände zu representieren, d.h. (1) lässt sich über $\kappa := \sqrt{\rho}$ jedem Zustand ein Hilbert-Schmidt Operator zuordnen?, und (2) inwiefern determiniert die Wahl eines bestimmten Hilbert-Schmidt Operators einen Zustand? Um die Verbindung zwischen Zuständen und Operatoren in \mathcal{J}_2 ziehen zu können, müssen wir eine Vorschrift festlegen, die jedem Hilbert-Schmidt Operator ein lineares Funktional auf $\mathcal{B}(\mathcal{H})$ zuordnet. Da $\mathcal{J}_2 \subset \mathcal{B}(\mathcal{H})$ ein Hilbertraum ist, ist es naheliegend gleich zu verfahren wie bei der Definition reiner Zustände: Seien $A \in \mathcal{B}(\mathcal{H})$ und $\kappa \in \mathcal{J}_2$ beliebig. Dann definieren wir das zu κ gehörende lineare Funktional durch

$$E_{\kappa}(A) := \langle \kappa, A \kappa \rangle_2. \quad (2.18)$$

Das Produkt zwischen A und κ ist das Produkt in $\mathcal{B}(\mathcal{H})$ (Erinnerung: $\mathcal{J}_2 \subset \mathcal{B}(\mathcal{H})$ ist ein Ideal bzgl. $\mathcal{B}(\mathcal{H})$). Dies war eine gute Wahl, da

$$\begin{aligned} E_{\kappa}(A) &= \text{tr}(\kappa^* A \kappa) \\ &= \text{tr}(\kappa \kappa^* A) \\ &= \text{tr}(\rho A). \end{aligned} \quad (2.19)$$

Mit Hilfe der Definitionen (2.17) und (2.18) können wir also jedem Zustand einen Hilbert-Schmidt Operator zuordnen. Offensichtlich definiert dieser Hilbert-Schmidt Operator mit der Vorschrift (2.18) einen Zustand. Sei $\kappa \in \mathcal{J}_2$ nun ein beliebiger Hilbert-Schmidt Operator. Dann definieren wir den zu κ gehörende Zustand über den statistischen Operator

$$\rho_{\kappa} := \frac{\kappa \kappa^*}{\langle \kappa, \kappa \rangle}$$

Als nächstes fragen wir, inwieweit verschiedene Hilbert-Schmidt Operatoren denselben Zustand beschreiben. Sei $U : \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}$ eine Isometrie auf dem Bild von κ^* . Es gilt also $\text{Bild}(\kappa^*) = \text{Ker}(\kappa)^{\perp}$ und $U^* U = \mathbb{I}|_{\text{Bild}(\kappa^*)}$. Damit erhalten wir

$$\langle \kappa, \kappa \rangle = \text{tr}(\kappa \kappa^*) = \text{tr}(\kappa U^* U \kappa^*) = \langle \kappa U^*, \kappa U^* \rangle,$$

und somit

$$\begin{aligned}\rho_\kappa &= \frac{\kappa\kappa^*}{\langle \kappa, \kappa \rangle} \\ &= \frac{\kappa U^* U \kappa^*}{\langle \kappa U^*, \kappa U^* \rangle} \\ &= \rho_{\kappa U^*}.\end{aligned}$$

Die Hilbert-Schmidt Operatoren κ und κU^* liefern also denselben statistischen Operator und sind daher physikalisch äquivalent. Die soeben eingeführten Isometrien U definieren also eine Äquivalenzrelation \sim auf \mathcal{J}_2 . Die entsprechende zu κ gehörende Äquivalenzklasse bezeichnen wir mit $[\kappa] \subset \mathcal{J}_2$.

Zusammenfassend erhalten wir damit den folgenden Zusammenhang zwischen Zuständen, Dichtematrizen und Hilbert-Schmidt Operatoren:

$$\begin{aligned}\text{physikalische Zustände} &= \{\text{Dichtematrizen in } \mathcal{J}_1\} \\ &= \{[\kappa] \mid \kappa \in \mathcal{J}_2, \langle \kappa, \kappa \rangle = 1\}.\end{aligned}\tag{2.20}$$

Wir erinnern uns, dass ein reiner Zustand $[\psi] \subset \mathcal{H}$ auf einen statistischen Operator führt, der ein orthogonaler Projektor $P_{\mathbb{C}\psi}$ auf den durch ψ aufgespannten eindimensionalen Unterraum $\mathbb{C}\psi$ projiziert. Folglich entspricht dem reinen Zustand $[\psi]$ der Operatorstrahl

$$[\kappa_{[\psi]}] = \{e^{i\theta} P_{\mathbb{C}\psi} \mid \theta \in [0, 2\pi)\}.$$

2.4.5 Die Heisenbergsche Unschärferelation

Die Abbildung $\Delta : \mathcal{B}(\mathcal{H}) \times \mathcal{B}(\mathcal{H})^* \rightarrow \mathcal{B}(\mathcal{H})$,

$$\Delta : (A, \omega) \mapsto \Delta_\omega A := A - \omega(A)\tag{2.21}$$

ordnet jedem Paar (A, ω) aus Observable und Zustand eine neue Observable $\Delta_\omega A$ zu. Die Zahl $\omega((\Delta_\omega A)^2)$ heisst *Varianz*, *Dispersion* oder *Schwankungsquadrat* der Observablen A im Zustand ω . Die Wurzel $\sqrt{\omega((\Delta_\omega A)^2)}$ aus der Varianz heisst *Standardabweichung* der Observablen A im Zustand ω . Aus der Linearität des Erwartungswerts folgt

$$\omega((\Delta_\omega A)^2) = \omega(A^2) - \omega(A)^2.\tag{2.22}$$

Interpretation der Varianz $\omega((\Delta_\omega A)^2)$: die Varianz gibt an, wie stark die Messwerte um den Erwartungswert $\omega(A)$ schwanken.

Theorem 2.4.2 (Heisenbergsche Unschärferelation). *Seien A, B selbstadjungiert und ω ein Zustand. Dann gilt:*

$$\omega((\Delta_\omega A)^2)\omega((\Delta_\omega B)^2) \geq \frac{1}{4}|\omega([A, B])|^2.\tag{2.23}$$

Beweis. Sei $\kappa \in \mathcal{J}_2$ ein Hilbert-Schmidt Operator, der den Zustand ω repräsentiert. Dann gilt: $\omega(A) = E_\kappa(A)$. In \mathcal{J}_2 gilt die Cauchy-Schwarz Ungleichung

$$|\langle \kappa_1, \kappa_2 \rangle_2|^2 \leq \|\kappa_1\|_2^2 \|\kappa_2\|_2^2.$$

Angewendet auf $\Delta_\kappa A \kappa$ und $\Delta_\kappa B \kappa$ ergibt die Cauchy-Schwarz Ungleichung

$$|E_\kappa(\Delta_\kappa A \Delta_\kappa B)|^2 \leq \|\Delta_\kappa A \kappa\|_2^2 \|\Delta_\kappa B \kappa\|_2^2, \quad (2.24)$$

wobei wir ausgenutzt haben, dass A und B selbstadjungiert sind bzgl. dem \mathcal{J}_2 -Skalarprodukt. Um fortzufahren benötigen wir die Ersetzung

$$\Delta_\kappa A \Delta_\kappa B = \frac{1}{2}[\Delta_\kappa A, \Delta_\kappa B] + \frac{1}{2}\{\Delta_\kappa A, \Delta_\kappa B\}$$

($\{A, B\} := AB + BA$), die aufgrund der Linearität des Erwartungswerts auf

$$|E_\kappa(\Delta_\kappa A \Delta_\kappa B)|^2 = \frac{1}{4}|E_\kappa([\Delta_\kappa A, \Delta_\kappa B]) + E_\kappa(\{\Delta_\kappa A, \Delta_\kappa B\})|^2 \quad (2.25)$$

führt. Wir beobachten, dass

$$[\Delta_\kappa A, \Delta_\kappa B]^* = -[\Delta_\kappa A, \Delta_\kappa B]$$

Hermitesch, und dass

$$\{\Delta_\kappa A, \Delta_\kappa B\}^* = \{\Delta_\kappa A, \Delta_\kappa B\}$$

anti-Hermitesch ist. Es folgt, dass das Spektrum von $[\Delta_\kappa A, \Delta_\kappa B]$ rein imaginär ist, während das Spektrum von $\{\Delta_\kappa A, \Delta_\kappa B\}$ reell ist. Dies führt auf einen rein imaginären Erwartungswert von $[\Delta_\kappa A, \Delta_\kappa B]$ und auf einen reellen Erwartungswert von $\{\Delta_\kappa A, \Delta_\kappa B\}$. Wir verwenden dies in (2.25) und erhalten

$$|E_\kappa(\Delta_\kappa A \Delta_\kappa B)|^2 = \frac{1}{4}|E_\kappa([\Delta_\kappa A, \Delta_\kappa B])|^2 + \frac{1}{4}E_\kappa(\{\Delta_\kappa A, \Delta_\kappa B\})^2 \quad (2.26)$$

Demnach gilt die Gleichung

$$|E_\kappa(\Delta_\kappa A \Delta_\kappa B)|^2 \geq \frac{1}{4}|E_\kappa([\Delta_\kappa A, \Delta_\kappa B])|^2,$$

welche in Kombination mit (2.24)

$$\frac{1}{4}|E_\kappa([\Delta_\kappa A, \Delta_\kappa B])|^2 \leq E_\kappa((\Delta_\kappa A)^2) E_\kappa((\Delta_\kappa B)^2)$$

ergibt. Diese Identität ist äquivalent zur Gleichung (2.23), die zu beweisen war. \square

Die Unschärfen der Observablen A und B können also nur dann beliebig klein werden, falls A und B kommutieren. Für beschränkte Operatoren ist das genau dann der Fall, wenn die spektralen Projektoren $\{P_\Delta^{(A)}\}_\Delta$ und $\{P_\Delta^{(B)}\}_\Delta$ der Observablen von A und B kommutieren. In diesem Fall heissen die Observablen A und B *kompatibel*.

Beispiel 2.2. Setze $A = q$ und $B = p$. Aus der allgemeinen Unschärferelation folgt in diesem Fall unter Ausnützung von $[q, p] = i\hbar$ und $\omega(\mathbb{I}) = 1$, dass

$$\omega((\Delta_\omega q)^2) \omega((\Delta_\omega p)^2) \geq \frac{1}{4}\hbar^2. \quad (2.27)$$

Satz 2.5. Es existiert kein Zustand ω mit der Eigenschaft

$$\omega((\Delta_\omega A)^2) = \omega(A^2) - \omega(A)^2 = 0 \quad (2.28)$$

für alle $A \in \mathcal{B}(\mathcal{H})$. Ein Zustand mit dieser Eigenschaft heisst dispersionsfrei.

Beweis. Wir nehmen an, dass der Zustand ω mit zugehöriger Dichtematrix ρ dispersionsfrei ist und führen dies auf einen Widerspruch. Es gilt also

$$0 = \omega((\Delta_\omega A)^2) = (\text{tr}(\rho A))^2 - \text{tr}(\rho A^2). \quad (2.29)$$

Insbesondere

$$(\text{tr}(\rho P_\phi))^2 = \text{tr}(\rho P_\phi) \geq 0$$

für alle $\phi \in \mathcal{H}$, und somit

$$\text{tr}(\rho P_\phi) = \langle \phi, \rho \phi \rangle \in \{0, 1\}$$

für alle $\phi \in \mathcal{H}$. Es ist nicht möglich, dass $\langle \phi, \rho \phi \rangle = 0$ für alle $\phi \in \mathcal{H}$, da sonst $\rho = 0$. Ebenso kann es nicht sein, dass $\langle \phi, \rho \phi \rangle = 1$ für alle $\phi \in \mathcal{H}$, da sonst $\rho = \mathbb{I}$. Es existieren also Vektoren ϕ_0 mit der Eigenschaft, dass $\langle \phi_0, \rho \phi_0 \rangle = 0$ und Vektoren ϕ_1 mit der Eigenschaft $\langle \phi_1, \rho \phi_1 \rangle = 1$. Aus $\text{tr}(\rho) = 1$ folgt

$$\text{tr}(\rho(1 - P_{\phi_1})) = 0,$$

und somit

$$\text{tr}(\rho P_\chi) = 0$$

für alle $\chi \perp \phi_1$, da $(1 - P_{\phi_1}) = P_{(\mathbb{C}\phi_1)^\perp}$. Als nächstes definieren wir $\xi(\alpha) := \cos \alpha \chi + \sin \alpha \phi_1$. Daraus folgt

$$\text{tr}(\rho P_{\xi(\alpha)}) = \langle \xi(\alpha), \rho \xi(\alpha) \rangle = \cos \alpha \sin \alpha (\langle \chi, \rho \phi_1 \rangle + \langle \phi_1, \rho \chi \rangle) + \sin^2 \alpha \langle \phi_1, \rho \phi_1 \rangle.$$

Die Grösse $\text{tr}(\rho P_\chi)$ verschwindet für $\alpha = 0$ und ist gleich Eins für $\alpha = \pi/2$. Folglich existieren α -Werte, so dass $0 < \text{tr}(\rho P_{\xi(\alpha)}) < 1$. Dies steht im Widerspruch zu unserer Annahme, dass der Zustand ρ dispersionsfrei ist (siehe (2.29)). \square

2.5 Zusammengesetzte Systeme

Nehme an, wir betrachten zwei beliebige physikalische Systeme Σ_1, Σ_2 mit zugehörigen Algebren $\mathcal{B}(\mathcal{H}_1), \mathcal{B}(\mathcal{H}_2)$ und Hilberträumen $\mathcal{H}_1, \mathcal{H}_2$. Was ist die Algebra der Observablen und der Hilbertraum des zusammengesetzten Systems? Zur Beantwortung dieser Frage lassen wir uns von einem Beispiel leiten.

Beispiel 2.3. Sei Σ_1 das physikalische System “ein Partikel in \mathbb{R}^3 ” und sei Σ_2 das physikalische System “ein Partikel in \mathbb{R}^2 ”. In der Schrödingerschen Darstellung ist der Hilbertraum des Systems Σ_1 $L^2(\mathbb{R}^3, dx)$. Der Hilbertraum des Systems Σ_2 ist $L^2(\mathbb{R}^2, dx)$. Das zusammengesetzte System $\Sigma_1 \vee \Sigma_2$ hat fünf reelle Freiheitsgrade. Gemäss der Schrödingerschen Darstellung ist der Hilbertraum dieses Systems $L^2(\mathbb{R}^5, dx)$. Gemäss Satz 1.3 gilt:

$$L^2(\mathbb{R}^5, dx) \cong L^2(\mathbb{R}^2, dx) \otimes L^2(\mathbb{R}^3, dx).$$

Dieses Beispiel motiviert das folgende Postulat:

Postulat 1. Seien Σ_1, Σ_2 zwei physikalische Systeme mit zugehörigen Hilberträumen \mathcal{H}_1 und \mathcal{H}_2 . Dann gilt: Der Hilbertraum \mathcal{H}_{12} des zusammengesetzten Systems $\Sigma_1 \vee \Sigma_2$ ist das Tensorprodukt der Hilberträume der Teilsysteme:

$$\mathcal{H}_{12} = \mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2.$$

Nach wie vor ist die Algebra der Observablen

$$\mathcal{B}(\mathcal{H}_{12}) \cong \mathcal{B}(\mathcal{H}_1) \otimes \mathcal{B}(\mathcal{H}_2),$$

und Zustände sind positive, normierte, lineare Funktionale auf $\mathcal{B}(\mathcal{H}_{12})$.

An der Tatsache, dass wir Zustände als Dichtematrizen $\rho_{12} \in \mathcal{J}_1(\mathcal{H}_{12})$ oder als Hilbert-Schmidt Operatoren $\kappa_{12} \in \mathcal{J}_2(\mathcal{H}_{12})$ ($\rho_{12} = \kappa_{12}\kappa_{12}^*$) darstellen können, ändert sich natürlich nichts. Eine ausführlichere Diskussion von zusammengesetzten Systemen folgt in einem separaten Kapitel.

2.6 Dynamik

2.6.1 Physikalische Automorphismen

Die physikalisch messbare Information in der Kinematik eines quantenmechanischen Systems steckt in den Wahrscheinlichkeitsmassen auf den Spektren der Observablen. Wir fragen nun, welche Familie von Abbildungen $\{(\Xi_1, \Xi_2)\}$,

$$\begin{aligned} \Xi_1 : P(\mathcal{H}) &\rightarrow P(\mathcal{H}), \\ \Xi_2 : \mathcal{B}(\mathcal{H}) &\rightarrow \mathcal{B}(\mathcal{H}), \end{aligned} \quad (2.30)$$

diese physikalische Information invariant lässt. Diese Abbildungen können dann als Symmetrien unseres Formalismus interpretiert werden, da sie Beschreibungen (im Rahmen unseres Modells der Kinematik) eines physikalischen Systems auf physikalisch äquivalente Beschreibungen (im Rahmen unseres Modells der Kinematik) des Systems abbildet. Wenn die Abbildung $\Xi_1 : P(\mathcal{H}) \rightarrow P(\mathcal{H})$ surjektiv ist, sprechen wir in diesem Fall von einem ‘‘physikalischen Automorphismus’’¹.

Definition 2.9 (Physikalischer Automorphismus). Sei Γ ein quantenmechanisches System dessen reine Zustände $[\psi]$ Elemente des projektiven Raums $P(\mathcal{H})$. Die zugehörige Algebra der Observablen ist somit der Raum $\mathcal{B}(\mathcal{H})$. Nehme an $A \in \mathcal{B}(\mathcal{H})$ sei eine Observable. Dann ist eine Abbildung (Ξ_1, Ξ_2) ,

$$\begin{aligned} \Xi_1 : P(\mathcal{H}) &\rightarrow P(\mathcal{H}), \\ \Xi_2 : \mathcal{B}(\mathcal{H}) &\rightarrow \mathcal{B}(\mathcal{H}), \end{aligned} \quad (2.31)$$

ein *physikalischer Automorphismus*, falls das Paar (Ξ_1, Ξ_2) von Abbildungen die folgenden Eigenschaften aufweist.

- (i) Ξ_1 ist surjektiv.

