2. Einige mathematische Grundlagen der Quantenmechanik

In der von Heisenberg, (Born, Jordan und Dirac) entdeckten Form der Quantenmechanik wird gefordert, dass reellen Funktionen auf dem Phasenraum eines klassischen Systems quantenmechanisch hermitesche Quadratmatrizen zuzuordnen seien. Quadratische Matrizen beschreiben lineare Transformationen eines Vektorraums (linearen Raums), dessen Dimension der Zahl der Spalten, resp. Zeilen der Matrizen, (d.h. der Anzahl möglicher Quantenzahlen "erlaubter Zustände") entspricht. Wir nennen diesen Vektorraum V.*) Wir haben auch gesehen, dass zwei quantenmechanische Beschreibungen aequivalent sind, falls die "Observablen" (hermitesche Matrizen),

*) Es ist natürlich, V als Vektorraum über $\mathbb{C}$ aufzufassen.

F_1, der Beschreibung 1 ähnlich zu den "Observablen" F_2, der Beschreibung 2 sind. Damit sowohl F_1 als auch F_2 hermitesch sind, muss die Ähnlichkeitstransformation, T, die F_1 in F_2 überführt,

$$F_2 = T F_1 T^{-1},$$

proportional zu einer unitären Matrix sein. Denn

$$\overline{(F_2)_{nm}} = \sum_{l,k} \overline{T_{nl}}\, \overline{(F_1)_{lk}}\, \overline{T^{-1}_{km}}$$

$$= \sum_{l,k} \overline{T^{-1}_{km}} (F_1)_{kl}\, \overline{T_{nl}} \qquad (F_1 \text{ hermitesch})$$

$$\stackrel{!}{=} (F_2)_{mn} \qquad (F_2 \text{ hermitesch})$$

$$= \sum_{k,l} T_{mk} (F_1)_{kl}\, T^{-1}_{ln},$$

für beliebige hermitesche Matrizen F_1. Daraus folgt nun, dass

$$T^{-1}_{lk} = \overline{T_{kl}}, \quad \forall\,(kl),$$

d.h. T ist eine unitäre Matrix, bis auf einen Zahlenfaktor.

Die Begriffe "hermitesche Matrix" und "unitäre Matrix" erfordern, dass der komplexe Vektorraum V

mit einem Skalarprodukt versehen sein soll. Fasst man V als linearen Raum von Folgen, $u = (u_n)_{n=0}^{\infty}$, $v = (v_n)_{n=0}^{\infty}, \ldots$ komplexer Zahlen auf, so operiert eine Matrix $F = (F_{nm})_{n,m=0,1,2,\ldots}$ auf den Vektor $u \in V$ wie folgt:

$$(Fu)_n = \sum_{m=0}^{\infty} F_{nm} u_m . \qquad (2.1)$$

Ein natürliches Skalarprodukt, $\langle \cdot , \cdot \rangle$, auf V ist durch

$$\langle u, v \rangle := \sum_{n=0}^{\infty} \overline{u_n}\, v_n \qquad (2.2)$$

gegeben. Für eine beliebige Matrix F auf V gilt dann, dass

$$\langle u, Fv \rangle = \langle F^* u, v \rangle , \qquad (2.3)$$

wo F^* die zu F adjungierte Matrix ist, d.h.

$$(F^*)_{nm} = \overline{F_{mn}} . \qquad (2.4)$$

Ist F hermitesch, dann gilt offenbar, dass

$$F^* = F ; \qquad (2.5)$$

jedenfalls formal. (Die Einzelheiten sind subtiler, was schon Born, Heisenberg und Jordan bekannt war. Allgemein gilt nun, dass $\langle \cdot , \cdot \rangle$ antilinear im ersten und linear im zweiten Argument ist, dass das Skalarprodukt positiv-definit ist, $(\langle u,u\rangle = 0 \Rightarrow u_n = 0, \forall n)$, und dass $\langle u, v\rangle = \overline{\langle v, u\rangle}$; wie man leicht der Definition (2.2) entnimmt.

Eine Norm, $\|(\cdot)\|$, auf $\mathcal{V}$ ist durch

$$\|u\| := \sqrt{\langle u,u\rangle}\,, \quad u \in \mathcal{V} \tag{2.6}$$

definiert. Aus diesen Definitionen und Eigenschaften lassen sich die folgenden Konsequenzen herleiten:

(i) Schwarzsche Ungleichung

$$|\langle u, v\rangle| \leq \|u\| \cdot \|v\| \tag{2.7}$$

(Beweis wie im endlich dimensionalen Fall.)

(ii) Dreiecksungleichung

$$\big|\|u\| - \|v\|\big| \leq \|u+v\| \leq \|u\| + \|v\|. \tag{2.8}$$

(iii) Wenn $F = F^*$ eine hermitesche Matrix auf $\mathcal{V}$ ist, dann ist der "Erwartungswert" von F

in einem Vektor $u \in V$, $\langle u, Fu \rangle$, reell:

$$\langle u, Fu \rangle = \langle F^* u, u \rangle \underset{\uparrow}{=} \langle Fu, u \rangle \underset{\uparrow}{=} \overline{\langle u, Fu \rangle}. \quad (2.9)$$

F hermitesch $\langle \cdot, \cdot \rangle$ ein Skalarprod.

Wenn nun V ein (i.a. ∞ dimensionaler) komplex Vektorraum mit Skalarprodukt $\langle \cdot, \cdot \rangle$ ist, dann kann man V stets zu einem Hilbertraum, $\mathcal{H}$, vervollständigen: Es sei $\{u^{(n)}\}_{n=0}^{\infty}$ eine unendliche Folge von Vektoren in V. Wir sagen, $\{u^{(n)}\}_{n=0}^{\infty}$ sei eine Cauchy Folge in der starken Topologie von V, falls es für jedes $\varepsilon > 0$ eine Zahl $N = N(\varepsilon) < \infty$ gibt so, dass

$$\| u^{(n)} - u^{(m)} \| < \varepsilon, \quad \forall\, n, m > N. \qquad (2.10)$$

Nun gibt es i.a. keine Gewähr, dass eine Cauchy Folge $\{u^{(n)}\}$ gegen einen Vektor $u \in V$ konvergiert. Wir können aber eine Aequivalenzklasse von Cauchy Folgen mit einem Vektor identifizieren, den wir einfach zu V hinzufügen, falls die Cauchy

Folgen nicht ohnehin einen gemeinsamen Grenzwert in $\mathcal{V}$ haben. Auf diese Weise erreicht man, dass <u>alle</u> Cauchy Folgen konvergieren. Der lineare Raum, $\mathcal{H} = \overline{\mathcal{V}}$, der auf diese Weise als Vervollständigung von $\mathcal{V}$ entsteht, ist ein <u>Hilbertraum</u>, nämlich ein Vektorraum mit Skalarprodukt, der in der durch das Skalarprodukt definierten Norm, siehe (2.6), <u>vollständig</u> ist; (d.h. alle Cauchy Folgen konvergieren gegen einen Grenzvektor in $\mathcal{H}$). Man sagt, $\mathcal{H}$ sei <u>separabel</u>, falls es eine abzählbar-unendliche Menge $\{u^{(n)}\}$ von Vektoren in $\mathcal{H}$ gibt so, dass <u>jeder</u> Vektor $u \in \mathcal{H}$ ein Häufungspunkt von $\{u^{(n)}\}$ ist. Wir werden in dieser Vorlesung sozusagen immer nur separable Hilberträume antreffen. <u>Jeder</u> separable Hilbertraum ist <u>isomorph</u> zum Raum, ℓ_2, unendlicher Folgen, $u = (u_n)_{n=0}^{\infty}$, komplexer Zahlen mit der Eigenschaft, dass

$$\|u\| = \left(\sum_{n=0}^{\infty} |u_n|^2\right)^{1/2} < \infty \qquad (2.11)$$