¹Dies ist keine übliche Namensgebung. Geläufiger sind die Bezeichnungen ‘‘Symmetrie’’ oder ‘‘Automorphismus’’

(ii) Die Wahrscheinlichkeitsverteilungen physikalischer Grössen sind invariant:

$$W_{[\psi]}^A(\Delta) = W_{\Xi_1([\psi])}^{\Xi_2(A)}(\Delta)$$

für alle $[\psi] \in P(\mathcal{H})$ und alle $A \in \mathcal{B}(\mathcal{H})$.

Eine Abbildung des Raums der reinen Zustände $P(\mathcal{H})$ auf sich, der die Übergangswahrscheinlichkeiten von einem beliebigen reinen Zustand auf jeden anderen Zustand invariant lässt heisst Strahlenkorrespondenz.

Definition 2.10 (Strahlenkorrespondenz). Sei Γ ein quantenmechanisches System mit Zustandsraum $P(\mathcal{H})$ und $[\psi] \in P(\mathcal{H})$. Dann gilt: Eine Abbildung ζ mit den Eigenschaften

(i) $\zeta : P(\mathcal{H}) \rightarrow P(\mathcal{H})$ ist bijektiv.

(ii) Es gilt

$$(\zeta([\psi]), \zeta([\phi])) = ([\psi], [\phi]),$$

wobei

$$([\psi], [\phi]) := \langle \psi', \phi' \rangle, \quad \text{für } \psi' \in [\psi] \text{ und } \phi' \in [\phi] \text{ beliebig.}$$

Satz 2.6. Sei (Ξ_1, Ξ_2) ein physikalischer Automorphismus. Dann gilt: Ξ_1 ist eine Strahlenkorrespondenz.

Beweis: siehe S. 122 bis 124 in [Straumann2002].

Satz 2.7 (Wigner). Sei σ eine Strahlenkorrespondenz auf \mathcal{H} . Dann existiert ein bis auf eine Phase $e^{i\alpha}$ *eindeutig* bestimmter unitärer oder antiunitärer Operator U auf \mathcal{H} , so dass

$$\zeta([\psi]) = [U\psi].$$

Beweis: siehe [Straumann], Anhang A. Damit ist nun klar, dass der Abbildung Ξ_1 auf eineindeutige Art und Weise entweder eine Operatormenge

$$\{Ue^{i\phi} : \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H} \mid U \text{ unitär, } \phi \in [0, 2\pi)\}$$

oder eine Operatormenge

$$\{Ue^{i\phi} : \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H} \mid U \text{ antiunitär, } \phi \in [0, 2\pi)\}$$

zugeordnet werden kann. Die zu Ξ_1 gehörende Operatormenge bezeichnen wir mit $\Omega(\Xi_1)$.

Sei nun (Ξ_1, Ξ_2) ein physikalischer Automorphismus. Zur Realisierung von Ξ_1 auf \mathcal{H} wählen wir einen Operator $U \in \Omega(\Xi_1)$. Dann gilt

$$\begin{aligned} W_{\Xi_1([\psi])}^{\Xi_2(A)}(\Delta) &= (U\psi, P_{\Delta}^{\Xi_2(A)}U\psi) = (\psi, U^{-1}P_{\Delta}^{\Xi_2(A)}U\psi) \\ &= W_{[\psi]}^A(\Delta) = (\psi, P_{\Delta}^A\psi), \quad \forall [\psi] \in P(\mathcal{H}). \end{aligned} \quad (2.32)$$

Daraus folgt

$$U^{-1}P_{\Delta}^{\Xi_2(A)}U = P_{\Delta}^A,$$

woraus wir

$$P_{\Delta}^{\Xi_2(A)} = P_{\Delta}^{UAU^{-1}}$$

erhalten. Weiter gilt $\sigma(A) = \sigma(UAU^{-1})$ und somit

$$\Xi_2(A) = UAU^{-1}, \quad (2.33)$$

Es gilt also der folgende Satz.

Satz 2.8. Jede Symmetrie (Ξ_1, Ξ_2) definiert eine Operatormenge $\Omega(\Xi_1)$ eindeutig (siehe oben). Sei $U \in \Omega$ beliebig. Dann gilt für Ξ_1 , dass

$$\Xi_1([\psi]) = [U\psi] \quad (2.34)$$

und für Ξ_2 , dass

$$\Xi_2(A) = UAU^{-1}. \quad (2.35)$$

Das bedeutet: Die Abbildung Ξ_1 wird auf \mathcal{H} realisiert durch die Abbildung $U : \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}$ ($U \in \Omega(\Xi_1)$ beliebig). Gleichzeitig wird die Abbildung Ξ_2 realisiert durch $A \rightarrow VAV^{-1}$ ($V \in \Omega$ beliebig). Umgekehrt definiert jeder unitäre oder antiunitäre Operator auf \mathcal{H} resp. jede Strahlenkorrespondenz auf $P(\mathcal{H})$ über die Identitäten (2.34) und (2.35) einen physikalischen Automorphismus auf $P(\mathcal{H})$. Aus der expliziten Realisierung physikalischer Automorphismen folgt sofort, dass die physikalischen Automorphismen mit der Verknüpfung

$$(\Xi_1, \Xi_2) * (\tilde{\Xi}_1, \tilde{\Xi}_2) := (\Xi_1 \circ \tilde{\Xi}_1, \Xi_2 \circ \tilde{\Xi}_2) \quad (2.36)$$

eine Gruppe bilden.

2.6.2 Die Zeitevolution reiner Zustände

Sei Σ ein für alle Zeiten $t \in I$ isoliertes quantenmechanisches System. Insbesondere nehmen wir also an, dass keine Messungen vorgenommen werden. Des Weiteren nehmen wir an, dass sich das System zur Zeit t_0 im reinen Zustand $[\psi_{t_0}]$ befindet.

Postulat 2. Es bezeichne ω_{t_1} , $t_1 > t_0$, $t_1 \in I$ den Zustand von Σ zur Zeit t_1 . Dann postuliert man:

- (i) ω_{t_1} ist ein reiner Zustand $[\psi_{t_1}] \in P(\mathcal{H})$.
- (ii) $[\psi_{t_1}]$ geht aus $[\psi_{t_0}]$ durch eine Strahlenkorrespondenz τ hervor.
- (iii) Sei $U : \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}$ ein Operator, der die Strahlenkorrespondenz τ auf \mathcal{H} realisiert. Dann gilt:

$$\lim_{t' \rightarrow t} U(t', t)\psi = \psi \quad (2.37)$$

für alle $\psi \in \mathcal{H}$.

Aus Teil (ii) des Postulats folgt, dass ein unitärer Operator $U(t_1, t_0)$ existiert (die Antiunitarität wird durch (iii) ausgeschlossen), welcher die Zeitentwicklung des reinen Zustandes $[\psi_{t_0}]$ durch

$$\psi_{t_0} \mapsto \psi_{t_1} = U(t_1, t_0)\psi_{t_0} \quad (2.38)$$

beschreibt (siehe Wigners Satz). Diese durch t parametrisierte Familie unitärer Operatoren ist gemäss Teil (iii) des Postulats stark-stetig in t und heisst *Propagator*. Ein Propagator hat die folgenden Eigenschaften:

- (i) Die Operatoren $\{U(t)\}_t$ sind unitär,
- (ii) $U(t_2, t_0) = U(t_2, t_1)U(t_1, t_0)$,
- (iii) $U(t_1, t_0) = U(t_0, t_1)^*$.

Definition 2.11. Sei Σ ein physikalisches System, dessen Zeitentwicklung durch die Strahlenkorrespondenz τ beschrieben ist. Eine Strahlenkorrespondenz σ des Systems heisst *dynamische Symmetrie*, falls sie mit der Zeitevolution τ vertauscht, d.h.

$$\tau \circ \sigma = \sigma \circ \tau. \quad (2.39)$$

Die Strahlenkorrespondenzen σ und τ können mit Hilfe von Operatorstrahlen $[V_\sigma]$ und $[V_\tau]$ separat dargestellt werden.

2.6.2.1 Autonome Systeme

Ein System Σ heisst *autonom*, falls

$$U(t_1, t_0) = U(t_1 - t_0, 0) =: U(t_1 - t_0). \quad (2.40)$$

Daraus folgt

$$U(t + s) = U(t)U(s). \quad (2.41)$$

Der Propagator $\{U(t)|t \in I\}$ ist also eine stark stetige, einparametrische unitäre Gruppe. Mit dem Satz von Stone folgt, dass ein selbstadjungierter Operator $H = H^*$ auf \mathcal{H} existiert, so dass

$$U(t) = e^{-\frac{i}{\hbar}Ht}. \quad (2.42)$$

Den Operator H nennt man *Hamilton Operator*.

2.6.2.2 Nichtautonome Systeme

Es sei \mathcal{D} ein dichter Bereich in \mathcal{H} , auf dem die Funktion $U(t, t_0)\psi$, $\psi \in \mathcal{D}$ in t stark differenzierbar ist. Dann gilt: Es existiert eine Familie selbstadjungierter Operatoren $\{H(t)\}$, so dass

$$i\hbar\partial_t U(t, t_0)\psi = H(t)U(t, t_0)\psi. \quad (2.43)$$

In der Anwendung geht man im Allgemeinen von der umgekehrten Fragestellung aus: Unter welchen Bedingungen hat die Differentialgleichung

$$i\hbar\partial_t \psi_t = H(t)\psi_t \quad (2.44)$$

zur Anfangsbedingung $\psi(t = t_0) = \psi_0$ eine eindeutige Lösung? Der folgende Satz liefert eine hinreichende Bedingung.

Satz 2.9. Wir nehmen an:

- (i) \mathcal{H} ist ein separabler Hilbertraum.
- (ii) $\{H(t)\}$ ist eine Familie zeitabhängiger Hamilton-Operatoren, die auf einem gemeinsamen dichten Bereich $\mathcal{D} \subset \mathcal{H}$ definiert und (wesentlich) selbstadjungiert sind.

(iii) Der Operator $\dot{H}(t)(H(s) \pm i)^{-1}$ ist beschränkt und stark stetig in t und s . Dann gilt: Für alle Zeiten t und s , $t \leq s$, gibt es einen unitären Operator $U(t, s)$ (den Propagator), so dass

$$i\hbar\partial_t U(t, s)\psi = H(t)U(t, s)\psi \quad (2.45)$$

für alle $\psi \in \mathcal{D}$, und

$$s\text{-}\lim_{t \downarrow s} U(t, s)\psi = \psi. \quad (2.46)$$

Beweis: siehe [Reed80b] Volume 3, Theorem X.70.

2.6.3 Schrödinger-Bild für reine Zustände

Nehme an, das zur Diskussion stehende physikalische System sei autonom. Gemäss (I.iii) des Stoneschen Theorems gilt

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}U(t)\psi = HU(t)\psi, \quad (2.47)$$

für alle $\psi \in \mathcal{H}$. Im Schrödinger-Bild der Dynamik verpackt man die Zeitentwicklung des physikalischen Systems in Hilbertraum-Vektoren:

$$\psi(t) = U(t)\psi. \quad (2.48)$$

Damit erhalten wir aus (2.47) die *zeitabhängigen Schrödinger Gleichung*

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(t) = H\psi(t). \quad (2.49)$$

Gegeben sei nun ein physikalisches System, das sich zur Zeit $t = 0$ in einem reinen Zustand befindet, der durch einen Vektor $\psi_0 \in \mathcal{H}$ repräsentiert ist. Nehme an, wir interessieren uns für den Zustand $\omega(T)$ des Systems zur Zeit $t = T > 0$. Gemäss unseren Postulaten ist $\omega(T)$ ein reiner Zustand, d.h. $\omega(T)$ ist von der Form $\omega_{[\psi(T)]}$. Die Hilbertraum-Trajektorie $\{\psi(t) | t \in [0, T]\}$ ergibt sich dann aus der Lösung der Schrödinger Gleichung (2.49) unter der Anfangsbedingung $\psi(t = 0) = \psi_0$.

Über den Separationsansatz

$$\psi(x, t) = v(t)u(x)$$

erhalten wir anstelle der zeitabhängigen Schrödingergleichung

$$\frac{i\hbar\dot{v}(t)}{v(t)} = \frac{Hu(x)}{u(x)}.$$

Weil die linke Seite dieser Gleichung nur von t und die rechte Seite nur von x abhängt. Folglich müssen sowohl die linke als auch die rechte Seite gleich einer Konstanten E sein. Wir folgern also, dass

$$i\hbar\dot{v}(t) = Ev(t) \quad (2.50)$$

mit der Lösung

$$v(t) = e^{-\frac{i}{\hbar}Et} \quad (2.51)$$

und

$$Hu(x) = Eu(x). \quad (2.52)$$

Diese Eigenwert-Gleichung trägt den Namen *zeitunabhängige Schrödingergleichung*. Die Zustände

$$\psi(x, t) = u(x) e^{-\frac{i}{\hbar}Et} \quad (2.53)$$

heissen *stationäre Zustände*, da die zugehörige Wahrscheinlichkeitsdichte $|\psi(x, t)|^2 = |u(x)|^2$ zeitunabhängig ist.

2.6.4 Heisenberg-Bild

Alternativ lässt sich die Zeitentwicklung des Systems der Algebra der Observablen unter bringen. Dies ist die Idee hinter dem *Heisenberg-Bild* der Dynamik. Nehme an, das zur Diskussion stehende physikalische System sei autonom, und dass sich das physikalische System zur Zeit $t = 0$ in einem reinen Zustand $\omega_{[\psi_0]}$ befindet. Dann gilt

$$\begin{aligned} \omega(A)(t) &= \langle \psi(t), A\psi(t) \rangle \\ &= \langle U(t)\psi, AU(t)\psi \rangle \\ &= \langle U(t)\psi, U(t)^*AU(t)\psi \rangle =: \omega(A(t)) \end{aligned} \quad (2.54)$$

mit

$$A(t) := U(t)^*AU(t) = e^{\frac{i}{\hbar}Ht}Ae^{-\frac{i}{\hbar}Ht}. \quad (2.55)$$

Die Ableitung nach der Zeit ergibt

$$\frac{d}{dt}A(t) = e^{\frac{i}{\hbar}Ht}i[H, A]e^{-\frac{i}{\hbar}Ht} = i[H, A(t)]. \quad (2.56)$$

Wir erhalten also die *Heisenberg Gleichung*

$$i\hbar \frac{d}{dt}A(t) = [A(t), H]. \quad (2.57)$$

2.6.5 Schrödinger-Bild für allgemeine Zustände

Nehme an, das physikalische System befinde sich zur Zeit $t = 0$ im allgemeinen Zustand ω_0 , der durch den Dichteoperator ρ repräsentiert wird; für $A \in \mathcal{B}(\mathcal{H})$ gilt also

$$\begin{aligned} \omega_0(A)(t) &= \omega_0(A(t)) = \text{tr}(\rho A(t)) \\ \omega_0(A)(t) &= \omega_0(A(t)) \\ &= \text{tr}(\rho A(t)) \\ &= \text{tr}(U(t)\rho U(t)^*A) = \text{tr}(\rho(t)A), \end{aligned} \quad (2.58)$$

wobei

$$\rho(t) := U(t)\rho U(t)^* = e^{-\frac{i}{\hbar}Ht}\rho e^{\frac{i}{\hbar}Ht}. \quad (2.59)$$

Die resultierende Bewegungsgleichung ist die *Liouville Gleichung*

$$i\hbar \frac{d}{dt}\rho(t) = [H, \rho(t)]. \quad (2.60)$$

Nehme an, der Zustand ω_0 sei nicht durch eine Dichtematrix, sondern durch einen Hilbert-Schmidt Operator $\kappa \in \mathcal{J}_2(\mathcal{H})$ dargestellt. Damit folgt für die zeitliche Entwicklung des Erwartungswertes einer Observablen A folgendes:

$$\begin{aligned}\omega_0(A)(t) &= \omega_0(A(t)) \\ &= \langle \kappa, A(t)\kappa \rangle_2 \\ &= \text{tr}(\kappa^* U(t)^* A U(t) \kappa) \\ &= \text{tr}(U(t) \kappa^* U(t)^* A U(t) \kappa U(t)^*) = \langle \kappa(t), A \kappa(t) \rangle_2,\end{aligned}\tag{2.61}$$

wobei

$$\kappa(t) := U(t) \kappa U(t)^* = e^{-\frac{i}{\hbar} H t} \kappa e^{\frac{i}{\hbar} H t}.\tag{2.62}$$

Die Zeitevolution

$$\kappa \mapsto \kappa(t)\tag{2.63}$$

ist linear und unitär im Raum \mathcal{J}_2 . Weiter ist sie nur bis auf Rechtsmultiplikation

$$\kappa(t) = U(t) \kappa U(t)^* \sim \kappa(t) V(t) = U(t) \kappa U(t)^* V(t)$$

mit einem unitären Operator $V(t)$ bestimmt, da diese das Funktional ω nicht ändert und somit auf physikalisch äquivalente Zustände führt.

2.6.6 Wechselwirkungsbild

Im Schrödinger-Bild sind die Zustände zeitabhängig, während die Observablen unter Zeitevolution konstant bleiben. Im Heisenberg-Bild sind die Observablen zeitabhängig, während die Zustände unter Zeitevolution konstant bleiben. Das Wechselwirkungsbild (auch Dirac-Bild genannt) ist eine Vermischung dieser konsequenten Umsetzungen der Zeitevolution. Wir starten mit einem physikalischen System Σ_0 mit Hilbertraum \mathcal{H} , dessen Dynamik durch einen Hamiltonoperator H_0 beschrieben ist. Der zu H_0 gehörende Propagator ist

$$U_0(t) = e^{-\frac{i}{\hbar} H_0 t}$$

Wir gehen davon aus, dass alle Eigenfunktionen $\{\xi_j\}_j$ und Eigenwerte $\{E_j\}_j$ von H_0 bekannt sind. Die Zeitentwicklung des Systems Σ_0 ist mit diesem Wissen trivial. Nehme nun aber an, dass unsere eigentliches Ziel die Behandlung eines Systems Σ ist, dessen Hilbertraum wiederum \mathcal{H} ist, dessen Hamiltonoperator aber von der Form

$$H = H_0 + V\tag{2.64}$$

ist. Der die Dynamik von Σ beschreibende Propagator sei $U(t)$. Beispielsweise, könnte Σ_0 ein ungestörtes Wasserstoffatom sein, während Σ ein Wasserstoffatom im Einfluss eines zeitabhängigen äusseren elektromagnetischen Feldes ist. Dieses Zeitabhängige elektromagnetische Feld führt dann zu einer zeitabhängigen Störung $V(t)$ des Wasserstoffatom-Hamiltonoperators H_0 .

Die Idee des Wechselwirkungsbildes ist, dass wir die (triviale) Zeitentwicklung, die von H_0 herkommt, von den Zuständen auf die Observablen hinüber zu schieben. Das Wechselwirkungsbild ist also ein Kompromiss, für den sowohl die

Zustände als auch die Observablen zeitabhängig sind. Konkret definieren wir Zustände und Operatoren im Wechselwirkungsbild gemäss

$$\begin{aligned}\psi_w(t) &:= U_0(-t)\psi_s(t) = U_0(-t)U(t)\psi_H =: U_w(t)\psi_w(0) \\ A_w(t) &:= U_0(-t)A_sU_0(t) = U_0(-t)U(t)A_HU(-t)U_0(t) = U_w(t)A_HU_w^*(t).\end{aligned}\tag{2.65}$$

Notation: 'w' bedeutet 'Wechselwirkungsbild', s bedeutet 'Schrödingerbild'. Somit folgt

$$\begin{aligned}i\hbar\partial_t\psi_w(t) &= i\hbar\partial_t(U_0(-t)\psi(t)) \\ &= -i\hbar(\partial_tU_0)(-t)\psi + i\hbar U_0(-t)(\partial_t\psi) \\ &= -H_0U_0(-t)\psi + U_0(-t)H\psi \\ &= -H_0\psi_w(t) + U_0(-t)HU_0(t)\psi_w(t) \\ &= -H_0\psi_w(t) + U_0(-t)H_0U_0(t)\psi_w(t) + U_0(-t)V(t)U_0(t)\psi_w(t) \\ &= -H_0\psi_w(t) + H_0\psi_w(t) + V_w(t)\psi_w(t),\end{aligned}\tag{2.66}$$

da $[U_0, H_0] = 0$ für zeitunabhängige Hamiltonoperatoren H_0 , da in diesem Fall

$$U_0(t) = e^{-\frac{i}{\hbar}H_0t}.\tag{2.67}$$

Also gilt: Im Wechselwirkungsbild ergibt sich die Zeitentwicklung der Zustände $\psi_w(t)$ aus der Diskussion der Schrödinger Gleichung

$$i\hbar\partial_t\psi_w(t) = V_w(t)\psi_w(t).\tag{2.68}$$

Die Zeitabhängigkeit der Observablen wird bestimmt durch die Heisenberg Gleichung

$$i\hbar\partial_tA_w(t) = [A_w(t), H_0].\tag{2.69}$$

2.6.7 Korrespondenzregel

Bisher haben wir nur von der Existenz eines Hamiltonoperators gesprochen und sind der Frage ausgewichen, wie wir die explizite Form des Hamiltonoperators erhalten. In der Praxis gilt die folgende Korrespondenzregel:

Postulat 3 (Korrespondenzregel). *Gegeben sei ein physikalisches System Σ , dessen Dynamik klassisch durch eine Hamiltonfunktion $h = h(p_1^{(c)}, \dots, p_n^{(c)}, q_1^{(c)}, \dots, q_n^{(c)})$ beschrieben würde (der Index "c" bedeutet, dass beispielsweise $p_1^{(c)}$ eine klassische Impulskoordinate bezeichnet). Dann gilt: Der Hamiltonoperator H , der die quantenmechanische Dynamik des Systems Σ generiert, geht aus der klassischen Hamiltonfunktion h hervor, indem man die klassischen Phasenraum-Koordinaten durch die entsprechenden quantenmechanischen Observablen ersetzt:*

$$H = h(p_1, \dots, p_n, q_1, \dots, q_n).\tag{2.70}$$

Da in der klassischen Theorie die Observablen des Ortes und des Impuls kommutieren, ist dieser Übersetzungsschlüssel *nicht* eindeutig. So sind die Ausdrücke $q^{(c)}p^{(c)}$, $p^{(c)}q^{(c)}$ und $\frac{1}{2}(q^{(c)}p^{(c)} + p^{(c)}q^{(c)})$ zwar identisch, jedoch führen sie auf unterschiedliche Hamiltonoperatoren. In diesem Beispiel wird die

Anordnungs-Freiheit durch die Forderung der Selbstadjungiertheit determiniert. Im Falle allgemeiner klassischer Terme, die sowohl $p^{(c)}$ als auch $q^{(c)}$ enthalten, kann es schwierig werden, zu zeigen, dass die Forderung der Selbstadjungiertheit die Anordnungsfreiheit festlegt, und dass eine mathematische Vorschrift (die *Quantisierungsregel*) existiert, welche die klassischen Ausdrücke durch quantenmechanische Ausdrücke ersetzt. Probleme dieser Art werden *Ordnungsprobleme* genannt. In der Mathematik nennt man Operatoren, die aus der Quantisierung klassischer Ausdrücke hervor gehen, Pseudo-Differentialoperatoren.

Warum die Korrespondenzregel gute Resultate liefert, ist heutzutage nicht verstanden. Wir schildern nun aber einen Gedankengang mit dem Ziel, die Korrespondenzregel zu motivieren. Zu diesem Zweck betrachten wir einen makroskopischen Ball B , den wir uns als Punktteilchen P (im Schwerpunkt lokalisiert) idealisiert denken, und dessen Bewegung auf eine Dimension beschränkt ist. Klassisch wird der Ball B also mit Hilfe eines Phasenraums \mathbb{R}^2 , den Phasenraum-Koordinaten $(q^{(c)}, p^{(c)})$ und einer Hamiltonfunktion $h = h(q^{(c)}, p^{(c)})$ beschrieben. Die quantenmechanische Beschreibung desselben bezieht sich auf den Hilbertraum $L^2(\mathbb{R}, dx)$ und einen noch unbekanntem Hamiltonoperator H . Da der Ball makroskopisch ist, nehmen wir an, dass sich das Punktteilchen P wie ein klassisches Punktteilchen verhält. Folglich weisen wir dem Ball im Rahmen unserer Idealisierung einen klassischen Zustand zu. Der Einfachheit halber gehen wir davon aus, dass dieser Zustand der reine Zustand $(q_0^{(c)}, p_0^{(c)})$;

$$d\mu(q^{(c)}, p^{(c)}) = \delta(p^{(c)} - p_0^{(c)})\delta(q^{(c)} - q_0^{(c)}) dp^{(c)}dq^{(c)} \quad (2.71)$$

ist. Die quantenmechanische Beschreibung des identischen Balls ist ein Zustand ω_c . Wenn die quantenmechanische Beschreibung verträglich ist mit der klassischen Beschreibung, dürfen die quantenmechanischen und die klassischen Vorhersagen nicht widersprüchlich sein. Aus dieser Forderung “leiten wir ab”, dass die von ω_c induzierten Wahrscheinlichkeitsmasse auf den Spektren $\sigma(P) = \mathbb{R}$ und $\sigma(Q) = \mathbb{R}$ der quantenmechanischen Observablen P und Q identisch ist mit der klassischen Phasenraum-Wahrscheinlichkeitsverteilung (2.71) des klassischen reinen Zustands $(q^{(c)}, p^{(c)})$. Dabei machen wir einen Fehler der Ordnung $\hbar!$ Aus quantenmechanischer Sicht ist es unmöglich von einer gemeinsamen Verteilung auf dem Spektrum des Impulses und auf dem Spektrum des Ortes zu sprechen². Weiter gehen wir davon aus, dass das Wahrscheinlichkeitsmass auf dem Spektrum einer beliebigen Observablen $f(P, Q)$ identisch ist mit dem entsprechenden klassischen Wahrscheinlichkeitsmass

$$\mu^{f(q^{(c)}, p^{(c)})}(\Delta) = \int_{f^{-1}(\Delta)} \delta(p^{(c)} - p_0^{(c)})\delta(q^{(c)} - q_0^{(c)}) dp^{(c)}dq^{(c)}. \quad (2.72)$$

Daraus “folgt” dann, dass die quantenmechanischen Observablen “Impuls” und “Ort” kommutieren (was aus quantenmechanischer Sicht natürlich unsinnig ist),

²An dieser Stelle müssen wir den Leser bitten, diesen heiklen Punkt zu ignorieren. Die folgende Ausführung muss als Plausibilitätserklärung verstanden werden.

und dass

$$\begin{aligned}\omega(f(P, Q)) &= \int_{f^{-1}(\Delta)} \delta(p^{(c)} - p_0^{(c)}) \delta(q^{(c)} - q_0^{(c)}) dp^{(c)} dq^{(c)} \\ &= f(p_0^{(c)}, q_0^{(c)}) \\ &= f(\omega(P), \omega(Q)).\end{aligned}\tag{2.73}$$

An dieser Stelle sei daran erinnert, dass für eine beliebige Observable A die Grösse $\omega(A)$ als Erwartungswert der Observablen A interpretiert werden kann (siehe Abschnitt über die Induktion von Wahrscheinlichkeitsmassen). Wenn die quantenmechanische und die klassische Beschreibung nicht widersprüchlich sind, gilt weiter, dass

$$\frac{d}{dt} p_0^{(c)} = \frac{d}{dt} \omega(P),\tag{2.74}$$

und dass

$$\frac{d}{dt} q_0^{(c)} = \frac{d}{dt} \omega(Q).\tag{2.75}$$

Unter der Annahme, dass die klassische Hamiltonfunktion $h = h(p_0^{(c)}, q_0^{(c)})$ ein Polynom ist, folgt, dass

$$\frac{d}{dt} q_0^{(c)} = \{q_0^{(c)}, h\} = \frac{d}{dp_0^{(c)}} h\tag{2.76}$$

ein Polynom ist (Erinnerung: $\{q, p\} = 1$). Unter der Annahme, dass der quantenmechanische Hamiltonoperator $H = H(P, Q)$ ein Polynom ist, folgt, dass

$$\frac{d}{dt} \omega(Q) = \omega\left(\frac{1}{i\hbar} [Q, H]\right) = \omega\left(\frac{d}{dP} H\right)\tag{2.77}$$

ein Polynom ist (Erinnerung: $[q, p] = i\hbar$). Das zweite Gleichheitszeichen ist dahingehend zu verstehen, dass wir das Polynom $H(P, Q)$ nach P differenzieren. Mit Hilfe von (2.73) folgt

$$\begin{aligned}\omega\left(\frac{d}{dP} H\right) &= \frac{d}{dP} H(\omega(P), \omega(Q)) \\ &= \frac{d}{dp_0^{(c)}} H(p_0^{(c)}, q_0^{(c)}) \\ &= \frac{d}{dp_0^{(c)}} h(p_0^{(c)}, q_0^{(c)}),\end{aligned}\tag{2.78}$$

wobei wir im dritten Schritt die Gleichungen (2.75) und (2.76) benützt haben. Die analoge Überlegung für die Observable ‘‘Impuls’’ führt auf

$$\frac{d}{dq_0^{(c)}} H(p_0^{(c)}, q_0^{(c)}) = \frac{d}{dq_0^{(c)}} h(p_0^{(c)}, q_0^{(c)}).\tag{2.79}$$

Da die Integrationskonstante, die bei der Integration des Systems von Differentialgleichungen

$$\begin{aligned}\frac{d}{dq_0^{(c)}} H(p_0^{(c)}, q_0^{(c)}) &= \frac{d}{dq_0^{(c)}} h(p_0^{(c)}, q_0^{(c)}) \\ \frac{d}{dq_0^{(c)}} H(p_0^{(c)}, q_0^{(c)}) &= \frac{d}{dq_0^{(c)}} h(p_0^{(c)}, q_0^{(c)})\end{aligned}\tag{2.80}$$

auftritt, irrelevant ist für die Beschreibung der Dynamik, erhalten wir somit also tatsächlich

$$H(p_0^{(c)}, q_0^{(c)}) = h(p_0^{(c)}, q_0^{(c)}) \quad (2.81)$$

für alle $(p_0^{(c)}, q_0^{(c)}) \in \mathbb{R}^2$, so dass

$$H = h \quad (2.82)$$

als Polynome.

2.6.8 Auszüge aus der Spektraltheorie von Schrödinger Operatoren

Nach der Quantisierung eines klassischen Systems stösst man typischerweise auf einen Hamiltonoperator von der Form

$$H = H_0 + V(x) \quad (2.83)$$

mit

$$H_0 := -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta$$

und $V : \mathbb{R}^f \rightarrow \mathbb{R}$. Elemente dieser Familie von Operatoren heissen *Schrödingersche Operatoren*.

Satz 2.10. Eine allgemeine zeitabhängige Schrödinger Gleichung

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi_t = H \psi_t, \quad \psi_t \in \mathcal{H},$$

besitzt globale Lösungen

$$\psi_t = e^{-\frac{i}{\hbar} H t} \psi_0, \quad (2.84)$$

falls H *selbstadjungiert* ist.

Somit benötigen wir Methoden, um bestimmen zu können, ob ein Operator selbstadjungiert ist.

Satz 2.11 (Kato-Kriterium). Sei H ein Schrödingerscher Operator. Dann gilt: Aus

$$\|V\varphi\| \leq a\|H_0\varphi\| + b\|\varphi\|, \quad \forall \varphi \in D(H_0), \quad (2.85)$$

mit $a < 1$ und $b < \infty$ folgt, dass H selbstadjungiert ist.

Wir kommen nun zu einer kurzen Liste von Sätzen zur Struktur der Spektren bestimmter Klassen Schrödingerscher Operatoren. Die Beweise finden sich entweder in [Gustafson2003] oder in [Hislop1996].

Satz 2.12. Sei $H = H_0 + V(x)$ ein Schrödingerscher Operator mit den Eigenschaften, dass $V(x)$ stetig ist, dass $V(x) \geq 0$, und dass

$$V(\|x\|) \rightarrow \infty \text{ für } \|x\| \rightarrow \infty. \quad (2.86)$$

Dann gilt: Das Spektrum $\sigma(H)$ besteht aus isolierten Eigenwerten $\{\lambda_n\}_{n=1}^\infty$ mit der Eigenschaft, dass $\lambda_n \rightarrow \infty$ für $n \rightarrow \infty$.

Satz 2.13. Sei $H = H_0 + V(x)$ ein Schrödingerscher Operator mit den Eigenschaften, dass $V(x)$ stetig ist, und dass

$$V(\|x\|) \rightarrow 0 \text{ für } \|x\| \rightarrow \infty. \quad (2.87)$$

Dann gilt:

$$\sigma_c(H) = [0, +\infty). \quad (2.88)$$

Die isolierten Eigenwerte von H müssen also negativ sein.

Satz 2.14. Sei Q ein Würfel in \mathbb{R}^f und sei $H = H_0 + V(x)$ ein Schrödingerscher Operator auf $L^2(Q, d^f x)$ mit Dirichlet Randbedingungen auf ∂Q mit der Eigenschaft, dass $V(x)$ stetig ist auf Q . Dann gilt: Das Spektrum $\sigma(H)$ besteht aus isolierten Eigenwerten $\{\lambda_n\}_{n=1}^\infty$ mit der Eigenschaft, dass $\lambda_n \rightarrow \infty$ für $n \rightarrow \infty$.

Das folgende fundamentale Theorem besagt folgendes: Alle Elemente des Spektrums eines Schrödinger Operators sind Eigenwerte für Vektoren im Raum der lokal quadratintegrierbaren und polynomial beschränkten Funktionen.

Theorem 2.6.1 (Schnol-Simon). *Sei $H = H_0 + V(x)$ ein Schrödingerscher Operator. Dann gilt: $E \in \sigma(H)$ genau dann wenn eine lokal quadratintegrierbare, polynomial beschränkte Funktion $u_E(x)$ mit der Eigenschaft*

$$Hu_E(x) = Eu_E(x) \quad (2.89)$$

existiert. Des Weiteren kann jede Wellenfunktion $\psi \in L^2(\mathbb{R}^f, dx)$ nach den lokal quadratintegrierbaren, polynomial beschränkten Lösungen $u_E(x)$ entwickelt werden. Die Lösungen der stationären Schrödinger Gleichung sind also in einem erweiterten Sinn "vollständig" in $L^2(\mathbb{R}^f, dx)$, obwohl nicht alle diese Lösungen in $L^2(\mathbb{R}^f, dx)$ leben.

Die Funktion ψ heisst polynomial beschränkt, falls

$$|\psi(x)|(|x| + 1)^{-N} \in L^2(\mathbb{R}^3, d^3 x) \quad (2.90)$$

für ein $N < \infty$. Die Schreibweise $\overline{\{\dots\}}$ bezeichnet den Abschluss der Menge $\{\dots\}$. Die Funktion ψ heisst lokal quadratintegrierbar, falls für alle $x \in \mathbb{R}^3$ eine offene Umgebung $U_x \subset \mathbb{R}^3$ existiert, so dass $\psi|_{U_x} \in L^2(U_x, d^3 x)$.

2.6.9 Vom Spektrum zur Evolution der Zustände

Sei H ein selbstadjungierter, Schrödingerscher Operator, $\psi_0 \in L^2(\mathbb{R}^f, d^f x)$ und

$$\psi_t = e^{-\frac{i}{\hbar} H t} \psi_0. \quad (2.91)$$

Wir starten mit einer groben Klassifikation von Zuständen in $L^2(\mathbb{R}^f, d^f x)$ hinsichtlich der durch H beschriebenen Evolution.

Definition 2.12. Der Zustand ψ_t heisst *gebunden*, falls $\forall \epsilon > 0$ ein $R < \infty$ existiert, so dass

$$\sup_t \int_{|x| \geq R} |\psi_t(x)|^2 d^f x \leq \epsilon. \quad (2.92)$$

Der Zustand ψ_t ist *entweichend* oder *ungebunden*, falls

$$\lim_{T \rightarrow \infty} \frac{1}{T} \int_0^T dt \int_{|x| \leq R} d^f x |\psi_t(x)|^2 = 0. \quad (2.93)$$

für alle $R < \infty$.

Nehme an, dass $|\psi_t(x)|^2$ die Aufenthaltswahrscheinlichkeitsdichte eines Punktteilchens im physikalischen Raum \mathbb{R}^3 ist. Gemäss der Definition 2.12 gilt dann: Falls der Zustand des Punktteilchens gebunden ist, wird sich das Punktteilchen für alle Zeiten in einem endlichen Bereich in \mathbb{R}^3 aufhalten. Falls der Zustand des Punktteilchens entweichend ist, wird das Punktteilchen mit fortschreitender Zeit immer weiter gegen Unendlich propagieren.