In einem separablen Hilbertraum $\mathcal{H}$ gibt es eine abzählbare Basis $\{\psi_k\}_{k=0}^{\infty}$ von Vektoren $\psi_k \in \mathcal{H}$; d.h. für jeden Vektor $\psi \in \mathcal{H}$ können komplexe Zahlen $c_0, c_1, c_2, \dots$ gefunden werden so, dass

$$\psi = s\text{-}\lim_{n\to\infty} \sum_{k=1}^{n} c_k \psi_k . \qquad (2.12)$$

Mit Hilfe des Gram-<u>Schmidtschen Orthogonalisierungsverfahrens</u> kann man aus der Basis $\{\psi_k\}_{k=0}^{\infty}$ ein <u>vollständiges Orthonormalsystem</u> (VONS), $\{\varphi_k\}_{k=0}^{\infty}$, konstruieren:

$$\varphi_1 := \frac{\psi_1}{\|\psi_1\|}, \qquad u_2 = \psi_2 - \langle \varphi_1, \psi_2 \rangle \varphi_1,$$

$$\varphi_2 := \frac{u_2}{\|u_2\|}, \dots, \quad u_n = \psi_n - \sum_{k=1}^{n-1} \langle \varphi_k, \psi_n \rangle \varphi_k,$$

$$\varphi_n := \frac{u_n}{\|u_n\|}, \quad \text{etc.}$$

Es ist klar, dass $\|\varphi_n\| = 1$, $\forall n$, und per Induktion zeigt man, dass $\langle \varphi_n, \varphi_m \rangle = 0$, $\forall n \neq m$.

Jeder Vektor $\psi \in \mathcal{H}$ kann nun nach dem VONS $\{\varphi_k\}_{k=0}^{\infty}$ entwickelt werden:

$$\psi = \sum_{k=0}^{\infty} c_k \varphi_k , \quad \text{mit} \quad c_k = \langle \varphi_k , \psi \rangle, \text{ und} \tag{2.13}$$

$$\|\psi\|^2 = \sum_{k=0}^{\infty} |c_k|^2 ; \text{ allgemeiner} \tag{2.14}$$

$$\langle \psi , \varphi \rangle = \sum_{k=0}^{\infty} \bar{c}_k d_k , \quad \text{wo} \quad d_k = \langle \varphi_k , \varphi \rangle .$$

Der Isomorphismus $\mathcal{H} \simeq l_2$ wird also offensichtlich, wenn man in $\mathcal{H}$ ein VONS konstruiert.

Nun schauen wir uns das konkrete Beispiel eines N-Teilchensystems an; wie in (1.115), (1.116). Wir suchen einen Hilbertraum $\mathcal{H}$ von Schrödingerwellenfunktionen, $\psi(\vec{x}_1, \dots, \vec{x}_N)$, mit der Eigenschaft, dass wir die Operatoren

$$q_j^{\alpha} := x_j^{\alpha} , \quad p_{j,\alpha} := \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x_j^{\alpha}} , \quad \alpha = 1, \dots, 3, \; j = 1, \dots, N, \tag{2.13}$$

und

$$H := \sum_{j=1}^{N} \frac{\hbar^2}{2m_j} \left(-i \vec{\nabla}_j - \frac{e_j}{\hbar c} \vec{A}(\vec{x}_j) \right)^2 + \sum_{j=1}^{N} e_j \phi(\vec{x}_j) + U(\vec{x}_1, \dots, \vec{x}_N) \tag{2.14}$$

(unter geeigneten Annahmen über $\vec{A}$, ϕ und U)

wenigstens formal als <u>Hermitesche</u> (besser: selbstadjungierte) <u>Operatoren</u> auf $\mathcal{H}$ auffassen können.

Ein solcher Hilbertraum ist

$$\mathcal{H} = L^2(\mathbb{R}^{3N})$$
$$= \left\{ \psi(\vec{x}_1, \dots, \vec{x}_N) \,\middle|\, \int \prod_{j=1}^{N} d^3x_j \, |\psi(\vec{x}_1, \dots, \vec{x}_N)|^2 < \infty \right\} \tag{2.15}$$

Allgemein definieren wir die Räume

$$L^p(\mathbb{R}^f) \equiv L^p(\mathbb{R}^f, d^fx) := \left\{ \psi(x), x \in \mathbb{R}^f \,\middle|\, \|\psi\|_p < \infty \right\}, \tag{2.16}$$

wo

$$\|\psi\|_p := \left(\int d^fx \, |\psi(x)|^p \right)^{1/p}, \quad 1 \leq p < \infty,$$

$$d^fx = \text{Lebesgue Mass auf } \mathbb{R}^f.$$

Nur für $p = 2$ ist $L^p(\mathbb{R}^f, d^fx) = L^2(\mathbb{R}^f)$ ein Hilbertraum mit dem Skalarprodukt

$$\langle \psi, \varphi \rangle := \int d^fx \, \overline{\psi(x)} \, \varphi(x), \tag{2.17}$$

und

$$\|\psi\|_2 = \|\psi\| = (\langle \psi, \psi \rangle)^{1/2}.$$

Wir erinnern uns an die <u>Fouriertransformation</u>:

Für $\psi \in L^p(\mathbb{R}^f)$, $1 \leq p < \infty$, definieren wir

$$\hat{\psi}(p) := \frac{1}{(2\pi\hbar)^{f/2}} \int d^fx \, e^{i(p \cdot x)/\hbar} \, \psi(x), \tag{2.18}$$

mit $p \cdot x = \sum_{j=1}^{f} p_j x^j$. Es gilt dann, dass

$$\hat{\psi} \in L^q(\mathbb{R}^f), \text{ mit } \frac{1}{p} + \frac{1}{q} = 1. \qquad (2.19)$$

Dabei ist $L^\infty(\mathbb{R}^f)$ ($q = \infty$, wenn $p = 1$) der Raum der (fast überall endlichen) beschränkten Funktionen mit

$$\|\psi\|_\infty := \sup_{x \in \mathbb{R}^f} |\psi(x)|. \qquad (2.20)$$

Zwei Ungleichungen sind nützlich:

(1) Höldersche Ungleichung

$$\left|\int \bar{\psi} \varphi \, d^f x\right| \leq \|\psi\varphi\|_1 \leq \|\psi\|_p \|\varphi\|_q, \qquad (2.21)$$

falls $\frac{1}{p} + \frac{1}{q} = 1$. Die Höldersche Ungleichung verallgemeinert die Schwarzsche Ungleichung: Für $p = q = 2$ besagt (2.21), dass

$$|\langle \psi, \varphi \rangle| \leq \|\psi\|_2 \cdot \|\varphi\|_2. \qquad (2.22)$$