Definition 2.13. Ein Zustand ψ_t heisst *stationär*, falls er die Zeitentwicklung einer Eigenfunktion ist, d.h. es existiert ein Eigenwert E und ein Vektor $u \in L^2(\mathbb{R}^f, dx)$, so dass

$$\psi_t = e^{-\frac{i}{\hbar}Ht}u(x) = e^{-\frac{i}{\hbar}Et}u(x). \quad (2.94)$$

Theorem 2.6.2. Sei H ein selbstadjungierter, Schrödingerscher Operator auf $L^2(\mathbb{R}^f, dx)$ und

$$\mathcal{H}_e := \text{span}\{\text{Eigenfunktionen von } H\}. \quad (2.95)$$

Dann gilt:

$$\psi_t \text{ ist gebunden} \Leftrightarrow \psi_t \in \mathcal{H}_e \text{ für } t \in \mathbb{R} \text{ beliebig,} \quad (2.96)$$

respektive

$$\psi_t \text{ ist entweichend} \Leftrightarrow \psi_t \in \mathcal{H}_e^\perp \text{ für } t \in \mathbb{R} \text{ beliebig.} \quad (2.97)$$

Dieses Theorem impliziert, dass die Unterteilung des Spektrums $\sigma(H)$ in ein Punktspektrum $\sigma_d(H)$ und in ein kontinuierliches Spektrum $\sigma_c(H)$ der Klassifizierung der Zustände in gebundene Zustände und entweichende Zustände entspricht!

2.7 Kopenhagen Heuristik

Wir betrachten ein physikalisches System Σ vor und nach der Messung einer Observablen A mit zugehörigen spektralen Projektoren $\{P_\Delta^{(A)}\}_\Delta$. Wir repräsentieren den Zustand des Systems vor der Messung durch eine Dichtematrix $\rho^{(-)}$ und den Zustand des Systems unmittelbar nach der Messung durch $\rho^{(+)}$. Nehme an, das Experiment schränke den Wert der Observablen A von \mathbb{R} auf ein Intervall $\Delta \subset \mathbb{R}$ ein. Die Kopenhagen Heuristik setzt sich aus den folgenden *Annahmen* zusammen.

Postulat 4. (I) Das von $\rho^{(-)}$ induzierte Wahrscheinlichkeitsmass $\mu^{(A)}$ auf dem Spektrum der Observablen $\{A\}$ beschreibt die Wahrscheinlichkeit, dass der Wert einer Observablen A in einem Intervall $\Delta \subset \sigma(A)$ liegt, d.h.

$$W_{\rho^{(-)}}^{(A)}(\Delta) = \mu^{(A)}(\Delta) = \omega^{(-)}(P_\Delta^{(A)}) = \text{tr}(\rho^{(-)}P_\Delta^{(A)}). \quad (2.98)$$

(II) Falls die Observable A im Zustand $\rho^{(+)}$ erneut gemessen wird, schränkt diese Messung den Wert der Observablen A mit Sicherheit auf ein Intervall Δ' ein, das in Δ enthalten ist, d.h.

$$W_{\rho^{(+)}}^{(A)}(\Delta) = \text{tr}(\rho^{(+)}P_\Delta^{(A)}) = 1. \quad (2.99)$$

(III) Sei P ein Projektor mit der Eigenschaft $\text{Bild}(P) \subseteq \text{Bild}(P_\Delta^{(A)})$ (Notation: $P \prec P_\Delta^{(A)}$). Dann gilt:

$$W_{\rho^{(-)}}^{(P)}(1) = W_{\rho^{(+)}}^{(P)}(1) W_{\rho^{(-)}}^{(A)}(\Delta). \quad (2.100)$$

Beispiel 2.4. Anstelle des allgemeinen Projektors P in (III) wählen wir den spektralen Projektor $P_{\Delta'}^{(A)}$, wobei $\Delta' \subset \Delta$. Dann gilt:

$$W_{\rho^{(-)}}^{(A)}(\Delta') = W_{\rho^{(-)}}^{(A)}(\Delta) W_{\rho^{(+)}}^{(A)}(\Delta').$$

Gemäss (I) definiert jeder Zustand ω anhand der Gleichung

$$W_{\omega}^A(\Delta) = \omega(P_{\Delta}^{(A)}). \quad (2.101)$$

eine Familie $\{\mu_{(A)}\}_A$ von Wahrscheinlichkeitsmassen auf den Spektren der Observablen. Es gilt jedoch nicht, dass sich jede beliebige Familie $\{\nu^{(A)}\}_A$ von Wahrscheinlichkeitsmassen auf den Spektren der Observablen in der Form (2.101) schreiben lässt, wenn wir fordern, dass ω ein Zustand (positives, normiertes, schwachstetiges, lineares Funktional) ist. Das Postulat (I) beinhaltet somit die Annahme, dass alle in experimentellen Messungen (an Systemen im Zustand ω) beobachteten Verteilungen von Messwerten von der Form (2.101) sind.

Beispiel 2.5. Sei $\omega_{[\psi]}$ der zu $[\psi] \subset \mathcal{H}$ gehörende reine Zustand. Dann gilt:

$$\omega_{[\psi]}(\cdot) = \langle \psi, (\cdot)\psi \rangle$$

und

$$W_{[\psi]}^A(\Delta) = \langle \psi, P_{\Delta}^{(A)}\psi \rangle.$$

Sei $a \in \mathbb{R}$ ein Eigenwert von A mit zugehörigem Eigenvektor ξ . Dann ist die Wahrscheinlichkeit $W_{[\psi]}^A(a)$ im Experiment den Wert a zu messen geben durch

$$W_{[\psi]}^A(a) = \langle \psi, P_{\xi}^{(A)}\psi \rangle = |\langle \psi, \xi \rangle|^2$$

($P_{\xi}^{(A)}$ ist der Projektor auf den eindimensionalen Raum $\mathbb{C} \cdot \xi \subset \mathcal{H}$).

Theorem 2.7.1 (Reduktion des Zustands). *Sei $\rho^{(-)}$ die Dichtematrix eines physikalischen Systems vor der Messung einer Observablen A . Nehme an wir messen, dass der Wert der Observablen A im Intervall $\Delta \in \mathbb{R}$ liegt. Dann ist der Zustand $\rho^{(+)}$ nach der Messung gegeben durch*

$$\rho^{(+)} = \frac{P_{\Delta}^{(A)}\rho^{(-)}P_{\Delta}^{(A)}}{\text{tr}(P_{\Delta}^{(A)}\rho^{(-)})}. \quad (2.102)$$

Beweis. Gemäss (2.100) gilt

$$\text{tr}(P\rho^{(-)}) = \text{tr}(P_{\Delta}^{(A)}\rho^{(-)})\text{tr}(P\rho^{(+)})$$

für alle Projektoren $P \prec P_{\Delta}^{(A)}$. Unter Ausnutzung der Linearität der Spur folgt also

$$\text{tr}(P\rho^{(+)}) = \text{tr}\left(\frac{P\rho^{(-)}}{\text{tr}(P_{\Delta}^{(A)}\rho^{(-)})}\right).$$

Da $P \prec P_{\Delta}^{(A)}$, gilt $P_{\Delta}^{(A)}P = PP_{\Delta}^{(A)} = P$, und somit

$$\text{tr}(P\rho^{(+)}) = \text{tr}\left(P\frac{P_{\Delta}^{(A)}\rho^{(-)}P_{\Delta}^{(A)}}{\text{tr}(P_{\Delta}^{(A)}\rho^{(-)})}\right) \quad (2.103)$$

für alle $P \prec P_{\Delta}^{(A)}$. Aus Postulat (II) folgt

$$P_{\Delta}^{(A)} \rho^{(+)} P_{\Delta}^{(A)} = \rho^{(+)},$$

weil $\text{tr}(\rho^{(+)}) = 1$. Um Behauptung (2.102) zu beweisen, bleibt zu zeigen, dass aus

$$\text{tr}(P\rho_1) = \text{tr}(P\rho_2), \quad \forall P \prec P_{\Delta}^{(A)} \quad (2.104)$$

$\rho_1 = \rho_2$ folgt, wenn ρ_1 und ρ_2 Dichtematrizen auf $\text{Bild}(P_{\Delta}^{(A)})$ sind. Zu diesem Zweck sei daran erinnert, dass $\rho_1, \rho_2, P \in \mathcal{J}_1 \subset \mathcal{J}_2$, dass \mathcal{J}_2 ein Hilbertraum mit Skalarprodukt $\langle A, B \rangle_2 = \text{tr}(A^*B)$ ist, dass alle Elemente von \mathcal{J}_2 kompakte Operatoren sind, dass das Spektrum $\{a_1, a_2, \dots\}$ eines kompakten Operators A rein diskret ist, und dass für jeden kompakten Operator A eine Familie $\{P_j^{(A)}\}_j$ orthogonaler Projektoren existiert, so dass

$$A = \sum_j a_j P_j^{(A)}.$$

Die Menge $\{P \mid P \prec P_{\Delta}^{(A)}\}$ enthält somit vollständige orthonormale Systeme des separablen Hilbertraums $\mathcal{J}_2(\text{Bild}(P_{\Delta}^{(A)}))$. Sei $\{Q_j\}_j$ ein solches VONS. Dann aufgrund der Identität (2.104), dass

$$\langle Q_j, \rho_1 \rangle_2 = \langle Q_j, \rho_2 \rangle_2$$

für alle j . Wir schliessen also, dass aus der Eigenschaft (2.104) in der Tat $\rho_1 = \rho_2$ folgt. Die Anwendung dieser Beobachtung auf (2.103) liefert den Beweis der Behauptung

$$\rho^{(+)} = \frac{P_{\Delta}^{(A)} \rho^{(-)} P_{\Delta}^{(A)}}{\text{tr}(P_{\Delta}^{(A)} \rho^{(-)})}.$$

□

Beispiel 2.6 (Reduktion reiner Zustände). Nehme an, dass System befinde sich vor der Messung in einem reinen Zustand $|\psi\rangle$. Die zugehörige Dichtematrix ist dann $\rho^{(-)} = |\psi\rangle\langle\psi|$. Gemäss Theorem 2.7.1 ist der Zustand nach der Messung eines exakten Werts α einer Observablen A gegeben durch

$$\rho^{(+)} = \frac{P_{\alpha}^{(A)} |\psi\rangle\langle\psi| P_{\alpha}^{(A)}}{\text{tr}(P_{\alpha}^{(A)} |\psi\rangle\langle\psi|)}.$$

Der Zustand nach der Messung ist also ein reiner Zustand, der dargestellt werden kann als der zum selbstadjungierten Operator A gehörende Eigenvektor

$$\frac{P_{\alpha}^{(A)} \psi}{\|P_{\alpha}^{(A)} \psi\|}. \quad (2.105)$$

2.8 Klassische Mechanik - Quantenmechanik

Die folgende Tabelle liefert einen Übersetzungsschlüssel zwischen der klassischen Mechanik und der Quantenmechanik für ein System mit n Freiheitsgraden.

	<i>Klassische Mechanik</i>	<i>Quantenmechanik</i>
Algebra der Observablen	$C(\mathbb{R}^{2n})$	$\mathcal{B}(\mathcal{H})$
Observable	$f \in C(\mathbb{R}^{2n})$ reellwertig	$A \in \mathcal{B}(\mathcal{H})$ selbstadjungiert
Zustände	normiertes, positives, lineares Funktional auf $C(\mathbb{R}^{2n})$	normiertes, positives, schwach-stetiges, lineares Funktional auf $\mathcal{B}(\mathcal{H})$
Realisierung als	$\int_{\mathbb{R}^{2n}} f d\mu(p, q)$	$\text{tr}(\rho A), \langle \kappa, A\kappa \rangle_2$
Reine Zustände	$(p, q) \in \mathbb{R}^{2n}$	$[\psi] \in P(\mathcal{H})$
Zeitevolution	$\dot{f} = \{f, h\}$	$i\hbar\dot{\psi} = H\psi$ $i\hbar\dot{A} = [A, H]$ $i\hbar\dot{\rho} = [H, \rho]$

Kapitel 3

Einfache quantenmechanische Systeme

Im Rahmen des vorliegenden Kapitels untersuchen wir die folgende Fragestellung für eine Reihe quantenmechanischer Probleme, deren Dynamik durch einen Schrödinger Operator H beschrieben wird: Wie verhält sich ein reiner Zustand $[\psi_0]$ ($\psi_0 \in L^2(\mathbb{R}^f, dx)$ beliebig) zur Zeit $t = 0$ unter Zeitevolution? Die Zeitevolution eines stationären Zustands u_E ¹ ist

$$u_E(x, t) = e^{-\frac{i}{\hbar}Et}. \quad (3.1)$$

Gemäss dem Schnol-Simon'schen Theorem 2.6.1 lässt sich $\psi_0(x)$ nach den lokal quadratintegrierbaren, polynomial beschränkten stationären Lösungen entwickeln:

$$\psi_0 = \sum_{E \in \sigma_p(H)} A(E)u_E + \int_{\{E \in \sigma_c(H) | u_E \in \mathfrak{L}(\mathbb{R}^f, d^f x)\}} dE B(E)u_E, \quad (3.2)$$

wobei $\mathfrak{L}(\mathbb{R}^f, d^f x)$ den Raum der lokal quadratintegrierbaren, polynomial beschränkten Funktionen von \mathbb{R}^f nach \mathbb{C} bezeichnet. Aufgrund der Linearität der zeitabhängigen Schrödinger Gleichung ergibt sich also

$$\psi(x, t) = \sum_{E \in \sigma_p(H)} A(E)u_E e^{-\frac{i}{\hbar}Et} + \int_{\{E \in \sigma_c(H) | u_E \in \mathfrak{L}(\mathbb{R}^f, d^f x)\}} dE B(E)u_E e^{-\frac{i}{\hbar}Et} \quad (3.3)$$

für die Zeitevolution des reinen Zustands $[\psi_0]$ zur Zeit $t = 0$. Die im folgenden explizit diskutierten Systeme sind das freie Teilchen, Teilchen in einer Dimension unter dem Einfluss stückweise konstanter Potentiale, der harmonische Oszillator und das Wasserstoffatom.

¹Die Funktion u_E erfüllt also die Gleichung $Hu_E = Eu_E$, muss aber nicht zwingendermassen in $L^2(\mathbb{R}^f, dx)$ liegen

3.1 Das kräftefreie Teilchen

Wir betrachten ein freies Punktteilchen der Masse m , das im Raum \mathbb{R}^3 lebt. Der klassische Phasenraum dieses Systems ist \mathbb{R}^6 . Der Raum der reinen quantenmechanischen Zustände ist $L^2(\mathbb{R}^3, dx)$. Die Hamiltonfunktion eines klassischen Teilchens mit Masse m auf das keine resultierende Kraft einwirkt ist

$$h = \frac{p_{cl}^2}{2m}. \quad (3.4)$$

Aus der Korrespondenzregel (d.h. die klassischen Observablen Impuls und Ort werden durch die quantenmechanischen Observablen Impuls und Ort ersetzt) erhalten wir den Hamiltonoperator

$$H = \frac{p^2}{2m} = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta. \quad (3.5)$$

für ein freies quantenmechanisches Teilchen. Nehme an, der Zustand des Teilchens zur Zeit $t = 0$ sei der reine Zustand $\phi(x)$ ($x \in \mathbb{R}^3$). Wir interessieren uns für den Zustand des Punktteilchens zur Zeit $t > 0$. Folglich muss die Schrödingergleichung

$$i\hbar\partial_t\psi(x, t) = H\psi(x, t) = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\psi(x, t) \quad (3.6)$$

gelöst werden. Die zugehörige zeitunabhängige Schrödinger Gleichung lautet

$$Hu_E(x) = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta u_E(x) = Eu_E(x). \quad (3.7)$$

Wenn $E \in \sigma_c(H)$ existiert kein L^2 -Eigenvektor mit Eigenwert E . Dennoch existiert gemäss dem Schnol-Simon'schen Theorem 2.6.1 eine lokal quadratintegrierbare, polynomial beschränkte Funktion $\tilde{u}_E(x)$ (kein Vektor in $L^2(\mathbb{R}, dx)$), welche der Gleichung

$$H\tilde{u}_E(x) = E\tilde{u}_E(x) \quad (3.8)$$

genügt. Die Funktionen $\{\tilde{u}_E(x) | E \in \sigma_c(H)\}$ sind die ebenen Wellen $e^{ik \cdot x}$ ($k \in \mathbb{R}^3$), da

$$\Delta e^{ik \cdot x} = -\|k\|^2 e^{ik \cdot x}. \quad (3.9)$$

Es gilt somit $\sigma(H) = [0, +\infty)$ (siehe Satz 2.13). Aus

$$Ee^{ik \cdot x} = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta e^{ik \cdot x} = -\frac{\hbar^2}{2m}(-\|k\|^2)e^{ik \cdot x}$$

folgt für den zu $k \in \mathbb{R}^3$ gehörenden Energie-Eigenwert die Beziehung

$$E(k) = \frac{\hbar^2\|k\|^2}{2m} \quad (3.10)$$

und wir erhalten unter Berücksichtigung von

$$pe^{ik \cdot x} = -i\hbar\nabla e^{ik \cdot x} = \hbar k e^{ik \cdot x} \quad (3.11)$$

die Zeitevolution

$$\tilde{\psi}_E(x, t) = e^{\frac{i}{\hbar}(p \cdot x - Et)} \quad (3.12)$$

des stationären Zustands $\tilde{u}_E(x) = e^{ik \cdot x}$. Nehme nun an, wir seien an der freien Evolution eines reinen Zustands $\psi(x, 0) \in L^2(\mathbb{R}, dx)$ interessiert. Die Bestimmung des evolvierten Zustands $\psi(x, t)$ erfolgt dann durch die Zeitevolution der einzelnen Fourier-Komponenten der Anfangsbedingung $\psi(x, 0)$, d.h.

$$\psi(x, t) = e^{-\frac{i}{\hbar} H t} \psi(x, 0) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \int_{\mathbb{R}^3} dp (\psi(x, 0))^\wedge(p) e^{\frac{i}{\hbar}(p \cdot x - E t)}. \quad (3.13)$$

Beispiel: Gausssche Wellenpakete

Es ist üblich den reinen Zustand eines lokalisierten Teilchens zur Zeit $t = 0$ in Form von

$$\psi(x, 0) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \int_{\mathbb{R}^3} d^3 p (\psi(x, 0))^\wedge(p) e^{\frac{i}{\hbar} p \cdot x} \quad (3.14)$$

zu modellieren, wobei

$$(\psi(x, 0))^\wedge(p) = A e^{-d^2 \frac{(p-p_0)^2}{\hbar^2}} \quad (3.15)$$

eine Gausssche Glockenkurve ist, deren Breite durch $d \geq 0$ charakterisiert ist. Ziel ist die Bestimmung der Zeitevolution des reinen Zustands $\psi(x, 0)$ unter der Annahme der freien Evolution. Zu diesem Zweck berechnen wir das Integral

$$\psi(x, t) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \int_{\mathbb{R}^3} dp A e^{-d^2 \frac{(p-p_0)^2}{\hbar^2}} e^{\frac{i}{\hbar}(p \cdot x - E t)} \quad (3.16)$$

(siehe (3.13)). Dabei dürfen wir uns auf den eindimensionalen Fall beschränken, da das dreidimensionale Gaussche Wellenpaket in drei eindimensionale Wellenpakete faktorisiert. Die Substitutionen

$$a := \frac{d^2}{\hbar^2} + i \frac{t}{2m\hbar}, \quad b := \frac{d^2 p_0}{\hbar^2} + i \frac{x}{2\hbar}, \quad c := \frac{d^2 p_0^2}{\hbar^2} \quad (3.17)$$

und die Identität

$$\int_{\mathbb{R}} dx e^{-ax^2} = \sqrt{\frac{\pi}{a}} \quad (3.18)$$

führen uns auf

$$\begin{aligned} \psi(x, t) &= \frac{A}{(2\pi\hbar)^{1/2}} \int_{\mathbb{R}} dp e^{-a(p-\frac{b}{a})^2 + \frac{b^2}{a} - c} \\ &= \frac{A}{(2\pi\hbar)^{1/2}} \sqrt{\frac{\pi}{a}} e^{\frac{b^2}{a} - c}. \end{aligned} \quad (3.19)$$

Die zu $\psi(x, t)$ gehörende Wahrscheinlichkeitsdichte nimmt dann die Form

$$|\psi(x, t)|^2 = \frac{A^2}{(2\pi\hbar)} \frac{\pi}{|a|} e^{2\operatorname{Re}\left(\frac{b^2 - ac}{a}\right)} \quad (3.20)$$

an. Das Zwischenresultat (3.20) lässt sich anhand der Definitionen

$$v := \frac{p_0}{m}, \quad \Gamma := \frac{\hbar}{2md^2} \quad (3.21)$$

und dem der Normierungsbedingung $\|\psi(x, t)\| = 1$ entspringenden Wert

$$A = (8\pi d^2)^{1/4} \quad (3.22)$$

für A zu

$$|\psi(x, t)|^2 = \frac{1}{d\sqrt{2\pi(1+\Gamma^2 t^2)}} e^{-\frac{(x-vt)^2}{2d^2(1+\Gamma^2 t^2)}} \quad (3.23)$$

umformen. Dies zeigt, dass $|\psi(x, t)|^2$ für alle Zeiten eine Gaussische Glockenkurve ist, deren Maximum mit der Geschwindigkeit v propagiert, und deren Breite linear in t anwächst. Folglich *zerfließt* die Aufenthaltswahrscheinlichkeit unter der Zeitevolution.

Alternativer Zugang mit Hilfe der Greenschen Funktion

Ein alternativer Zugang zur Behandlung der partiellen Differenzialgleichung (3.5) führt über die Bestimmung der Greenschen Funktion $G(x-x', t)$ der Gleichung (3.6), d.h. wir bestimmen die Distributionslösung von (3.5) zur Anfangsbedingung

$$\psi(x, 0) = \delta(x), \quad (3.24)$$

welche auf die zu bestimmende Lösung

$$\psi(x, t) = G(x, t), \quad (3.25)$$

führt. Die Lösung von (3.6) mit Anfangsbedingung $\phi(x)$ ist

$$\psi(x, t) = \int_{\mathbb{R}^3} d^3 x' G(x-x', t) \phi(x'). \quad (3.26)$$

Die Anwendung der Fouriertransformation in x auf die Gleichung (3.6) ergibt die Gleichung

$$i\hbar\partial_t \hat{\psi}(k, t) = \frac{\hbar^2}{2m} k^2 \hat{\psi}(k, t), \quad (3.27)$$

($k \in \mathbb{R}^3$) deren Lösung

$$\hat{\psi}(k, t) = \hat{\psi}(k, 0) e^{-i\frac{\hbar^2}{2m} k^2 t} \quad (3.28)$$

ist. Mit Hilfe der inversen Fouriertransformation erhalten wir

$$\begin{aligned} \psi(x, t) &= \mathcal{F}_k^{-1}(\hat{\psi}(k, 0) e^{-i\frac{\hbar^2}{2m} k^2 t})(x) \\ &= \psi(x, 0) * \mathcal{F}_k^{-1}(e^{-i\frac{\hbar^2}{2m} k^2 t})(x) \\ &= \delta(x) * \mathcal{F}_k^{-1}(e^{-i\frac{\hbar^2}{2m} k^2 t})(x) \\ &= \mathcal{F}_k^{-1}(e^{-i\frac{\hbar^2}{2m} k^2 t})(x). \end{aligned} \quad (3.29)$$

Die quadratische Ergänzung

$$k \cdot x - \frac{\hbar k^2}{2m} t = -\left(\hbar k - \frac{m}{t} x\right)^2 \frac{t}{2m\hbar} + \frac{m}{2t\hbar} x^2 \quad (3.30)$$

im Exponenten des Integranden von

$$\psi(x, t) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \int d^3 k e^{ik \cdot x - i\frac{\hbar^2}{2m} k^2 t} \quad (3.31)$$

führt nach der Substitution

$$k \mapsto \eta := \hbar k - \frac{m}{t}x$$

auf

$$\psi(x, t) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \frac{1}{\hbar^3} e^{i\frac{m}{2\hbar}x^2} \int d^3\eta e^{-i\frac{t}{2m\hbar}\eta^2}. \quad (3.32)$$

Die Anwendung der Identität

$$\int_{\mathbb{R}} du e^{-iu^2} = \sqrt{\pi} e^{-i\pi/4} = \frac{\sqrt{\pi}}{\sqrt{i}} \quad (3.33)$$

für die Lösung dieses sog. Fresnel-Integrals ergibt somit

$$\psi(x, t) = \frac{1}{(i\hbar)^{3/2}} \left(\frac{m}{t}\right)^{3/2} e^{i\frac{m}{2\hbar}x^2}. \quad (3.34)$$

Gemäss (3.25) erhalten wir somit die Greensche Funktion

$$G(x - x', t) = \frac{1}{(i\hbar)^{3/2}} \left(\frac{m}{t}\right)^{3/2} e^{i\frac{m}{2\hbar}(x-x')^2}, \quad (3.35)$$

woraus sich die Lösung

$$\psi(x, t) = \frac{1}{(i\hbar)^{3/2}} \left(\frac{m}{t}\right)^{3/2} \int_{\mathbb{R}^3} d^3x' e^{i\frac{m}{2\hbar}(x-x')^2} \phi(x') \quad (3.36)$$

für alle Anfangsbedingungen $\phi(x)$ ergibt (siehe (3.26)). Wenn $|\phi(x)|$ integrierbar ist, folgt

$$|\psi(x, t)| \leq \text{const} \cdot \frac{1}{|t|^{3/2}}. \quad (3.37)$$

Wenn wir $|\psi(x, t)|^2$ als die Aufenthaltswahrscheinlichkeitsdichte des Teilchens interpretieren, so kann die Ungleichung (3.37) dahingehend interpretiert werden, dass die *Aufenthaltswahrscheinlichkeitsdichte des freien Teilchens unter der Zeitevolution zerfließt*. Die im letzten Abschnitt gemachte Beobachtung, dass die Aufenthaltswahrscheinlichkeitsdichte Gaußscher Wellenpakete zerfließt, ist ein Spezialfall von (3.37).

3.2 Eindimensionale Probleme mit stückweise konstanten Potentialen

Im folgenden betrachten wir Punktteilchen im Einfluss stückweise konstanter Potentiale $V(x)$. Es existiert also eine Partition $\mathcal{P} = \{p_1, \dots, p_N\}$ ($N \leq \infty$) von \mathbb{R} , so dass $V|_{[-\infty, p_1)} = V_l$, $V|_{[p_1, p_2)} = V_1, \dots$, $V|_{[p_N, +\infty)} = V_r$ (die Indices l und r bedeuten “links” und “rechts”). Im Rahmen der Diskussion dieser Systeme werden wir auf das folgende Lemma angewiesen sein.

Lemma 3.1. Sei $H = H_0 + V(x)$ ein Schrödinger Operator auf $L^2(\mathbb{R}, dx)$, $a \in \mathbb{R}$ beliebig und ψ ein stationäre Lösung. Nehme an, es existiere eine offene Umgebung U_a von a , so dass $V(x) < \infty$ für alle $x \in U_a$. Dann gilt: ψ und ψ' sind stetig in a .

Beweis. Sei $\epsilon > 0$ und $\delta := \epsilon/M$, wobei

$$M := \sup_{x \in U_a} \left| \frac{2m}{\hbar^2} (E - V(x)) \right|.$$

Die Zahl M ist endlich, falls E endlich ist. Demnach gilt für alle $y \in (a - \delta, a + \delta)$, dass

$$\begin{aligned} |\psi'(a) - \psi'(y)| &= \left| \int_y^a dx \psi'' \right| \\ &= \left| \int_y^a dx \left(-\frac{2m}{\hbar^2} \right) (E - V(x)) \psi \right| \\ &\leq |a - y| \sup_{x \in [y, a]} \left| \frac{2m}{\hbar^2} (E - V(x)) \right| \leq \delta M = \epsilon. \end{aligned}$$

Die Stetigkeit von ψ folgt aus der somit gezeigten Stetigkeit von ψ' bei $x = a$. \square

Ein Schrödinger Operator wirkt lokal auf eine Wellenfunktion ψ , d.h. das Bild $H\psi$ am Punkt $x = a$ hängt nur von den Werten von ψ in einer beliebig kleinen offenen Umgebung von $x = a$ ab. Dies gestattet es uns die Diskussion von Problemen auf \mathbb{R} folgendermassen anzugehen:

- (i) Wähle $E \in \sigma(H)$.
- (ii) Ermittle eine für den Potentialverlauf $V(x)$ günstige Partition $\mathcal{P} = (p_1, p_2, \dots, p_N)$ ($N \leq \infty$).
- (iii) Löse die zeitunabhängige Schrödinger Gleichung separat auf den offenen Intervallen $(-\infty, p_1)$, (p_1, p_2) , usw.
- (iv) Klebe die ermittelten Lösungen gemäss den Stetigkeitsbedingungen in Lemma 3.1 zusammen.

Die sich ergebenden Funktionen sind stationäre Lösungen des Problems auf \mathbb{R} zur Energie E . Im Fall stückweise konstanter Potentiale wählt man die Partition \mathcal{P} natürlich derart, dass $V(x)$ innerhalb der durch \mathcal{P} definierten Intervalle konstant ist. Innerhalb dieser Intervalle sind somit nur zwei verschiedene Typen von Problemen zu lösen:

- (i) $V(x) = V_0$ ist konstant und $E > V$.
- (ii) $V(x) = V_0$ ist konstant und $E < V$.

Der erste Fall beschreibt quantenmechanische Teilchen auf die keine Kräfte einwirken, den wir im letzten Abschnitt diskutiert haben. Zu lösen ist

$$\psi_j''(x) = -\frac{2m}{\hbar^2} \underbrace{(E - V_j)}_{>0} \psi_j(x) \quad (3.38)$$

auf einem Intervall (p_j, p_{j+1}) . Die allgemeine Lösung ist

$$\psi_j(x) = a_j e^{ik_j x} + b_j e^{-ik_j x} \quad (3.39)$$

mit

$$k_j = \frac{\sqrt{2m(E - V)}}{\hbar} \quad (3.40)$$

und $a_j, b_j \in \mathbb{C}$ beliebig. Im zweiten Fall ist

$$\psi_k''(x) = -\frac{2m}{\hbar^2} \underbrace{(E - V_k)}_{<0} \psi_k(x) \quad (3.41)$$

auf einem Intervall (p_k, p_{k+1}) zu lösen. Die allgemeine Lösung ist

$$\psi_k(x) = A_k e^{\alpha_k x} + B_k e^{-\alpha_k x} \quad (3.42)$$

mit

$$\alpha_k = \frac{\sqrt{2m(V_k - E)}}{\hbar}. \quad (3.43)$$

und $A_k, B_k \in \mathbb{C}$ beliebig. Die noch verbleibende Schwierigkeit besteht darin, diese Lösungen derart zusammen zu kleben, dass die sich ergebende Funktion ψ auf \mathbb{R} die Eigenschaft hat, dass sowohl ψ als auch ψ' stetig sind.

Wir rechnen nur ein Beispiel explizit. Betrachte den Übergang vom Intervall $(p_j p_{j+1})$ zum Intervall $(p_{j+1} p_{j+2})$ und nehme an, dass $V_j < E < V_{j+1}$. Die allgemeine Lösung auf $(p_j p_{j+1})$ lautet also

$$\psi_j(x) = a_i e^{ik_j x} + b_i e^{-ik_j x}, \quad (3.44)$$

während die allgemeine Lösung auf $(p_{j+1} p_{j+2})$

$$\psi_{j+1}(x) = A_{j+1} e^{\alpha_{j+1} x} + B_{j+1} e^{-\alpha_{j+1} x} \quad (3.45)$$

ist. Wir fixieren nun die Amplituden a_i und b_i und berechnen die Amplituden A_{j+1} und B_{j+1} . Aus der Stetigkeit von ψ und ψ' bei p_{j+1} ergeben sich die Gleichungen

$$\begin{aligned} \psi_l(0) &= a_l + b_l = A_1 + B_1 = \psi_1(0) \\ \psi_l'(0) &= ik_l(a_l - b_l) = -\alpha_1(A_1 - B_1) = \psi_1'(0), \end{aligned}$$

die sich nach A_1 und B_1 auflösen lassen. Man erhält

$$\begin{pmatrix} A_1 \\ B_1 \end{pmatrix} = M_{\uparrow}^{(0)} \begin{pmatrix} a_l \\ b_l \end{pmatrix} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 + \frac{ik_l}{\alpha_r} & 1 - \frac{ik_l}{\alpha_r} \\ 1 - \frac{ik_l}{\alpha_r} & 1 + \frac{ik_l}{\alpha_r} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_l \\ b_l \end{pmatrix}. \quad (3.46)$$

Dies war der Spezialfall $V_l < E < V_1$. Für andere Situationen wie bspw. $V_l < V_1 < E$ hätten wir andere (2×2) -Matrizen erhalten. Wir benützen die folgende Notation: Der untere Index der Matrix $M_{\uparrow}^{(0)}$ bedeutet, dass wir "eine Stufe rauf steigen" (alternativ hätte $M_{\downarrow}^{(0)}$ bedeutet, dass wir "eine Stufe runter steigen"). Der obere Index von $M_{\uparrow}^{(0)}$ bedeutet, dass E zwischen dem Potential V_l links der Stufe und dem Potential V_1 rechts der Stufe liegt (alternativ hätte $M_{\uparrow}^{(+)}$ resp. $M_{\uparrow}^{(-)}$ die Fälle $V_l < V_1 < E$ und $E < V_l < V_1$ beschrieben). Gehen wir nun weiter zur nächsten Potentialstufe am Punkt $p_2 > 0$ und nehmen an, dass dort

die Situation $V_2 < E < V_1$ auftritt. Aufgrund der Stetigkeit von ψ und ψ' sind nun die Gleichungen

$$\begin{aligned}\psi_1(p_1) &= A_1 e^{-\alpha_1 p_1} + B_1 e^{\alpha_1 p_1} = a_2 e^{ik_2 p_1} + b_2 e^{-ik_2 p_1} = \psi_2(p_1) \\ \psi_1'(p_1) &= -\alpha_1 (A_1 e^{-\alpha_1 p_1} - B_1 e^{\alpha_1 p_1}) = ik_2 (a_2 e^{ik_2 p_1} - b_2 e^{-ik_2 p_1}) = \psi_2'(p_2)\end{aligned}$$

zu lösen. Diese lassen zu

$$\begin{pmatrix} a_2 \\ b_2 \end{pmatrix} = M_{\downarrow}^{(0)} M_{\rightarrow}^{(-)} \begin{pmatrix} A_1 \\ B_1 \end{pmatrix} \quad (3.47)$$

umformen, wobei

$$M_{\downarrow}^{(0)} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 + \frac{\alpha_l}{ik_r} & 1 - \frac{\alpha_l}{ik_r} \\ 1 - \frac{\alpha_l}{ik_r} & 1 + \frac{\alpha_l}{ik_r} \end{pmatrix} \quad (3.48)$$

beschreibt, wie wir die Potentialstufe runter steigen, und

$$M_{\rightarrow}^{(-)} = \begin{pmatrix} e^{\alpha_1 p_1} & 0 \\ 0 & e^{-\alpha_1 p_1} \end{pmatrix} \quad (3.49)$$

beschreibt, wie sich die Wellenfunktion auf $(0, p_1)$ beim Übergang $0 \rightarrow p_1$ ändert (alternativ hätte $M_{\rightarrow}^{(+)}$ die Propagation entlang einer Stufe im Fall $V_1 < E$ bedeutet). Dies setzt sich auf diese Weise nun immer weiter fort. Beispielsweise verknüpft die Relation

$$\begin{pmatrix} a_r \\ b_r \end{pmatrix} = M_{\uparrow}^{(0)} M_{\rightarrow}^{(-)} M_{\downarrow}^{(0)} M_{\rightarrow}^{(+)} M_{\uparrow}^{(+)} M_{\rightarrow}^{(+)} M_{\uparrow}^{(0)} M_{\rightarrow}^{(-)} M_{\downarrow}^{(-)} M_{\rightarrow}^{(+)} M_{\downarrow}^{(0)} \begin{pmatrix} a_l \\ b_l \end{pmatrix} \quad (3.50)$$

die Amplituden der Wellenfunktion auf $(-\infty, 0)$ mit den Amplituden der Wellenfunktion auf (p_6, ∞) im Fall von fünf Potentialstufen. Für den sich damit ergebenden stationären Zustand gilt dann

$$\psi|_{(-\infty, 0)}(x) = \psi_l(x) = a_l e^{ik_l x} + b_l e^{-ik_l x} \quad (3.51)$$

und

$$\psi|_{(p_6, \infty)}(x) = \psi_r(x) = a_r e^{ik_r(x-p_6)} + b_r e^{-ik_r(x-p_6)}. \quad (3.52)$$