(2) Hausdorff - Young Ungleichung

Für $1 < p < 2$, $\psi \in L^p \cap L^1$, gilt, dass

$$\|\hat{\psi}\|_q \leq C \|\psi\|_p, \quad \frac{1}{q} + \frac{1}{p} = 1, \qquad (2.23)$$

wo C eine von f und p abhängige Konstante ist. Die Fouriertransformation hat eine <u>Inverse</u>: Falls $\psi \in L^p(\mathbb{R}^f)$, $1 \leq p < \infty$, dann ist

$$\check{\psi}(x) := \frac{1}{(2\pi\hbar)^{f/2}} \int d^f p \; e^{-i(p\cdot x)/\hbar} \psi(p) \qquad (2.24)$$

in $L^q(\mathbb{R}^f)$, mit $\frac{1}{q} + \frac{1}{p} = 1$, und es gilt ebenfalls (2.23). Offenbar bilden die Fouriertransformation $\hat{}$ und die inverse Fouriertransformation $\check{}$ den Hilbertraum $L^2(\mathbb{R}^f)$ in und auf sich selbst ab, und die Konstante C in (2.23) hat den Wert $C = 1$. Dies wollen wir heuristisch nachvollziehen:

$$\langle \psi, \varphi \rangle = \int d^f x \; \overline{\psi(x)} \; \varphi(x)$$

$$\underset{(2.18),\,(2.24)}{=} \int d^f x \; \overline{\left(\frac{1}{(2\pi\hbar)^{f/2}} \int d^f p \; e^{-i(p\cdot x)/\hbar} \hat{\psi}(p) \right)} \times$$

$$\times \left(\frac{1}{(2\pi\hbar)^{f/2}} \int d^f p' \; e^{-i(p'\cdot x)/\hbar} \hat{\varphi}(p') \right)$$

$$= \iint d^f p \, d^f p' \; \overline{\hat{\psi}(p)} \; \hat{\varphi}(p') \times$$

$$\times \frac{1}{(2\pi\hbar)^f} \int d^f x \; e^{i(p-p')\cdot x/\hbar}$$

Nun erinnert man sich daran, dass

$$\frac{1}{(2\pi\hbar)^f}\int d^f x \; e^{\pm i p\cdot x/\hbar} = \delta^{(f)}(p), \qquad (2.25)$$

wo $\delta^{(f)}$ die Diracsche δ-Funktion (-Distribution) mit Träger im Nullpunkt ist. Setzt man (2.25) in die vorherige Gleichung ein, so findet man

$$\langle \psi, \varphi \rangle = \langle \hat{\psi}, \hat{\varphi} \rangle = \langle \check{\psi}, \check{\varphi} \rangle, \qquad (2.26)$$

d.h. die Fouriertransformation $\hat{}$ und ihre Inverse $\check{}$ sind <u>unitär</u> auf $\mathcal{H} = L^2(\mathbb{R}^f)$, (nämlich, sie erhalten das Skalarprodukt).

Die <u>Faltung</u> zweier Funktionen ψ und φ auf $\mathbb{R}^f$ ist durch

$$(\psi * \varphi)(x) := \int d^f y \; \psi(x-y)\,\varphi(y) \qquad (2.27)$$

definiert.

<u>Eigenschaften der Fouriertransformation</u>

(1) $\hat{} : L^p(\mathbb{R}^f) \longrightarrow L^q(\mathbb{R}^f)$, $\frac{1}{p} + \frac{1}{q} = 1$; siehe (2.23).

(2) $\hat{}$ ist <u>unitär</u> auf $L^2(\mathbb{R}^f)$; siehe (2.26).

$$(3)\quad (\psi\cdot\varphi)^\wedge(p) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{f/2}}\,(\hat\psi * \hat\varphi)(p)$$

$$(4)\quad \overline{\hat\psi(p)} = (\bar\psi)^\wedge(-p)$$

$$(5)\quad \left(\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x^j}\psi\right)^\wedge(p) = p_j\,\hat\psi(p)$$

$$(6)\quad (x^j\psi)^\wedge(p) = i\hbar\frac{\partial}{\partial p_j}\hat\psi(p).$$

Die Gleichungen (5) und (6) legen die folgende Interpretation nahe: Wenn $\psi(\vec x_1,\dots,\vec x_N)$ eine Schrödingersche Wellenfunktion auf dem Konfigurationsraum $\mathbb{R}^{3N}$ $(f = 3N)$ eines N-Teilchensystems ist, dann ist $\hat\psi(\vec p_1,\dots,\vec p_N)$ die entsprechende Wellenfunktion auf dem Impulsraum des Systems. Da die Fouriertransformation $^\wedge$ unitär auf dem Hilbertraum $L^2(\mathbb{R}^{3N}, \prod_{j=1}^{N} d^3x_j)$ ist, führen die beiden Darstellungen, mit Gln. (5) und (6), auf aequivalente Quantisierungen; (BHJ, Dirac). Im Rahmen der Wellenmechanik wurde die Impulsraumdarstellung von Pauli eingeführt.

Studierenden, die sich mit den mathematischen Grundlagen der oben zusammengefassten Tatsachen vertraut machen wollen, empfehle ich das hervorragende Buch

E. H. Lieb, M. Loss, "Analysis", Graduate Studies in Mathematics, Vol. 14, AMS, Providence, R.I., 1997

Allgemein sei auf das Standard Werk

M. Reed, B. Simon, "Methods of Modern Mathematical Physics", Vol. 1 & 2, Academic Press, New York – London, 1973.

verwiesen; insb. auch was das nun folgende Material anbetrifft.

Nach dieser Exkursion in die Theorie des Hilbertraums kehren wir nun zu den fundamentalen Objekten der Quantenmechanik, den (Hermiteschen) Quadratmatrizen zurück. Da jeder separable Hilbertraum $\mathcal{H}$ isomorph zu l_2 ist, können wir nun statt von Quadratmatrizen auf l_2 allgemeiner von linearen Operatoren (oder linearen Transformationen) auf einem Hilbertraum $\mathcal{H}$ sprechen.

Lineare Operatoren.

Eine Abbildung $A : \mathcal{H} \to \mathcal{H}$ ist ein linearer Operator auf $\mathcal{H}$, falls $\forall\, z_1, \dots, z_k \in \mathbb{C}$, $\forall\, \psi_1, \dots, \psi_k \in \mathcal{H}$, $k = 1, 2, 3,$

$$A\left(\sum_{j=1}^{k} z_j \psi_j\right) = \sum_{j=1}^{k} z_j A \psi_j \qquad (2.28)$$

Die Norm, $\|A\|$, eines linearen Operators, A, auf $\mathcal{H}$ wird durch

$$\|A\| := \sup_{0 \neq \psi \in \mathcal{H}} \frac{\|A\psi\|}{\|\psi\|} \qquad (2.29)$$

definiert. Ein Operator A heisst beschränkt, falls $\|A\| < \infty$. Viele mathematische Subtilitäten der Quantenmechanik kommen davon her, dass es auf unendlich dimensionalen Hilberträumen lineare Operatoren gibt, die unbeschränkt sind, d.h. deren Norm unendlich ist. Wenn A ein unbeschränkter, linearer Operator auf einem Hilbertraum $\mathcal{H}$ ist, so definieren wir den (Definitions-) <u>Bereich</u>, $\mathcal{D}(A)$, von A durch

$$\mathcal{D}(A) = \{ \psi \in \mathcal{H} \mid \|A\psi\| < \infty \}. \tag{2.30}$$

Wir werden i.a. nur lineare Operatoren, A, studieren, deren Bereich $\mathcal{D}(A)$ <u>dicht</u> in $\mathcal{H}$ liegt; (eine Teilmenge $\mathcal{D} \subset \mathcal{H}$ ist dicht in $\mathcal{H}$, falls jeder Vektor $u \in \mathcal{H}$ als starker Limes einer Folge $\{u^{(n)}\} \subset \mathcal{D}$ erhalten werden kann).

Wenn $\mathcal{H}_1$ und $\mathcal{H}_2$ zwei Hilberträume sind, so bedeutet

$$\mathcal{H}_1 \oplus \mathcal{H}_2 = \{ (u_1, u_2) \mid u_1 \in \mathcal{H}_1, u_2 \in \mathcal{H}_2 \} \tag{2.31}$$

ihre <u>"direkte Summe"</u>; $\mathcal{H}_1 \oplus \mathcal{H}_2$ ist wieder ein Hilbertraum, mit dem Skalarprodukt

$$\langle (u_1, u_2), (v_1, v_2) \rangle = \langle u_1, v_1 \rangle + \langle u_2, v_2 \rangle \tag{2.32}$$

Ein Operator A heisst <u>abgeschlossen</u>, falls der <u>Graph</u>

$$\mathcal{G}(A) := \{(u, Au) \in \mathcal{H} \oplus \mathcal{H} \mid u \in \mathcal{D}(A)\} \quad (2.33)$$

ein <u>abgeschlossener</u> (linearer) Unterraum von $\mathcal{H} \oplus \mathcal{H}$ ist.

Wenn A ein linearer Operator auf $\mathcal{H}$ ist, so definiert man den zu A adjungierten Operator, $A^* \equiv A^\dagger$, durch die Gleichung

$$\langle A^* u, v \rangle := \langle u, Av \rangle, \quad v \in \mathcal{D}(A). \quad (2.34)$$

<u>Genauer:</u> Ein Vektor $u \in \mathcal{H}$ gehört zum (Definitions-) Bereich von A^*, falls sich das (in v) lineare Funktional

$$l(v) := \langle u, Av \rangle, \quad v \in \mathcal{D}(A),$$

stetig von $\mathcal{D}(A)$ auf ganz $\mathcal{H}$ fortsetzen lässt. Der Satz von Riesz garantiert dann, dass es einen Vektor $w \in \mathcal{H}$ gibt so, dass $l(v) = \langle w, v \rangle$. Der Vektor w hängt <u>linear</u> von u ab. Man kann also

$$w = A^* u$$

schreiben, wo A^* ein linearer Operator ist.

Ein linearer Operator A ist <u>symmetrisch</u> (oder <u>hermitesch</u>), falls $\mathcal{D}(A) \subseteq \mathcal{D}(A^*)$ und für alle u, v in $\mathcal{D}(A)$

$$\langle u, Av \rangle = \langle A^* u, v \rangle \stackrel{!}{=} \langle Au, v \rangle \qquad (2.35)$$

Ein Operator A ist <u>selbstadjungiert</u>, falls $\mathcal{D}(A^*) = \mathcal{D}(A)$ und

$$A^* = A \text{ auf } \mathcal{D}(A). \qquad (2.36)$$

Jeder selbstadjungierte Operator ist symmetrisch, aber die Umkehrung gilt <u>nicht</u>. (Sie ist <u>richtig</u> für beschränkte Operatoren, aber i.a. falsch für unbeschränkte Operatoren.) Ein fundamentales Kriterium für die Selbstadjungiertheit eines Operators A ist der folgende Satz.

<u>Satz</u> (↗ Read & Simon, Vol. 1)

Es sei A ein symmetrischer Operator auf $\mathcal{H}$. Die folgenden drei Aussagen sind <u>aequivalent</u>:

(1) A ist selbstadjungiert

(2) A ist abgeschlossen und die Gleichungen

$$A^* u = \pm i u, \quad u \in \mathcal{H}$$

haben nur die triviale Lösung $u = 0$.

(3) Das Bild von $A \pm i$ ist der gesamte Hilbertraum $\mathcal{H}$

Ein linearer Operator P auf $\mathcal{H}$ ist ein <u>orthogonaler Projektor</u>, falls

$$P = P^* \quad \text{und} \quad P^2 = P. \tag{2.37}$$

Es sei $\mathcal{M} := \{ P\psi \mid \psi \in \mathcal{D}(P) \subseteq \mathcal{H} \}$ das Bild von P. Man verifiziert leicht, dass $P/_{\mathcal{M}} = \mathbb{1}/_{\mathcal{M}}$, und dass $P/_{\mathcal{M}^\perp} = 0$, wo $\mathcal{M}^\perp := \{ u \mid \langle u, v \rangle = 0, \forall v \in \mathcal{M} \}$.

Da $\mathcal{H} = \mathcal{M} \oplus \mathcal{M}^\perp$, folgt, dass P ein beschränkter Operator ist mit $\|P\| = 1$, ausser wenn $P = 0$.

<u>Definition</u>. Ein <u>projektorwertiger Mass</u> ist eine Familie von orthogonalen Projektoren P_Δ, wo Δ eine beliebige messbare Teilmenge der reellen Zahlengerade ist, mit den Eigenschaften:

(a) $P_\Delta^2 = P_\Delta$, $P_\Delta^* = P_\Delta$, $\forall \Delta$.

(b) $P_{\Delta = \emptyset} = 0$, $P_{\Delta = \mathbb{R}} = \mathbb{1}$.

(c) Falls $\Delta = \bigcup_n \Delta_n$, wo $\Delta_n \cap \Delta_m = \emptyset$, für $n \neq m$, dann ist

$$P_\Delta = s\text{-}\lim_{N\to\infty} \sum_{n=1}^{N} P_{\Delta_n} .$$

(d) $P_{\Delta_1} P_{\Delta_2} = P_{\Delta_1 \cap \Delta_2}$.

Für jeden Vektor $\varphi \in \mathcal{H}$ mit $\|\varphi\| = 1$ ist dann

$$\Delta \longmapsto \langle \varphi, P_\Delta \varphi \rangle$$

ein <u>Wahrscheinlichkeitsmass</u> auf $\mathbb{R}$. Wir bezeichnen dieses Mass mit $d\langle \varphi, P_\lambda \varphi\rangle$, $\lambda \in \mathbb{R}$; dabei ist $P_\lambda = P_{(-\infty,\lambda]}$.

<u>Satz</u> (Spektraltheorem)

Jeder selbstadjungierte Operator A auf einem Hilbertraum $\mathcal{H}$ bestimmt ein projektorwertiges Mass $\{P_\Delta\}$, die sog. <u>spektralen Projektoren</u>, mit der Eigenschaft, dass

$$A = \int_{\mathbb{R}} \lambda \, dP_\lambda \qquad (2.38)$$

Wenn nun g eine stetige (es genügt: messbare) reellwertige Funktion auf $\mathbb{R}$ ist, dann ist

$$g(A) = \int_{\mathbb{R}} g(\lambda) \, dP_\lambda . \qquad (2.39)$$

Wenn g_1 und g_2 zwei beschränkte solche Funktionen sind, dann vertauschen $g_1(A)$ und $g_2(A)$ miteinander, und der Operator $B := g_1(A) + ig_2(A)$ ist auf ganz $\mathcal{H}$ definiert und vertauscht mit seinem Adjungierten $B^* = g_1(A) - ig_2(A)$; (d.h. B ist ein "normaler" Operator). Als Anwendung wähle man $g_1 = \cos(t\,\cdot)$, $g_2 = \sin(t\,\cdot)$, woraus folgt, dass e^{itA}, $t \in \mathbb{R}$, definiert ist, wenn A selbstadjungiert ist. Wenn g_1 und g_2 zwei stetige, beschränkte (komplex-wertige) Funktionen auf $\mathbb{R}$ sind, dann gilt, dass

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

und

$$g_1(A)^* = \overline{g_1}(A). \qquad (2.40)$$

All dies folgt leicht aus dem Spektraltheorem; ...