Die Subtraktion von p_6 in der Phase ist notwendig, da die Wellenfunktion in (p_6, ∞) und nicht $(0, \infty)$ lebt. Zu Beginn haben wir den Ursprung von \mathbb{R} nach p_1 verschoben. Wenn wir den erhaltenen stationären Zustand wieder zurück schieben erhalten wir

$$\psi|_{(-\infty, 0)}(x) = \psi_l(x) = a_l e^{ik_l(x-p_1)} + b_l e^{-ik_l(x-p_1)} \quad (3.53)$$

und

$$\psi|_{(p_6, \infty)}(x) = \psi_r(x) = a_r e^{ik_r(x-p_6-p_1)} + b_r e^{-ik_r(x-p_6-p_1)}. \quad (3.54)$$

Abschliessend listen wir alle möglichen M -Matrizen auf, die man auch *Trans-*

fermatrizen nennt (die Indices “l” und “r” bedeuten links und rechts):

$$\begin{aligned}
M_{\downarrow}^{(-)} &= \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 + \frac{\alpha_l}{\alpha_r} & 1 - \frac{\alpha_l}{\alpha_r} \\ 1 - \frac{\alpha_l}{\alpha_r} & 1 + \frac{\alpha_l}{\alpha_r} \end{pmatrix} \\
M_{\uparrow}^{(-)} &= \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 + \frac{\alpha_l}{\alpha_r} & 1 - \frac{\alpha_l}{\alpha_r} \\ 1 - \frac{\alpha_l}{\alpha_r} & 1 + \frac{\alpha_l}{\alpha_r} \end{pmatrix} \\
M_{\downarrow}^{(0)} &= \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 + \frac{\alpha_l}{ik_r} & 1 - \frac{\alpha_l}{ik_r} \\ 1 - \frac{\alpha_l}{ik_r} & 1 + \frac{\alpha_l}{ik_r} \end{pmatrix} \\
M_{\uparrow}^{(0)} &= \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 + \frac{ik_l}{\alpha_r} & 1 - \frac{ik_l}{\alpha_r} \\ 1 - \frac{ik_l}{\alpha_r} & 1 + \frac{ik_l}{\alpha_r} \end{pmatrix} \\
M_{\downarrow}^{(+)} &= \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 + \frac{k_l}{k_r} & 1 - \frac{k_l}{k_r} \\ 1 - \frac{k_l}{k_r} & 1 + \frac{k_l}{k_r} \end{pmatrix} \\
M_{\uparrow}^{(+)} &= \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 + \frac{k_l}{k_r} & 1 - \frac{k_l}{k_r} \\ 1 - \frac{k_l}{k_r} & 1 + \frac{k_l}{k_r} \end{pmatrix}
\end{aligned} \tag{3.55}$$

weiter gilt

$$\begin{aligned}
M_{\rightarrow}^{(+)} &= \begin{pmatrix} e^{-ik_j(p_{j+1}-p_j)} & 0 \\ 0 & e^{+ik_j(p_{j+1}-p_j)} \end{pmatrix} \\
M_{\rightarrow}^{(-)} &= \begin{pmatrix} e^{\alpha_j(p_{j+1}-p_j)} & 0 \\ 0 & e^{-\alpha_j(p_{j+1}-p_j)} \end{pmatrix}
\end{aligned} \tag{3.56}$$

für die Propagation entlang einer Stufe der Breite $p_{j+1} - p_j$. Mit diesen Formeln lassen sich die stationären Lösungen beliebiger stückweise konstanter Potential mit Hilfe einer Matrixmultiplikation ermitteln.

3.3 Der harmonische Oszillator

Die Hamiltonfunktion des klassischen harmonischen Operators ist

$$h = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2. \tag{3.57}$$

Gemäss der Korrespondenzregel erhalten wir aus dieser Hamiltonfunktion den Hamiltonoperator

$$H = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2, \quad p = -i\hbar\partial_x, \tag{3.58}$$

und die zeitabhängige Schrödingergleichung

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(x, t) = \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2 \right) \psi(x, t) \tag{3.59}$$

des quantenmechanischen harmonischen Oszillators.

3.3.1 Der analytische Zugang

Mit dem Separationsansatz

$$\psi(x, t) = u(x)e^{\frac{-i}{\hbar}Et}. \quad (3.60)$$

ergibt sich die zeitunabhängige Schrödingergleichung

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} u(x) + \frac{1}{2} m \omega^2 x^2 u(x) = E u(x). \quad (3.61)$$

Die Einführung der reskalierten und dimensionslosen Variablen

$$\epsilon := \frac{E}{\hbar\omega}; \quad \xi := \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} x. \quad (3.62)$$

führt auf die gewöhnliche Differentialgleichung

$$\tilde{H}u(\xi) := -u''(\xi) + \xi^2 u(\xi) = 2\epsilon u(\xi), \quad (3.63)$$

die es nun zu lösen gilt. Zu diesem Zweck gilt es die folgenden Punkte zu bearbeiten:

- (i) Wahl eines Ansatzes für die Eigenfunktionen $u(x)$ anhand der Untersuchung des asymptotischen Verhaltens der Lösung.
- (ii) Lösung des Eigenwert-Problems für diesen Ansatz.
- (iii) Beweis, dass wir das Eigenwert-Problem vollständig gelöst haben, d.h., dass das Spektrum von \tilde{H} besteht nur aus den Eigenwerten unserer Ansatz-Eigenfunktionen.

Die Diskussion von Punkt (iii) verschieben wir in einen separaten Abschnitt nach der Beschreibung des algebraischen Zugangs zum harmonischen Oszillator.

Schritt (i): Ansatz für die Eigenfunktionen

Zur Bestimmung eines geschickten Ansatzes für die Lösung der Differentialgleichung (3.63) lösen wir (3.63) im asymptotischen Regime $|\xi| \rightarrow \infty$. Anschliessend nutzen wir aus, dass unsere Ansatz-Funktionen im Limes $|\xi| \rightarrow \infty$ gegen die zuvor bestimmten asymptotischen Lösungen streben müssen. Im asymptotischen Regime geht die Gleichung (3.63) in die Gleichung

$$-u''_{\infty} + \xi^2 u_{\infty} = 0 \quad (3.64)$$

über mit den Lösungen

$$u_{\infty}^{(\pm)}(\xi) = e^{\pm \frac{1}{2}\xi^2}. \quad (3.65)$$

Gemäss dem Schnol-Simon'schen Theorem 2.6.1 sind die verallgemeinerten Eigenfunktionen (damit meinen wir diejenigen Eigenfunktionen, die nicht in $L^2(\mathbb{R}^3, dx)$ liegen) polynomial beschränkt. Folglich ist $u_{\infty}^{(+)}(\xi)$ für die Konstruktion eines Lösungs-Ansatzes nicht zu gebrauchen. Die Forderung, dass die Lösungen von (3.63) für $|\xi| \rightarrow \infty$ gegen $u_{\infty}^{(-)}(\xi)$ streben muss, führt uns auf den Ansatz

$$u(\xi) = e^{-\frac{1}{2}\xi^2} w(\xi), \quad (3.66)$$

den wir in (3.63) einsetzen, um die Differentialgleichung

$$\frac{d^2w}{d\xi^2} - 2\xi \frac{dw}{d\xi} + (2\epsilon - 1)w = 0 \quad (3.67)$$

für $w(\xi)$ zu erhalten.

Schritt (ii): Lösung des Eigenwert-Problems für diesen Ansatz

Der Potenzreihenansatz

$$w(\xi) = \sum_{k=0}^{\infty} a_k \xi^k \quad (3.68)$$

führt auf die Rekursionsformel

$$a_{k+2} = \frac{2k - (2\epsilon - 1)}{(k+2)(k+1)} a_k, \quad k = 0, 1, 2, \dots \quad (3.69)$$

für die Koeffizienten $\{a_k\}_k$. Wir nehmen nun an, dass $a_k \neq 0$ für alle k . Für grosse Werte von k folgt daraus

$$a_{k+2} \sim \frac{2}{k} a_k. \quad (3.70)$$

Für grosse Werte von ξ ergibt sich also das Verhalten

$$w(\xi) \sim \sum_k \frac{1}{k!} \xi^{2k} \sim e^{\xi^2}, \quad (3.71)$$

und somit

$$u(\xi) \sim e^{\xi^2/2} \quad (3.72)$$

für $|\xi| \rightarrow \infty$. Dies steht im Widerspruch mit dem Schnol-Simon'schen Satz. Die Annahme $a_k \neq 0$ für alle k war also falsch. Aus der Rekursion (3.69) schliessen wir, dass

$$a_k = 0 \quad (3.73)$$

für grosse k , was nur dann möglich ist, falls ein $n \in \mathbb{N}_0$ existiert, so dass

$$\epsilon = n + \frac{1}{2}. \quad (3.74)$$

Damit bricht entweder die Teilfolge mit geraden resp. ungeraden Indices ab. Die jeweils andere Teilfolge setzen wir gleich Null. Das sich ergebende Polynom n -ten Grades mit Parität $(-1)^n$ ist das sog. Hermite Polynom H_n . Aus (3.67) folgt:

$$H_n'' - 2\xi H_n' + 2nH_n = 0, \quad (3.75)$$

so dass

$$u_n(\xi) = H_n(\xi) e^{-\frac{1}{2}\xi^2}. \quad (3.76)$$

Für $n = 0$ besteht die Potenzreihenentwicklung von $w(\xi)$ resp. $H_0(\xi)$ nur noch aus dem konstanten Term nullter Ordnung in ξ . Die Eigenfunktion $u_0(\xi)$ nimmt folglich die Form

$$u_0(\xi) = C_0 e^{-\frac{1}{2}\xi^2} \quad (3.77)$$

an. Als nächstes definieren wir die Operatoren

$$\begin{aligned} a^* &:= \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\xi - \frac{d}{d\xi}\right) = \frac{m\omega x - ip}{\sqrt{2m\omega\hbar}} \\ a &:= \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\xi + \frac{d}{d\xi}\right) = \frac{m\omega x + ip}{\sqrt{2m\omega\hbar}}, \end{aligned} \quad (3.78)$$

die auf dem linearen Unterraum

$$\mathcal{A} = \{e^{-\frac{1}{2}\xi^2} p(\xi) \in L^2(\mathbb{R}, dx) \mid p(\xi) \text{ ist ein Polynom in } \xi\} \quad (3.79)$$

von $L^2(\mathbb{R}, dx)$ definiert sind, diesen invariant lassen und den Vertauschungsrelationen

$$[a, a^*] = 1 \quad (3.80)$$

genügen. Die Operatoren a^* , a sind also Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren, wie wir sie schon zu einem früheren Zeitpunkt eingeführt haben. Der zugehörige Zähleroperator ist

$$N = a^* a. \quad (3.81)$$

Auf $\mathcal{A} \subset L^2(\mathbb{R}, dx)$ definieren wir das Skalarprodukt

$$\langle v_1, v_2 \rangle := \int_{\mathbb{R}} d\xi v_1(\xi) v_2(\xi). \quad (3.82)$$

Damit wird \mathcal{A} zu einem Prähilbertraum (d.h. ein linearer Raum der bis auf die Forderung der Vollständigkeit dieselbe Struktur hat wie ein Hilbertraum).

Lemma 3.2. Die Operatoren a und a^* sind zueinander *adjungiert*, d.h.

$$\langle v_1, a^* v_2 \rangle = \langle a v_1, v_2 \rangle$$

für alle $v_1, v_2 \in \mathcal{A}$.

Dieses Lemma beweist man mit partieller Integration. Natürlich liegt u_0 in \mathcal{A} . Mit Hilfe der neuen Operatoren a^* , a lässt sich der Operator \tilde{H} in der Form

$$\tilde{H} = \hbar\omega \left(N + \frac{1}{2} \right) \quad (3.83)$$

schreiben. Anstelle von (3.63) erhalten wir

$$N u_n = \left(n - \frac{1}{2} \right) u_n = n u_n \quad (3.84)$$

Wir zeigen nun, dass uns die Anwendung von Potenzen des Erzeugungsoperators auf neue Eigenfunktionen führt.

Lemma 3.3. Es gilt:

$$u_{n+1} \propto (a^*) u_n.$$

Beweis. Aus der Vertauschungsrelation für a , a^* folgt

$$\begin{aligned} N(a^* u_n) &= a^* a a^* u_n = a^* (a^* a + [a, a^*]) u_n \\ &= a^* (N + 1) u_n = (n + 1) a^* u_n. \end{aligned} \quad (3.85)$$

Es bleibt also noch zu zeigen, dass $a^*u_n \neq 0$. Dies ist eine Konsequenz von Lemma 3.2:

$$\begin{aligned} \|a^*u_n\|^2 &= \langle a^*u_n, a^*u_n \rangle = \langle u_n, aa^*u_n \rangle \\ &= \langle u_n, (N+1)u_n \rangle = (n+1)\langle u_n, u_n \rangle. \end{aligned} \quad (3.86)$$

Da $\|u_n\|^2 = \langle u_n, u_n \rangle \neq 0$ folgt $\|a^*u_n\|^2 \neq 0$, und somit $a^*u_n \neq 0$ (siehe Definition einer Norm). \square

Wenn wir also mit u_0 starten, erhalten wir nach der Anwendung des Operators $(a^*)^n$ für jedes n eine neue Eigenfunktion. Nach der Normierung dieser Funktionen erhalten wir (siehe (3.77) und (3.86))

$$\begin{aligned} u_0(\xi) &= \pi^{-\frac{1}{4}} e^{-\frac{1}{2}\xi^2} \\ u_n(\xi) &= \pi^{-\frac{1}{4}} \frac{1}{\sqrt{n!}} (a^*)^n e^{-\frac{1}{2}\xi^2}. \end{aligned} \quad (3.87)$$

Wir haben folglich für jedes $n \in \mathbb{N}_0$ genau eine Eigenfunktion von \tilde{H} zum Eigenwert $\hbar(n+1/2)$ gefunden. Es bleibt zu zeigen, dass wir sämtliche Eigenfunktionen gefunden haben.

3.3.2 Der algebraische Zugang

Ein alternativer Zugang zur Behandlung des quantenmechanischen harmonischen Oszillators startet direkt mit der Definition eines Erzeugungsoperators a^* und der Definition eines Vernichtungsoperators a . Er ist algebraisch in dem Sinn, dass wir uns nur auf Vertauschungsrelationen beziehen. Wie im Abschnitt 2.3.1 definieren wir

$$\begin{aligned} a &:= \frac{1}{\sqrt{2\hbar}} \left(\kappa q + \frac{i}{\kappa} p \right), \\ a^* &= \frac{1}{\sqrt{2\hbar}} \left(\kappa q - \frac{i}{\kappa} p \right) \end{aligned} \quad (3.88)$$

mit $\kappa = \sqrt{m\omega}$ und der Eigenschaft

$$[a, a^*] = 1, \quad (3.89)$$

die eine direkte Konsequenz der Heisenbergschen Vertauschungsrelationen ist. Die Benützung der Definitionen (3.88) von a und a^* führt auf den Ausdruck

$$H = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2 = \hbar\omega \left(a^*a + \frac{1}{2}[a, a^*] \right) = \hbar\omega \left(a^*a + \frac{1}{2} \right). \quad (3.90)$$

für den Hamiltonoperator des harmonischen Oszillators. Wie in (2.6) definieren wir den Zähloperator $N = a^*a$ mit der Eigenschaft (2.8). Da a^* die Adjungierte zu a ist, gilt

$$\langle \psi, N\psi \rangle = \|a\psi\|^2 \geq 0 \quad (3.91)$$

für alle $\psi \in \mathcal{H}$. Daraus schliessen wir, dass $\sigma(N) \subset \{\lambda \in \mathbb{R} \mid \lambda \geq 0\}$. Gemäss (2.8) gilt für einen N -Eigenwert j mit zugehörigem Eigenraum $\text{Eig}(N, j)$, dass

$$\begin{aligned} a &: \text{Eig}(N, j) \rightarrow \text{Eig}(N, j-1) \\ a^* &: \text{Eig}(N, j) \rightarrow \text{Eig}(N, j+1). \end{aligned} \quad (3.92)$$

Sei n ein N -Eigenwert mit zugehörigem Eigenvektor ψ_n . Aus (3.92) folgern wir, dass

$$Na^k\psi_n = (n-k)a^k\psi_n \quad (3.93)$$

Die Gleichungen (3.91) und (3.93) sind nur dann verträglich, wenn $a^k\psi_n = 0 \in \mathcal{H}$ für $n-k < 0$. Es existiert also ein Vektor $\Omega \in \mathcal{H}$ ($\Omega \neq 0$) mit der Eigenschaft $a\Omega = 0 \in \mathcal{H}$ und $\Omega = a^l\Psi_n$ ($l \in \mathbb{N}_0$ und $l \leq n$). Üblicherweise nennt man den Vektor Ω *Vakuum*. Dieser Begriff stammt aus dem Formalismus der zweiten Quantisierung (siehe QM II). Aus

$$\|a\psi_n\|^2 = \langle a\psi_n, a\psi_n \rangle = \langle \psi_n, N\psi_n \rangle = n \quad (3.94)$$

folgt

$$\|a^k\psi_n\| = \sqrt{n}\sqrt{n-1} \cdots \sqrt{n-k+1}, \quad (3.95)$$

so dass

$$a\Omega = a^{l+1}\Psi_n = 0 \Leftrightarrow \|a^{l+1}\Psi_n\| = 0$$

nur dann möglich ist, falls $n \in \mathbb{N}_0$. Sei nun $m \in \mathbb{N}_0$ ein Eigenwert des Operators N mit Eigenvektor ψ_m . Dann sind die normierten Vektoren

$$\frac{1}{\sqrt{m(m-1)\cdots(m-s+1)}} a^s \psi_m \quad (3.96)$$

($s = 1, 2, \dots, m$) Eigenvektoren zu den Eigenwerten $m-1, m-2, \dots, 0$, während die normierten Vektoren

$$\frac{1}{\sqrt{(m+1)(m+2)\cdots(m+t+1)}} (a^*)^t \psi_m \quad (3.97)$$

($t = 1, 2, \dots$) Eigenvektoren zu den Eigenwerten $m+1, m+2, \dots$ sind. Alternativ könnten wir alle Eigenvektoren direkt aus dem Vakuum erzeugen:

$$\frac{1}{\sqrt{n!}} (a^*)^n \Omega \quad (3.98)$$

ist der normierte Eigenvektor des Zähloperators zum Eigenwert $n \in \mathbb{N}_0$ bzw. der normierte Eigenvektor des Hamiltonoperators

$$H = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2 = \hbar\omega \left(N + \frac{1}{2} \right) \quad (3.99)$$

zum Eigenwert

$$\hbar\omega \left(n + \frac{1}{2} \right). \quad (3.100)$$

Um explizite Wellenfunktionen zu erhalten ist es aber unumgebar eine explizite Darstellung π der Algebra der Observablen (und somit für die Operatoren a, a^*) zu wählen. Mit Hilfe der Operatoren $\pi(a)$ und $\pi(a^*)$ erzeugt man dann die Eigenvektoren zu den Eigenwerten in \mathbb{N}_0 aus einem gegebenen Eigenvektor $\psi_n \in \mathcal{H}$. Üblicherweise erzeugt man die Eigenvektoren aus dem Vakuum $\psi_0 = \Omega$, das die Gleichung

$$\pi(a)\Omega = 0 \quad (3.101)$$

löst. Wenn wir uns für die Schrödingersche Darstellung entscheiden, lautet (3.101)

$$\frac{1}{\sqrt{2}} \left(\xi + \frac{d}{d\xi} \right) \Omega = 0 \quad (3.102)$$

mit der Lösung

$$\Omega = c e^{-\xi^2/2} \quad (3.103)$$

($c \in \mathbb{R}$ konstant) die uns schon im letzten Abschnitt begegnet ist. Alle höheren Eigenfunktionen folgen dann mit Hilfe der Iteration

$$\frac{1}{\sqrt{n!}} \left(\frac{1}{\sqrt{2}} \left(\xi - \frac{d}{d\xi} \right) \right)^n \Omega, \quad (3.104)$$

was mit dem analytischen Resultat des letzten Abschnitts identisch ist.