<u>Definition</u> Ein Operator $U : \mathcal{H} \to \mathcal{H}$ heisst <u>isometrisch</u>, falls

$$\langle U\psi, U\varphi \rangle = \langle \psi, \varphi \rangle, \quad \forall \psi, \varphi \in \mathcal{H}. \quad (2.41)$$

Ein isometrischer Operator, U, heisst <u>unitär</u>, falls das Bild von U aus ganz $\mathcal{H}$ besteht.

Wie sofort aus (2.41) folgt, ist $\|U\| = 1$, wenn U isometrisch ist. Dann ist auch der adjungierte Operator U^* beschränkt, mit $\|U^*\| = 1$. Es ist also U^*U wohldefiniert, und

$$\langle \varphi, U^*U\psi \rangle = \langle U\varphi, U\psi \rangle = \langle \varphi, \psi \rangle,$$

$\forall\, \varphi, \psi$ in $\mathcal{H}$; woraus folgt, dass

$$U^*U = \mathbb{1}. \tag{2.42}$$

Der Operator UU^* ist dagegen ein orthogonaler Projektor:

$$(UU^*)^* = (U^*)^* U^* = UU^*, \text{ und}$$
$$(UU^*)(UU^*) = U(U^*U)U^* = UU^*.$$

Sein Bild ist das Bild von U (und er verschwindet auf dem orthogonalen Komplement davon). Wenn nun U <u>unitär</u> ist, dann gilt offenbar, dass auch

$$UU^* = \mathbb{1} \tag{2.43}$$

Aus dem Spektraltheorem und den nachfolgenden Bemerkungen folgt nun ein <u>fundamentales Resultat von M. H. Stone</u>:

<u>Satz</u> (1) Es sei A ein selbstadjungierter Operator auf einem Hilbertraum $\mathcal{H}$. Wir definieren

$$U(t) := e^{-itA}. \tag{2.44}$$

Dann gilt:

(a) $U(t)$ ist unitär, $\forall t \in \mathbb{R}$, und

$$U(t)U(s) = U(t+s), \quad \forall t, s \in \mathbb{R}.$$

(b) $U(t)$ ist stark stetig in t.

(c) Für alle $\psi \in \mathcal{D}(A)$ gilt, dass

$$\frac{i}{t}\left(U(t)\psi - \psi\right) \underset{t \to 0}{\xrightarrow{s}} A\psi;$$

allgemeiner

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

(d) Wenn

$$\underset{t\to 0}{s\text{-}\lim} \frac{i}{t}\left(U(t)\psi - \psi\right) \text{ existiert, dann}$$

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

(2) Wenn $\{U(t) \mid t \in \mathbb{R}\}$ die Eigenschaften (a) und (b) hat (man sagt, $\{U(t)\}$ sei eine stark stetige, einparametrige unitäre Gruppe auf $\mathcal{H}$), dann gibt es einen selbstadjungierten Operator A auf $\mathcal{H}$ so, dass

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

Bemerkung. Wenn $A_1, \dots, A_n$ n selbstadjungierte Operatoren auf $\mathcal{H}$ sind, deren spektrale Projektoren alle miteinander vertauschen, dann definieren die Operatoren

$$U(t_1, \dots, t_n) := \exp -i\left(\sum_{j=1}^{n} t_j A_j\right)$$

eine stark stetige, n-parametrige unitäre Gruppe auf $\mathcal{H}$, und es gilt eine natürliche Verallgemeinerung des Stoneschen Satzes.

"Moral". Mit Familien, $A_1, A_2, \dots, A_n$, $n \geq 1$, von selbstadjungierten Operatoren, deren spektrale Projektoren miteinander vertauschen, darf man so manipulieren, wie man es sich von endlichen, symmetrischen Matrizen, die miteinander vertauschen, her gewöhnt ist.

Eigenwerte, absolut stetiges und singulär stetiges Spektrum selbstadjungierter Operatoren.

Es sei $d\mu(\lambda)$ ein Borelsches Wahrscheinlichkeitsmass auf der Zahlengeraden $\mathbb{R}$. Dann gibt es eine Menge, $\{\lambda_n\}_{n=1}^{N}$, reeller Zahlen und positive Zahlen $\{p_n\}_{n=1}^{N}$, $0 \le N \le \infty$, eine nicht-negative Funktion $m(\lambda) \in L^1(\mathbb{R}, d\lambda)$, und ein singulär-steliges Mass $d\sigma(\lambda)$ auf $\mathbb{R}$ (d.h. $d\sigma(\lambda)$ und $d\lambda$ haben nicht die gleichen Nullmengen) so, dass

$$0 \le \sum_{n=1}^{N} p_n + \int_{\mathbb{R}} m(\lambda)\, d\lambda \le 1,$$

und

$$d\mu(\lambda) = \sum_{n=1}^{N} p_n \,\delta(\lambda - \lambda_n)\, d\lambda + m(\lambda)\, d\lambda + d\sigma(\lambda). \tag{2.44}$$

Das ist der Lebesguesche Zerlegungssatz für Masse

Wenn nun $\{P_\lambda \mid \lambda \in \mathbb{R}\}$ die Spektralschar (d.h. ein projektorwertiges Mass, wie oben definiert) eines selbstadjungierten Operators A auf $\mathcal{H}$ ist, dann sind die Masse

$$d\langle \varphi, P_\lambda \varphi \rangle, \quad \varphi \in \mathcal{H}, \ \|\varphi\| = 1,$$

Borelsche Wahrscheinlichkeitsmasse, für die der Lebesguesche Zerlegungssatz zutrifft. Wenn $\mathcal{H}$ separabel ist, so folgt daraus die folgende Aussage: Wenn A ein selbstadjungierter Operator auf $\mathcal{H}$ ist, dann gibt es eine Familie $\{P_n\}_{n=1}^{N}$, $0 \leq N \leq \infty$, von orthogonalen Projektoren, mit $P_n P_m = 0$, für $n \neq m$, und $\sum_{n=1}^{N} P_n \leq \mathbb{1}$, reelle Zahlen $\{\lambda_n\}_{n=1}^{N}$,

und Spektralprojektoren P_λ^{ac}, P_λ^{sc} so, dass

$$A = \sum_{n=1}^{N} \lambda_n P_n + \int_{\mathbb{R}} \lambda \left(dP_\lambda^{ac} + dP_\lambda^{sc} \right), \qquad (2.45)$$

mit

$$0 \leq \frac{d\langle \varphi, P_\lambda^{ac} \varphi \rangle}{d\lambda} \in L^1(\mathbb{R}, d\lambda),$$

$$d\langle \varphi, P_\lambda^{sc} \varphi \rangle \text{ ist singulär stetig,}$$

$\forall \varphi \in \mathcal{H}$, und die Bilder der Projektoren $\sum_{n=1}^{N} P_n$, $P_{\mathbb{R}}^{ac}$ und $P_{\mathbb{R}}^{sc}$ sind zueinander orthogonal.

Die Zahlen $\{\lambda_n\}_{n=1}^{N}$ heissen <u>Eigenwerte</u> von A; man sagt, λ_n sei k-<u>fach</u> <u>entartet</u>, wenn die Dimension des Bildes von P_n gerade $= k$ ist. Eine Zahl λ im Träger von dP_λ^{ac} heisst ein <u>verallgemeinerter Eigenwert</u> von A. Für Operatoren, die in quantenmechanischen Rechnungen wichtig sind, ist i.a. $dP_\lambda^{sc} = 0$; (kein singulär-stetiges Spektrum

Charakterisierung quantenmechanischer Systeme mit endlich vielen Freiheitsgraden.

Ein klassisches Hamiltonsches System kann durch Angabe seines Phasenraums Γ und einer Hamilton Funktion auf Γ, die über die Hamiltonschen Bewegungsgleichungen die Dynamik des Systems bestimmt, charakterisiert werden. Allgemein ist Γ eine symplektische Mannigfaltigkeit, versehen mit einer symplektischen 2-Form ω, die geschlossen ist, d.h. $d\omega = 0$. Statt vom Phasenraum Γ zu reden, kann man ebenso gut von der kommutativen Algebra, $C_0^\infty(\Gamma)$, der glatten, beschränkten Funktionen auf Γ reden, die die ganze Geometrie von Γ beschreibt. Die Algebra $C_0^\infty(\Gamma)$ ist mit der Struktur einer Poissonklammer, $\{\cdot,\cdot\}$, versehen, die sie zu einer Lie Algebra macht. Die Dynamik des Systems kann durch die Liouville Gleichung

$$\dot{f} = \{h, f\}, \quad f \in C_0^\infty(T), \qquad (2.46)$$

bestimmt werden; wo h die Hamilton Funktion des Systems ist; (hier wird angenommen, dass die Funktionen $f \in C_0^\infty(T)$ nicht explizit von der Zeit abhängen). Allgemeine Zustände des Systems sind Wahrscheinlichkeitsmasse auf dem Phasenraum T, d.h. normierte, positive lineare Funktionale auf der Algebra $C_0^\infty(T)$.

Die quantenmechanische Umdeutung des Begriffssystems der Hamiltonschen Mechanik, so wie sie von Born, Heisenberg, Jordan und Dirac vorgeschlagen wurde, besteht darin, den Funktionen $f \in C_0^\infty(T)$ beschränkte lineare Operatoren, F, auf einem separablen Hilbertraum, $\mathcal{H}$, zuzuordnen, und diese Zuordnung, "Quant", soll folgende Eigenschaften haben:

(a) Quant ist linear: Für $f, g \in C_0^\infty(T)$, $z, w \in \mathbb{C}$, soll der Funktion $zf + wg$ der Operator $zF + wG$, mit "$F =$ Quant(f)", zugeordnet werden.

(b) Wenn $f \in C_0^\infty(T)$ der Operator F zugeordnet ist, dann soll $\bar{f} \equiv f^*$ der adjungierte Operator F^* zugeordnet werden; insbesondere soll einer reellen Funktion $f = \bar{f}$ ein selbstadjungierter Operator $F = F^*$ entsprechen.

Offenbar ist das Bild von $C_0^\infty(T)$ unter Quant ein linearer Raum, $\mathcal{F}_T$, beschränkter linearer Operatoren auf einem (separablen) Hilbertraum $\mathcal{H} \equiv \mathcal{H}_T$. Der Raum $\mathcal{F}_T$ ist unter Adjunktion abgeschlossen, da $F^* =$ Quant$(\bar{f})$.

Allerdings gilt nicht, dass

Quant $(f \cdot g) =$ Quant $(f) \cdot$ Quant (g)! Man kann $\mathcal{F}_\Gamma$ jedoch zu einer *Algebra, $\mathcal{A}_\Gamma$, erweitern, die durch

$$\mathcal{A}_\Gamma := \{F \mid F = \sum_j F_1^{(j)} \dots F_{n_j}^{(j)} \,;\; F_k^{(j)} \in \mathcal{F}_\Gamma, \forall k\} \quad (2.47)$$

definiert wird. Eine *Algebra ist ein komplexer Vektorraum mit der Eigenschaft, dass mit zwei Elementen auch deren <u>Adjungierte</u> und deren <u>Produkt</u> Elemente des Raums sind.

So wie $C_0^\infty(\Gamma)$ durch die Poissonklammer, $\{\cdot,\cdot\}$ zu einer Lie Algebra gemacht werden kann, so wird $\mathcal{A}_\Gamma$ zu einer Lie Algebra:

(c) Die Poissonklammer, $\{f, g\}$, zweier Funktionen, f und g, wird durch den <u>Kommutator</u>,

$$\frac{i}{\hbar}[F, G], \qquad (2.48)$$

der f und g entsprechenden Operatoren, F, G, ersetzt; (Dirac).

Die Algebra $\mathcal{A}_\Gamma$ trägt eine Norm, $\|(\cdot)\|$:

Die Norm, $\|F\|$, eines Operators $F \in \mathcal{A}_\Gamma$ ist die Operatornorm von F.

Die nichtkommutative Algebra $\mathcal{A}_\Gamma$ ersetzt quantenmechanisch die kommutative Algebra $C_0^\infty(\Gamma)$, resp. den Phasenraum Γ, und beschreibt die Kinematik des Systems. So wie Γ, resp. $C_0^\infty(\Gamma)$, ein Beispiel einer symplektischen Geometrie definiert, so definiert die Algebra $\mathcal{A}_\Gamma$ eine Art von "Quantengeometrie" (Born & Jordan), oder "nichtkommutativer Geometrie" (Connes); (für $f < \infty$ allerdings immer dieselbe!).

In Analogie zur klassischen Mechanik können wir Zustände des Systems als normierte, positive lineare Funktionale auf der Algebra $\mathcal{A}_\Gamma$ auffassen. Zu diesen gehören die Einheitsstrahlen im Hilbertraum $\mathcal{H}_\Gamma \equiv \mathcal{H}$: Für $0 \neq \psi \in \mathcal{H}$ ist $\psi / \|\psi\|$ ein Einheitsvektor, und

$$[\psi] = \left\{ \varphi \;\middle|\; \varphi = \frac{e^{i\theta}\psi}{\|\psi\|},\ \theta \in \mathbb{R} \right\} \qquad (2.49)$$

der zugehörige Einheitsstrahl. Für $0 \neq \psi \in \mathcal{H}$ definieren wir den Erwartungswert eines Operators $A \in \mathcal{A}_\Gamma$ in $[\psi]$ durch

$$\langle A \rangle_{[\psi]} := \frac{\langle \psi, A\psi \rangle}{\langle \psi, \psi \rangle}. \qquad (2.50)$$

Der Erwartungswert hat die folgenden Eigenschaften:

(a) $\langle \mathbb{1} \rangle_{[\psi]} = 1$, d.h. $\langle (\cdot) \rangle_{[\psi]}$ ist <u>normiert</u>.

(b) Wenn $A = A^*$ ein positiver Operator auf $\mathcal{H}$ ist, so ist

$$\langle A \rangle_{[\psi]} \geq 0, \quad \text{d.h. } \langle (\cdot) \rangle_{[\psi]} \text{ ist positiv.}$$

(c) Wenn A und B lineare Operatoren auf $\mathcal{H}$ und z, w komplexe Zahlen sind, so gilt

$$\langle zA + wB \rangle_{[\psi]} = z \langle A \rangle_{[\psi]} + w \langle B \rangle_{[\psi]},$$

d.h. $\langle (\cdot) \rangle_{[\psi]}$ ist <u>linear</u>

(d) $\langle (\cdot) \rangle_{[\psi]}$ hängt nur vom Strahl, $[\psi]$, durch ψ ab.