3.3.3 Beweis, dass wir das Eigenwert-Problem vollständig gelöst haben

Die Behauptung, dass die Eigenfunktionen $\{u_n\}_{n \in \mathbb{N}_0}$ das Eigenwert-Problem vollständig lösen, ist eine Konsequenz des folgenden Satzes.

Satz 3.1. Die in Schritt (ii) konstruierten Funktionen $\{u_n\}_{n \in \mathbb{N}_0}$ (siehe (3.87)) bilden ein VONS in $L^2(\mathbb{R}, dx)$.

Beweis. Gemäss der Definition von VONS gilt es zu zeigen, dass $\{u_n\}_{n \in \mathbb{N}_0}$ ein orthonormales System in $L^2(\mathbb{R}, dx)$ ist, und dass kein Element in $L^2(\mathbb{R}, dx)$ existiert, das orthogonal ist zu allen Vektoren in $\{u_n\}_{n \in \mathbb{N}_0}$.

Behauptung 1: $\langle u_m, u_n \rangle = \delta_{mn}$.

Für $n = m$ gilt dies, weil wir die Vektoren $\{u_n\}_{n \in \mathbb{N}_0}$ normiert haben. Sei nun $n \neq m$. Wir starten mit den Beobachtungen, dass

$$\begin{aligned} \frac{d}{d\xi} (u'_m u_n - u_m u'_n) &= u''_m u_n - u_m u''_n = u''_m u_n - \xi^2 u_m u_n + \xi^2 u_m u_n - u_m u''_n \\ &= -(\tilde{H}u_m)u_n + (\tilde{H}u_n)u_m = (n - m)u_n u_m, \end{aligned} \quad (3.105)$$

(siehe (??)) und dass

$$\int_{\mathbb{R}} f' d\xi = 0$$

für alle $f \in \mathcal{A}$ (siehe (3.79)). Daraus lässt sich nun unsere erste Behauptung ableiten:

$$\begin{aligned} \langle u_n, u_m \rangle &= \int_{\mathbb{R}} u_n u_m d\xi \\ &= \int_{\mathbb{R}} \frac{1}{n - m} \frac{d}{d\xi} (u'_m u_n - u_m u'_n) d\xi = 0. \end{aligned} \quad (3.106)$$

Behauptung 2: $\langle f, u_n \rangle = 0$ für alle $n \in \mathbb{N}_0 \Rightarrow \langle f, \xi^n e^{-\xi^2/2} \rangle = 0$ für alle $n \in \mathbb{N}_0$. Diese Behauptung zeigen wir über Induktion nach n . Für $n = 0$ gilt die Behauptung nach Voraussetzung. Für die Behandlung des Falls $n = 1$ schreiben wir den Erzeugungsoperator in der Form

$$a^* = \frac{1}{\sqrt{2}} e^{\xi^2/2} \left(-\frac{d}{d\xi} \right) e^{-\xi^2/2} \quad (3.107)$$

(als Operatorgleichung) und beobachten, dass dann

$$\begin{aligned} 0 &= \langle f, u_1 \rangle = \langle f, \pi^{-1/4} a^* u_0 \rangle \\ &= \pi^{-1/4} \frac{1}{\sqrt{2}} \langle f, e^{\xi^2/2} \left(-\frac{d}{d\xi} \right) e^{-\xi^2/2} u_0 \rangle \\ &= \pi^{-1/2} \frac{2}{\sqrt{2}} \langle f, \xi e^{-\xi^2/2} \rangle, \end{aligned} \quad (3.108)$$

was die Behauptung für $n = 1$ beweist. Somit kommen wir zum Übergang $n \Rightarrow n + 1$:

$$\begin{aligned} 0 &= \langle f, u_{n+1} \rangle = \pi^{-\frac{1}{4}} \frac{1}{\sqrt{(n+1)!}} \langle f, (a^*)^{n+1} u_0 \rangle \\ &= \pi^{-\frac{1}{2}} \frac{1}{\sqrt{(n+1)!}} \langle f, \left(\frac{1}{\sqrt{2}} e^{\xi^2/2} \left(-\frac{d}{d\xi} \right) e^{-\xi^2/2} \right)^{n+1} e^{-\xi^2/2} \rangle \end{aligned} \quad (3.109)$$

Da $(a^*)^{n+1} e^{-\xi^2/2}$ ein Polynom von Grad $n + 1$ mal $e^{-\xi^2/2}$ ist, folgt daraus die Behauptung: wir schliessen, dass

$$\langle f, \xi^{n+1} e^{-\xi^2/2} \rangle = 0,$$

da

$$\langle f, \xi^k e^{-\xi^2/2} \rangle = 0$$

für alle $k = 0, \dots, n$ nach Induktionsvoraussetzung.

Behauptung 3: Sei $f \in L^2(\mathbb{R}, dx)$ eine Funktion mit der Eigenschaft $\langle u_n, f \rangle = 0$ für alle $n \in \mathbb{N}_0$. Dann gilt: $f = 0$.

Betrachte die Fouriertransformation

$$F(z) := \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{\mathbb{R}} dx \overline{f(x)} e^{-\frac{x^2}{2}} e^{-izx} \quad (3.110)$$

von $\overline{f(x)} e^{-\frac{x^2}{2}}$. Für $f \in L^2(\mathbb{R}, dx)$ ist dies eine ganze Funktion in $z \in \mathbb{C}$. Insbesondere existiert eine Potenzreihen-Darstellung

$$F(z) = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{F^{(n)}(z=0)}{k!} z^k,$$

wobei

$$F^{(n)}(z) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} (-i)^n \int_{\mathbb{R}} dx x^n \overline{f(x)} e^{-\frac{x^2}{2}} e^{-izx}$$

die n -te Ableitung von F bezeichnet. Gemäss Behauptung 2 gilt, dass $\langle u_n, f \rangle = 0$ für alle $n \in \mathbb{N}_0$ die Identität $F^{(n)}(z=0) = 0$ für alle $n \in \mathbb{N}_0$ impliziert. Somit folgt, dass

$$0 = F(z) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{\mathbb{R}} dx \overline{f(x)} e^{-\frac{x^2}{2}} e^{-izx}$$

für alle $z \in \mathbb{C}$, da alle Koeffizienten in der Potenzreihen-Darstellung von $F(z)$ verschwinden. Dies impliziert, dass

$$\overline{f(x)} e^{-\frac{x^2}{2}} = 0$$

fast überall (d.h. bis auf eine Menge mit Mass Null) und schlussendlich, dass $f(x) = 0$ fast überall, was zu zeigen war ($L^2(\mathbb{R}, dx)$ ist streng genommen nur dann ein Hilbertraum, falls Funktionen, die sich nur auf Nullmengen unterscheiden, identifiziert werden). \square

Fazit

Da die Eigenfunktionen

$$u_n(\xi) = \pi^{-1/4} 2^{-n/2} \frac{1}{\sqrt{n!}} e^{-\xi^2/2} H_n(\xi) \quad (3.111)$$

ein VONS in $L^2(\mathbb{R}, dx)$ bilden, lässt sich jede Anfangsbedingung des harmonischen Oszillators in Form der Entwicklung

$$\psi(x, 0) = \sum_{n=0}^{\infty} c_n u_n(x) \quad (3.112)$$

schreiben. Dann ist

$$\psi(x, t) = \sum_{n=0}^{\infty} c_n e^{-\frac{i}{\hbar} E_n t} u_n(x) \quad (3.113)$$

mit

$$E_n = \hbar\omega \left(n + \frac{1}{2} \right) \quad (3.114)$$

die Lösung der zeitabhängigen Schrödingergleichung in Bezug auf die angegebene Anfangsbedingung. Die Energie des Grundzustandes

$$E_0 = \frac{1}{2} \hbar\omega \quad (3.115)$$

wird als *Nullpunktsenergie* bezeichnet.

Bemerkungen zu den Hermite Polynomen

Zum Schluss unserer Diskussion des harmonischen Oszillators folgen nun der Vollständigkeit halber ein paar allgemeine Bemerkungen zu den Hermite Polynomen. Gemäss dem Weierstrass'schen Satz bilden die Monome $\{x^n\}_n$ eine vollständige Basis in $L^2(\mathbb{R}, dx)$. Die Anwendung des Gram-Schmidt'schen Orthonormierungsverfahrens bzgl. dem Skalarprodukt

$$\langle f, g \rangle = \int_{\mathbb{R}} \overline{f(x)} g(x) e^{-\frac{x^2}{2}} dx$$

liefern die Hermite Polynome H_n , welche die Gleichung (3.75) lösen. Aus (3.107) folgt die Identität

$$H_n = 2^{n/2} e^{\xi^2} \left(-\frac{d}{d\xi} \right)^n e^{-\xi^2}. \quad (3.116)$$

Mit Hilfe des Integralsatzes von Cauchy zeigt man, dass

$$H_n(\xi) = e^{-\xi^2} (-1)^n \frac{n!}{2\pi i} \oint_{\Gamma} \frac{e^{-\zeta^2}}{(\zeta - \xi)^{n+1}} d\zeta, \quad (3.117)$$

wobei man annimmt, dass $\Gamma \subset \mathbb{C}$ den Punkt ζ umschliesst. Die erzeugende Funktion der Hermite Polynome ist

$$\Phi(\xi, t) := \sum_{n=0}^{\infty} \frac{t^n}{n!} H_n(\xi) = e^{\xi^2 - (\xi-t)^2} \quad (3.118)$$

(dies zeigt man mit Hilfe der Darstellung (3.117)).

3.4 Zweikörperprobleme mit Coulomb-Wechselwirkung

Ziel dieses Abschnitts ist die Lösung quantenmechanischer Zweikörperprobleme mit Coulomb-Wechselwirkung. Wir starten mit einem physikalischen System, das sich aus zwei Punktteilchen zusammensetzt, deren Wechselwirkung durch ein sphärisch-symmetrisches Wechselwirkungspotential $V(\|x^{(1)} - x^{(2)}\|)$ gegeben ist. Der Hamiltonoperator ist also (gemäss der Korrespondenzregel)

$$H = \frac{(p^{(1)})^2}{2m_1} + \frac{(p^{(2)})^2}{2m_2} + V(\|x^{(1)} - x^{(2)}\|). \quad (3.119)$$

Wie in der klassischen Mechanik führen wir Schwerpunkts- und Relativkoordinaten (besser: Schwerpunktkoordinaten-Observable und Relativkoordinaten-Observable) ein:

- Schwerpunktsmasse: $M := m_1 + m_2$
- Reduzierte Masse: $m := \frac{m_1 m_2}{M}$
- Ort des Schwerpunkts: $X = \frac{m_1 x^{(1)} + m_2 x^{(2)}}{M}$
- Relativkoordinaten: $x := x^{(1)} - x^{(2)}$
- Schwerpunktsimpuls: $P = p^{(1)} + p^{(2)}$
- Relativimpuls: $p = \frac{m_2 p^{(1)} - m_1 p^{(2)}}{M}$

Die Heisenbergschen Vertauschungsrelationen gelten auch in diesen neuen Koordinaten:

$$\begin{aligned} [X_i, P_j] &= i\hbar\delta_{ij} \\ [x_i, p_j] &= i\hbar\delta_{ij} \\ [X_i, x_j] &= 0 \\ [P_i, p_j] &= 0. \end{aligned} \quad (3.120)$$

Dies ist eine direkte Folge der Vertauschungsrelationen der Observablen x_1, x_2, p_1, p_2 . Die Schrödingersche Darstellung des Systems (3.120) ist

$$P_j = -i\hbar \frac{\partial}{\partial X_j}, \quad p_j = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x_j} \quad (3.121)$$

3.4. ZWEIKÖRPERPROBLEME MIT COULOMB-WECHSELWIRKUNG 79

für $j = 1, 2, 3$ und es resultiert die zeitabhängige Schrödingergleichung

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(X, x, t) = \left[-\frac{\hbar^2}{2M} \frac{\partial^2}{\partial X^2} - \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(\|x^{(1)} - x^{(2)}\|) \right] \psi(X, x, t) \quad (3.122)$$

(im folgenden gilt $\nabla_x = \partial_x$ und $\Delta_x = \partial_x^2$). Der Separationsansatz

$$\psi(X, x, t) = \Phi(X, t) \varphi(x, t) \quad (3.123)$$

liefert einerseits die freie Schrödingergleichung

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Phi(X, t) = -\frac{\hbar^2}{2M} \frac{\partial^2}{\partial X^2} \Phi(X, t), \quad (3.124)$$

für die Schwerpunktsbewegung deren Lösungen bereits untersucht haben. Andererseits stossen wir auf die noch zu lösende Schrödingergleichung

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \varphi(x, t) = \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(\|x\|) \right] \varphi(x, t) \quad (3.125)$$

für die Relativbewegung. Die allgemeine Lösung des Gesamtproblems werden dann Linearkombinationen von Lösungen der Form (3.123) sein. Um fortzufahren benötigen wir die Definition des quantenmechanischen Drehimpulsoperators L , der die Form

$$L := x \wedge -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}. \quad (3.126)$$

hat. Den quantenmechanischen Drehimpulsoperator werden wir in einem späteren Kapitel eingehender studieren und zeigen, dass seine Komponenten wie im klassischen Fall die Erzeugenden von Rotationen sind. In Polarkoordinaten, die der sphärischen Symmetrie des Potentials angepasst sind, ergibt sich

$$L^2 = -\hbar^2 \Lambda, \quad \text{mit } \Lambda := \frac{1}{\sin(\theta)} \frac{\partial}{\partial \theta} \sin(\theta) \frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{1}{\sin^2(\theta)} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2}. \quad (3.127)$$

Der Operator Λ ist der Laplace-Beltrami Operator auf S^2 mit der von der Standardmetrik im \mathbb{R}^3 induzierten Metrik. Man kann zeigen (vgl. MMP Vorlesung), dass

$$\frac{\partial^2}{\partial \vec{x}^2} \equiv \Delta = \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r^2} \Lambda. \quad (3.128)$$

Mit

$$H_0 := -\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{1}{2mr^2} L^2. \quad (3.129)$$

erhalten wir die zeitunabhängige Schrödingergleichung

$$(H_0 + V(r)) \varphi(r, \theta, \varphi) = E \varphi(r, \theta, \varphi), \quad (3.130)$$

die zur Schrödinger Gleichung (3.125) gehört. An dieser Stelle sei daran erinnert, dass die Kugelfunktionen $\{Y_l^m(\theta, \varphi)\}_{l \in \mathbb{N}_0}^{m=-l, \dots, +l}$ Eigenfunktionen von Λ mit den Eigenwerten $-l(l+1)$ sind. Die Beobachtung, dass $(H_0 + V(r))$ sich aus Summanden zusammensetzt die entweder auf der radialen oder auf den sphärischen Anteil der Eigenfunktionen wirkt, und dass die Kugelfunktionen (die ein VONS

in $L^2(S^2, d\Omega)$ mit $d\Omega = \sin\theta d\theta d\varphi$ realisieren) Eigenfunktionen des sphärisch-wirkenden Anteils von $(H_0 + V(r))$ sind, führt uns auf den Separationsansatz

$$\varphi(r, \theta, \varphi) = \chi_l^m(r) Y_l^m(\theta, \varphi) \quad (3.131)$$

für alle $l \in \mathbb{N}_0$, $m \in \{-l, \dots, l\}$. Wir verwenden diesen Ansatz in (3.130) und erhalten die gewöhnliche Differenzialgleichung

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial}{\partial r} - \frac{l(l+1)}{r^2} + V(r) \right) \right] \chi_l^m(r) = E \chi_l^m(r) \quad (3.132)$$

für $\chi_l^m(r)$. Wir erkennen, dass $\chi_l^m(r)$ nicht von m abhängen kann und definieren daher $\chi_l(r) := \chi_l^m(r)$. Über den Ansatz

$$y_l(r) := r \chi_l(r). \quad (3.133)$$

gelangen wir schliesslich zur Eigenwertgleichung

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dr^2} + U_l(r) \right] y_l(r) = E y_l(r), \quad (3.134)$$

mit

$$U_l(r) = \frac{\hbar^2}{2mr^2} l(l+1) + V(r) \quad (3.135)$$

Dies entspricht dem Zwischenresultat

$$E = \frac{1}{2} m \|\dot{x}\|^2 + V_{\text{eff}}(\|x\|) \quad (3.136)$$

mit

$$V_{\text{eff}}(\|x\|) = V(\|x\|) + \frac{l^2}{2m\|x\|^2} \quad (3.137)$$

aus der Diskussion des klassischen Zweikörperproblems mit sphärisch-symmetrischem Wechselwirkungspotential, wobei l den klassischen Drehimpuls bezeichnet. Die Gleichung (3.134) beschreibt die Dynamik eines eindimensionalen quantenmechanischen Einteilchen-Problems mit Potential $U_l(r)$. Es ist uns also gelungen das ursprüngliche quantenmechanische Problem mit sechs Freiheitsgraden durch ein quantenmechanisches System mit nur einem Freiheitsgrad zu ersetzen.