Die Zustände auf $\mathcal{A}_\Gamma$ bilden eine konvexe Menge: Wenn ω_1 und ω_2 zwei Zustände auf $\mathcal{A}_\Gamma$ sind, d.h. normierte, positive, lineare Funktionale auf $\mathcal{A}_\Gamma$ (mit den Eigenschaften (a)–(c) von oben), und $0 \leq \lambda \leq 1$, dann ist auch $\lambda\omega_1 + (1-\lambda)\omega_2$ ein Zustand auf $\mathcal{A}_\Gamma$. Zustände, ω, der speziellen Form

$$\omega(A) = \langle A \rangle_{[\psi]}, \quad 0 \neq \psi \in \mathcal{H}, \tag{2.51}$$

bilden aber keine konvexe Menge, sondern einen ∞ dimensionalen projektiven Raum

$$\mathbb{C}P^\infty := \{[\psi] \mid \psi \in \mathcal{H}, \psi \sim \psi' \Leftrightarrow \psi = z\psi', 0 \neq z \in \mathbb{C}\}, \tag{2.52}$$

(eine topologisch nicht-triviale Kähler Mannigfaltigkeit). Man nennt die Zustände der Form (2.51) "reine Zustände". Wie später beschrieben, können für Systeme mit endlich vielen Freiheitsgraden (Γ endlich dimensional) üblicherweise alle Zustände des Systems als konvexe Kombinationen reiner Zustände dargestellt werden.

<u>Warnung</u>: Es gibt i.a. <u>keine eindeutige</u> Quantisierungsvorschrift, "Quant"! Betrachten wir ein freies Teilchen im physikalischen Raum $\mathbb{R}^3$ mit Hamiltonfunktion $h(\vec{p}) = \frac{\vec{p}^{\,2}}{2m}$ in kartesischen Koordinaten. Klassisch ist h aequivalent zu

$$h' = \frac{1}{2m} \frac{1}{\sqrt{|\vec{x}|}} \vec{p}\, |\vec{x}|\, \vec{p} \frac{1}{\sqrt{|\vec{x}|}}$$

Quantenmechanisch fordern wir die Heisenbergschen Vertauschungsrelationen:

$$[x^\alpha, p_\beta] = i\hbar\, \delta^\alpha_\beta \mathbb{1}, \quad \alpha, \beta = 1,2,3.$$

Diese können in der oben beschriebenen <u>Schrödinger Darstellung</u>

$$\mathcal{H} = L^2(\mathbb{R}^3, d^3x), \quad x^\alpha \overset{\text{Quant}}{\longmapsto} \text{Mult } x^\alpha,$$

$$p_\alpha \overset{\text{Quant}}{\longmapsto} \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x^\alpha} \tag{2.52}$$

realisiert werden. Dann finden wir, dass

$$h(\vec{p}) \longmapsto -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta,$$

aber

$$h'(\vec{p}, \vec{x}) \longmapsto -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + \frac{3\hbar^2}{8m} \frac{1}{|\vec{x}|^2}$$

Hamilton Funktionen der Form (1.106), d.h.

$$h(p,x) = \frac{1}{2}(p,p) + U(x)$$

können mit der dort angegebenen Methode, die man Schrödinger verdankt, in beliebigen krummlinigen Koordinaten auf dem Konfigurationsraum K eindeutig quantisiert werden:

$$\begin{aligned} \mathcal{H} &= L^2(K, \sqrt{g}\, d^f x), \\ h \longmapsto H &= -\frac{\hbar^2}{2}\Delta + U. \end{aligned} \tag{2.53}$$

Nun behält allerdings die Hamiltonsche Mechanik unter beliebigen kanonischen ($\equiv$ symplektischen) Transformationen φ

$$(P,X) = \varphi(p,x)$$

ihre Form. Gemäss Heisenberg und Dirac kann man nun in zwei Weisen quantisieren:

$$[x^\alpha, p_\beta] = i\hbar\, \delta^\alpha_\beta\, \mathbb{1},$$

resp. (2.54)

$$[X^\alpha, P_\beta] = i\hbar\, \delta^\alpha_\beta\, \mathbb{1}.$$

Wendet man die Quantisierungen (2.54) auf ein und dieselbe Hamilton Funktion an, so erhält man i.a. unitär inaequivalente Hamilton Operatoren!

Ausnahme: $\Gamma = \mathbb{R}^{2f}$, φ eine lineare symplektische Transformation. Dann vermittelt eine unitäre Transformation zwischen den beiden Quantisierungen (2.54).

Dynamik: Heisenberg- und Schrödinger Bild

Wie eben diskutiert, ordnet eine Wahl von "Quant" einer klassischen Hamilton Funktion h auf dem Phasenraum Γ einen selbstadjungierten Operator $H = H^*$ auf einem Hilbertraum $\mathcal{H}$ zu. Heisenberg fordert, die Liouville Gleichung (2.46) sei durch die sog. Heisenberg Gleichung zu ersetzen:

Die Zeitevolution eines Operators $F \in \mathcal{A}_T$,

$F = F_{t=0} \longmapsto F_t$, $t \in \mathbb{R}$ (Zeit), findet man

durch Lösen der Gleichung

$$\dot{F}_t = \frac{i}{\hbar} [H, F_t]. \qquad (2.55)$$

Die Gl. (2.55) kann wie folgt gelöst werden: Zunächst bemerken wir, dass alle Operatoren in (2.55) lineare Operatoren auf $\mathcal{H}$ sind, und es wurde oben angenommen, dass $H = H^*$ <u>selbstadjungiert</u> sei. Der Satz von Stone garantiert dann, dass H eine einparametrige unitäre Gruppe, $U(t) = e^{-i(tH)/\hbar}$, $t \in \mathbb{R}$, auf $\mathcal{H}$ erzeugt. Nun setzen wir

$$F_t := e^{i(tH)/\hbar} F e^{-i(tH)/\hbar} \qquad (2.56)$$

Nimmt man von beiden Seiten von (2.56) einen <u>"Erwartungswert"</u>, $\langle (\cdot) \rangle_{[\psi]}$, in einem Vektor $\psi \in \mathcal{D}(H)$, so kann man beide Seiten nach der Zeit t differenzieren und findet:

$$\left\langle \dot{F}_t \right\rangle_{[\psi]} = \frac{i}{\hbar} \left\langle [H, F_t] \right\rangle_{[\psi]}$$

$$= \frac{i}{\hbar} \frac{\langle H\psi, F_t \psi\rangle - \langle \psi, F_t H\psi\rangle}{\langle \psi, \psi\rangle},$$

d.h. (2.55) ist im Sinne von Erwartungswerten erfüllt.