3.4.1 Das Wasserstoffatom

Die Behandlung des Wasserstoffatoms ist eine Anwendung der bisherigen Überlegungen, wenn man für das Wechselwirkungspotential $V(\|x\|)$ das Coulomb-Potential einsetzt, d.h.

$$V(r) := -\frac{e^2}{r}, \quad (3.138)$$

mit $r := \|x\|$. In der Arbeit mit Atomen ist es üblich als Längeneinheit den *Bohrschen Radius*

$$a := \frac{\hbar^2}{e^2 m} \quad (3.139)$$

3.4. ZWEIKÖRPERPROBLEME MIT COULOMB-WECHSELWIRKUNG 81

und als Energieeinheit das *Rydberg*

$$\text{Ryd} := \frac{e^2}{2a} \quad (3.140)$$

zu verwenden. Dies resultiert in den Substitutionen

$$r =: a\rho, \quad E =: \frac{e^2}{2a}\epsilon \quad (3.141)$$

in der Diskussion des Wasserstoffatoms. Die radiale Schrödingergleichung (3.134) erhält dann die Form

$$\left(-\frac{d^2}{d\rho^2} + \frac{l(l+1)}{\rho^2} - \frac{2}{\rho} \right) y_l(\rho) = \epsilon y_l(\rho) \quad (3.142)$$

für $l \in \mathbb{N}_0$. Der analytische Zugang zur Behandlung des harmonischen Oszillators zeigt, dass eine viel versprechende Strategie zur Lösung von Differenzialgleichungen darin besteht, Ansätze zu konstruieren, die auf den asymptotischen Lösungen der Differenzialgleichung basieren. Die Gleichung (3.142) geht im Limes $\rho \rightarrow 0$ in die asymptotische Gleichung

$$\left(-\frac{d^2}{d\rho^2} + \frac{l(l+1)}{\rho^2} \right) y_l^{(\rightarrow 0)}(\rho) = 0 \quad (3.143)$$

über. Für $\rho \rightarrow \infty$ erhält man andererseits

$$\left(-\frac{d^2}{d\rho^2} + \epsilon \right) y_l^{(\rightarrow \infty)}(\rho) = 0. \quad (3.144)$$

Die allgemeine Lösung von (3.143) ist

$$y_l^{(\rightarrow 0)}(\rho) = a_1 \rho^{l+1} + a_2 \rho^{-l}. \quad (3.145)$$

Für $a_2 \neq 0$ und $l \geq 1$ ist $y_l^{(\rightarrow 0)}(\rho)$ bei $\rho = 0$ nicht lokal quadratintegrierbar, was im Widerspruch zur Aussage des Schnol-Simon'schen Theorems 2.6.1 ist. Für $l = 0$ verletzt $y_l^{(\rightarrow 0)}(\rho)$ mit $a_2 \neq 0$ die Dirichlet-Randbedingung $y_l^{(\rightarrow 0)}(0) = 0$ (siehe (3.133) in Kombination mit dem Schol-Simon'schen Theorem). Daher kommt nur die Lösung

$$y_l^{(\rightarrow 0)}(\rho) = a_1 \rho^{l+1} \quad (3.146)$$

für $l \in \mathbb{N}_0$ in Frage. Die allgemeine Lösung von (3.144) ist

$$y_l^{(\rightarrow \infty)}(\rho) = b_1 e^{\sqrt{-\epsilon}\rho} + b_2 e^{-\sqrt{-\epsilon}\rho}. \quad (3.147)$$

Damit die Lösung für $\epsilon < 0$ polynomial beschränkt ist (und somit nicht im Widerspruch steht zu den Aussagen im Schnol-Simon'schen Theorem 2.6.1), müssen wir $b_1 = 0$ setzen. Für $\epsilon > 0$ sind die Lösungen (3.147) im Unendlichen automatisch beschränkt. Dies führt dazu, dass wir die Fälle $\epsilon < 0$ und $\epsilon > 0$ separat diskutieren. Gemäss Satz 2.13 erwarten wir für $\epsilon < 0$ isolierte Eigenwerte und für $\epsilon > 0$ das kontinuierliche Spektrum.

Die Diskussion von $\epsilon < 0$

Wir starten mit den Definitionen

$$z := 2\sqrt{-\epsilon}, \quad n := \frac{1}{\sqrt{-\epsilon}}. \quad (3.148)$$

Gleichung (3.142) lautet nun neu

$$y_l'' + \left(\frac{n}{z} - \frac{1}{4} - \frac{l(l+1)}{z^2} \right) y_l = 0. \quad (3.149)$$

Die Resultate (3.146) und (3.147) führen uns auf den Lösungsansatz

$$y_l(z) = z^{l+1} e^{-\frac{1}{2}z} w(z) \quad (3.150)$$

mit $w(0) \neq 0$, der zwischen den beiden asymptotischen Lösungen interpoliert. Nun verwenden wir (3.150) in (3.149) und erhalten

$$zw'' + (2l+2-z)w' + (n-l-1)w = 0. \quad (3.151)$$

Dies ist ein Spezialfall der Differenzialgleichung

$$zw'' + (\gamma - z)w' - \alpha w = 0, \quad (3.152)$$

die in der Theorie der konfluenten, hypergeometrischen Funktionen auftritt (siehe bspw. [Straumann2002]). Für die Lösung von (??) macht man den Potenzreihenansatz

$$w(z) = \sum_{k=0}^{\infty} a_k z^k, \quad (3.153)$$

den wir in (??) verwenden, um auf

$$\sum_{k=0}^{\infty} ((k+1)(k+\gamma)a_{k+1} - (k+\alpha)a_k) z^k \quad (3.154)$$

zu stossen. Aus (3.154) resultiert die Rekursionsformel

$$a_k = \frac{\alpha(\alpha+1) \cdots (\alpha+k-1)}{\gamma(\gamma+1) \cdots (\gamma+k-1)} \frac{1}{k!} a_0 \quad (3.155)$$

für die Koeffizienten des Ansatzes. Als Lösung erhalten wir die *konfluente, hypergeometrische Reihe*

$$F(\alpha, \gamma; z) := w(z) = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{\alpha(\alpha+1) \cdots (\alpha+k-1)}{\gamma(\gamma+1) \cdots (\gamma+k-1)} \frac{1}{k!} z^k \quad (3.156)$$

für $a_0 = 1$. Die Funktion $F(\alpha, \gamma; z)$ verhält sich für grosse z und für grosse k wie

$$F(\alpha, \gamma; z) \approx e^z \quad (3.157)$$

(siehe Anhang zu Kapitel 1 in [Straumann2002]), woraus

$$y_l(z) = z^{l+1} e^{z/2} \quad (3.158)$$

3.4. ZWEIKÖRPERPROBLEME MIT COULOMB-WECHSELWIRKUNG 83

folgen würde. Somit wäre $y_l(z)$ aber nicht polynomial beschränkt, es sei denn $a_k = 0$ in (3.153) für genügend grosse k , d.h.

$$-\alpha = 0, 1, 2, \dots, \quad \gamma \neq \alpha \quad (3.159)$$

(siehe (3.157)). Für das Wasserstoffatom ist

$$\alpha = l + 1 - n, \quad l = 0, 1, 2, \dots, \quad (3.160)$$

so dass (3.159) erfüllt ist, falls

$$n = 1, 2, 3, \dots \text{ und } n \geq l + 1. \quad (3.161)$$

Zusammen mit (3.141) und (3.148) folgt damit die Formel für die *Energieeigenwerte der gebundenen Lösungen*:

$$E = E_n = -\frac{e^2}{2a} \cdot \frac{1}{n^2}, \quad n = 1, 2, 3, \dots \quad (3.162)$$

mit der Bedingung $l \leq n - 1$. Beachte, dass diese Identität das Balmer-Spektrum reproduziert. Die zugehörigen *Eigenfunktionen des Coulomb Hamiltonians* sind in expliziter Schreibweise

$$\psi_{nl}^m(r, \theta, \varphi) = C_{nl} \cdot e^{-\sqrt{-\epsilon} \frac{r}{a}} \frac{1}{r} \left(\frac{2\sqrt{-\epsilon} r}{a} \right)^{l+1} F(l+1-n, 2l+2; \frac{2\sqrt{-\epsilon} r}{a}) \cdot Y_l^m(\theta, \varphi), \quad (3.163)$$

wobei die Konstanten

$$C_{nl} = \frac{1}{n} \frac{1}{(2l+1)!} \sqrt{\frac{(n+l)!}{(n-l-1)!}} \quad (3.164)$$

Normierungskonstanten sind. Weiter gilt

$$\langle \psi_{nl}^m, \psi_{n'l'}^{m'} \rangle = \delta_{nn'} \delta_{ll'} \delta^{mm'}. \quad (3.165)$$

Die Resultate (3.164) und (3.165) stammen aus der Theorie der konfluenten, hypergeometrischen Funktionen (siehe Anhang zum Kapitel 1 in [Straumann2002]). Zum Eigenwert E_n gehören

$$\sum_{l=0}^{n-1} \left(\sum_{m=-l}^l 1 \right) = \sum_{l=0}^{n-1} (2l+1) = 2 \frac{(n-1)n}{2} + n = n^2 \quad (3.166)$$

linear unabhängige Eigenfunktionen. Der Eigenwert E_n ist folglich n^2 -fach entartet.

Die Diskussion von $\epsilon \geq 0$

Wir kommen nun zur Behandlung des Falls $\epsilon \geq 0$ und somit zur Aufgabe die partielle Differenzialgleichung

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + \frac{e^2}{r} \right] \psi(x) = E\psi(x) \quad (3.167)$$

für die Relativbewegung zweier Teilchen mit Ladungen e für $E \geq 0$ zu lösen. Der Satz 2.13 besagt, dass $E \in \sigma_c(H)$. Wie wir sehen werden, ist es nicht nötig ist, die Winkelvariablen θ und φ von der Variablen r zu separieren (siehe (3.131)), um die Diskussion des Wasserstoffatoms für den Fall $\epsilon \geq 0$ zu führen. Wir starten unsere Diskussion des Falls $\epsilon \geq 0$ also direkt mit der Behandlung der Gleichung (3.167). Mit

$$E =: \frac{\hbar^2 k^2}{2m} =: \frac{1}{2}mv^2, \quad \gamma := \frac{e^2}{\hbar v} \quad (3.168)$$

($k \in \mathbb{R}^3$ in beliebiger Richtung) erhalten wir die Gleichung

$$\left(\Delta + k^2 - \frac{2\gamma k}{r}\right)\psi(x) = 0. \quad (3.169)$$

Wir fahren fort mit dem Ansatz

$$\psi(x) = e^{ik \cdot x} f(u), \quad (3.170)$$

und

$$u := i\|k\|\left(r - \frac{k \cdot x}{\|k\|}\right)$$

für die Lösung von (3.169). Nehme an, die z -Achse sei parallel zu k . Dann folgt

$$\psi(x) = e^{ikz} f(u) u = i\|k\|(r - z) \quad (3.171)$$

und

$$u = i\|k\|(r - z) \quad (3.172)$$

mit $\|x\| = r$ wie bisher. In einem nächsten Schritt berechnet man den Laplace-Operator in den Koordinaten (u, r, φ) (φ entspricht der Winkelkoordinate φ der Kugelkoordinaten) und erhält anstelle der Differentialgleichung (3.169) eine Differentialgleichung in den Koordinaten (u, r, φ) . Die Verwendung des Ansatzes (3.171) in dieser neuen Differentialgleichung in (u, r, φ) ergibt den Spezialfall

$$\left(u \frac{d^2}{du^2} + (1-r) \frac{d}{du} + i\gamma\right) f(u) = 0 \quad (3.173)$$

der konfluenten, hypergeometrischen Differentialgleichung (??) für $f(u)$. Wir folgern, dass

$$f(u) = F(-i\gamma, 1; u). \quad (3.174)$$

Zusammen mit (3.171) ergibt sich

$$\psi(x) \equiv \psi_k(x) = A \cdot e^{ikz} F(-i\gamma, 1; ik(r-z)) \quad (3.175)$$

für die Lösung der zeitunabhängigen Schrödinger Gleichung (3.167). Der Vorfaktor A ist ein Normierungsfaktor.

Für die Berechnung des differentiellen Wirkungsquerschnitts (siehe Kapitel zur Streutheorie) des nun behandelten Coulomb-Problems werden wir auf die Asymptotik $|z| \rightarrow \infty$ angewiesen sein. Im Anhang zu Kapitel 1 in [Straumann2002]

wird gezeigt, dass

$$F(\alpha, \gamma; z) = \frac{\Gamma(\gamma)}{\Gamma(\gamma - \alpha)} (-z)^{-\alpha} \left[1 + \mathcal{O}\left(\frac{1}{|z|}\right) \right] + \frac{\Gamma(\gamma)}{\Gamma(\alpha)} e^z z^{\alpha - \gamma} \left[1 + \mathcal{O}\left(\frac{1}{|z|}\right) \right]. \quad (3.176)$$

Eine Rechnung zeigt, dass das asymptotische Verhalten des stationären Zustands die Form

$$\psi(z, r, \theta) = \psi_i(r, z) + \psi_s(r, \theta) \quad (3.177)$$

hat, mit

$$\psi_i(r, z) := A \frac{e^{\frac{\pi}{2}\gamma}}{\Gamma(1 + i\gamma)} \left(1 - \frac{\gamma^2}{2ikr \sin^2 \theta/2} \right) e^{ikz + i\gamma \log k(r-z)}, \quad (3.178)$$

$$\psi_s(r, \theta) := -A \frac{e^{\frac{\pi}{2}\gamma}}{\Gamma(1 + i\gamma)} f(\theta) \frac{1}{r} e^{ikr - i\gamma \log 2kr}, \quad (3.179)$$

$$f(\theta) := \frac{\gamma \Gamma(1 + i\gamma)}{2k \Gamma(1 - i\gamma)} \frac{e^{-2i\gamma \log \sin \theta/2}}{\sin^2 \theta/2}. \quad (3.180)$$

Die Anteile ψ_i resp. ψ_s werden als einlaufende resp. gestreute Wellen interpretiert. Diese Schar von verschiedenen Lösungen wird durch $k \in \mathbb{R}^3$ parametrisiert. Der zum "Wellenvektor" k gehörende Energie-Eigenwert ist

$$\frac{\hbar^2 k^2}{2m} \geq 0. \quad (3.181)$$

Komplette Lösung des Wasserstoffatoms

Die im Schnol-Simon'schen Theorem angesprochene "Vollständigkeit" der Lösungen wird über die Vektoren

$$\{\psi_{nl}^m(x), \psi_k(x) \mid -l \leq m \leq l; l = 0, 1, 2, \dots, n; n = 1, 2, \dots; \vec{k} \in \mathbb{R}^3\} \quad (3.182)$$

mit

$$\psi_{nl}^m(r, \theta, \varphi) = C_{nl} \cdot e^{-\sqrt{-\epsilon} \frac{r}{a}} \frac{1}{r} \left(\frac{2\sqrt{-\epsilon} r}{a} \right)^{l+1} F(l+1-n, 2l+2; \frac{2\sqrt{-\epsilon} r}{a}) \cdot Y_l^m(\theta, \varphi), \quad (3.183)$$

(siehe (3.163)) und

$$\psi(x) \equiv \psi_k(x) = A \cdot e^{ikz} F(-i\gamma, 1; ik(r-z)) \quad (3.184)$$

(nun entfällt die Annahme " \vec{k} parallel z -Achse") realisiert (siehe (3.175)). Jede Wellenfunktion $\psi(x) \in L^2(\mathbb{R}^3, d^3x)$ hat also eine Entwicklung der Form

$$\psi(x) = \sum_{n,l,m} a_{nl}^m \psi_{nl}^m(x) + \int d^3k A(k) \psi_k(x). \quad (3.185)$$

Über (3.185) erhält man nun die allgemeinen Lösungen der zeitabhängigen Schrödinger Gleichung, indem man deren Anfangsbedingung gemäss (3.185) entwickelt und dann die Zeitevolution anwendet.

Literaturverzeichnis

- [Gustafson2003] S. J. Gustafson, I. M. Sigal, *Mathematical Concepts of Quantum Mechanics*, Springer-Verlag, 2003.
- [Hislop1996] P. Hislop, I. M. Sigal, *Introduction to Spectral Theory. With Applications to Schrödinger Operators*, Springer-Verlag, 1996.
- [Kirillov2004] A. A. Kirillov, *Lectures on the Orbit Method*, Graduate Studies in Mathematics (AMS) vol. 64, 2004.
- [Lieb97] E. H. Lieb, M. Loss, *Analysis*, Graduate Studies in Mathematics (AMS) vol. 14, 1997.
- [Reed80] M. Reed, B. Simon, *Methods of modern mathematical physics, Volume 1*, Academic Press, 1980.
- [Reed80b] M. Reed, B. Simon, *Methods of modern mathematical physics, Volume 1 bis 4*, Academic Press, 1980.
- [Rudin73] W. Rudin, *Functional Analysis*, McGraw-Hill, Inc., 1973.
- [Straumann] N. Straumann, *Mathematische Methoden der Quantenmechanik*, Vorlesungsskript, erhältlich bei der Zentralstelle der Studentenschaft der Universität Zürich.
- [Straumann2002] N. Straumann, *Quantenmechanik: Nichtrelativistische Quantentheorie*, Springer-Verlag, 2002.