Für Heisenberg sind die Operatoren, F_t, zeitabhängig, wogegen die Zustände $\langle (\cdot)\rangle_{[\psi]}$, $\psi \in \mathcal{H}$, zeitunabhängig sind. Nun bemerke man jedoch, dass

$$\left\langle F_t \right\rangle_{[\psi]} \overset{(2.50)}{=} \frac{\langle \psi, F_t \psi\rangle}{\langle \psi, \psi\rangle} = \frac{\langle \psi, e^{i(tH)/\hbar} F e^{-i(tH)/\hbar} \psi\rangle}{\langle \psi, \psi\rangle}$$

$$= \frac{\langle \psi_t, F \psi_t\rangle}{\langle \psi_t, \psi_t\rangle}, \qquad (2.57)$$

wo

$$\psi_t = e^{-i(tH)/\hbar} \psi, \qquad (2.58)$$

und, da $e^{-i(tH)/\hbar}$ unitär ist, $\forall t \in \mathbb{R}$,

$$\langle \psi_t, \psi_t \rangle = \langle \psi, \psi \rangle, \quad \forall \psi \in \mathcal{H}. \qquad (2.59)$$

<u>Schrödinger</u> geht davon aus, dass die Operatoren $F \in \mathcal{A}_\Gamma$ <u>zeitunabhängig</u> sind, die (reinen) Zustände sich aber gemäss

$$\psi = \psi_{t=0} \longmapsto \psi_t = e^{-i(tH)/\hbar}\psi, \qquad (2.60)$$

$\psi \in \mathcal{H}$, sich in der Zeit entwickeln. Für $\psi \in \mathcal{D}(H)$ erfüllt ψ_t die Differentialgleichung

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t}\psi_t = H\psi_t, \qquad (2.61)$$

die man <u>zeitabhängige Schrödingergleichung</u> nennt.

Nun erinnern wir an das Spektraltheorem (2.38): Wenn $H = H^*$ selbstadjungiert ist, dann gibt es ein projektorwertiges Mass $\{P_\Delta\}$ so, dass

$$H = \int_{\mathbb{R}} E \, dP_E \qquad (2.62)$$

Man nennt den Träger von dP_E das (Energie-) <u>Spektrum</u>, $\sigma(H)$, von H. Die Menge der Eigenwerte $\{E_n\}_{n=0}^{N}$ nennt man das <u>Punkt-</u>

<u>spektrum</u>, $\sigma_{pp}(H)$, von H, und $\sigma(H) \setminus \{E_n\}_{n=0}^{N}$ heisst <u>kontinuierliches Spektrum</u>, $\sigma_c(H)$. Die Gleichung

$$Hu = Eu \ , \quad E \in \mathbb{R} \ , \tag{2.63}$$

hat in vielen Beispielen von Hamilton Operatoren H für alle $E \in \mathbb{R}$ eine Lösung, u_E; aber nur für $E \in \sigma_{pp}(H)$ ist $u_E \in \mathcal{H}$, und nur für $E \in \sigma(H)$ kann man aus den Lösungen u_E durch Superposition Wellenpakete bilden, die zu $\mathcal{H}$ gehören. Man nennt (2.63) die <u>zeitunabhängige Schrödingergleichung</u>.

<u>Heisenbergsche und Weylsche Vertauschungsrelationen.</u>

Nun kehren wir zu den Beispielen von (2.13)–(2.16) zurück: Konfigurationsraum $K = \mathbb{R}^f$, Phasenraum $\Gamma = \mathbb{R}^{2f}$. Unsere Quantisierung, "Quant", ist durch

$$\left.\begin{array}{l} \mathcal{H} = L^2(\mathbb{R}^f, d^f x), \\ x^j \longmapsto \text{Multiplikation mit } x^j, \\ p_j \longmapsto \dfrac{\hbar}{i} \dfrac{\partial}{\partial x^j} \ , \quad j = 1, \ldots, f, \end{array}\right\} \tag{2.64}$$

gegeben.

Offensichtlich sind die Operatoren x^j,

$$(x^j\psi)(x) = x^j\psi(x),\quad \psi \in \mathcal{H},$$

selbstadjungiert und vertauschen alle miteinander. Sie erzeugen die f-parametrige unitäre Gruppe

$$U(b) := \exp i\Big(\sum_{j=1}^{f} b_j x^j\Big), \tag{2.65}$$

$b \in \mathbb{R}^f$. Genauso sind die Operatoren p_j,

$$(p_j\psi)(x) := \frac{\hbar}{i}\,\frac{\partial\psi}{\partial x^j}(x)$$

selbstadjungiert und vertauschen alle miteinander. Sie erzeugen die f-parametrige unitäre Gruppe $\{V(a) \mid a \in \mathbb{R}^f\}$, wo

$$(V(a)\psi)(x) := \psi(x+\hbar a). \tag{2.66}$$

Nun verifiziert man problemlos, dass

$$U(b)\,V(a) = e^{-i\hbar(a,b)}\,V(a)\,U(b), \tag{2.67}$$

mit $(a,b) = \sum_{j=1}^{f} a^j b_j$. Man nennt diese Vertauschungsrelationen die <u>Weylschen Relationen</u>.

Sie sind formal aequivalent zu den Heisenbergschen Vertauschungsrelationen:

$$[x^k, p_l] = i\hbar\, \delta^k_l\, \mathbb{1}\,. \qquad (2.68)$$

Für die Weylschen Relationen hat von Neumann einen Eindeutigkeitssatz bewiesen:

Satz. Sei $\mathcal{H}$ ein separabler Hilbertraum, und seien $\{U(b) \mid b \in \mathbb{R}^f\}$, $\{V(a) \mid a \in \mathbb{R}^f\}$ zwei f-parametrige, stetige unitäre Gruppen auf $\mathcal{H}$ mit der Eigenschaft, dass die Weylschen Relationen (2.67) gelten. Dann gibt es einen unitären Isomorphismus, T, mit

$$T\mathcal{H} = L^2(\mathbb{R}^f, d^f x) \otimes \mathcal{M}, \qquad (2.69)$$

wo $\mathcal{M}$ ein endlich dimensionaler oder separabler Hilbertraum ist, und

$$T U(b) T^{-1} = \exp i\left(\textstyle\sum b_j x^j\right) \otimes \mathbb{1},$$

$$T V(a) T^{-1} = (\text{Transl. um } -\hbar a) \otimes \mathbb{1},$$

d.h. $TU(b)T^{-1}$ und $TV(a)T^{-1}$ wirken auf den Faktor $L^2(\mathbb{R}^f, d^fx)$ in (2.69) wie in (2.65) und (2.66) angegeben, und auf den Faktor $\mathcal{M}$ in (2.69) wirken sie "trivial", nämlich wie die Einheitsmatrix.

Offenbar gibt es also in der Quantisierung Hamiltonscher Systeme mit Phasenraum $\Gamma = \mathbb{R}^{2f}$ keine Meinungsverschiedenheiten, wenn man kanonische Vertauschungsrelationen der Form (2.67) fordert.

Übungen.

(1) Ausgehend von (2.64) verifiziere man die Gln. (2.65) – (2.67).

(2) Man zeige, dass $\sigma(x^j) = \sigma_c(x^j) = \mathbb{R}$,

$$\sigma_{pp}(x^j) = \phi\,,\ \sigma(p_j) = \sigma_c(p_j) = \mathbb{R}\,, \sigma_{pp}(p_j) = \phi.$$

Man benütze dieses Resultat, um zu zeigen, dass die Operatoren $x = \varphi\,,\ p = \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial\varphi}\,,\ \varphi \in [0, 2\pi)$

nicht beide selbstadjungiert auf $L^2([0,2\pi), d\varphi)$ sein können.

(3) Man überzeuge sich davon, dass man die Definition des Tensorprodukts $\otimes$ zweier Hilberträume noch kennt.

Anhang. Grenzübergang zur klassischen Mechanik; Bohmsche Mechanik

Wir kehren hier zur Wellenmechanik von Systemen, z. B. N-Teilchensystemen zurück; siehe (1.114), (1.115). Die Schrödingergleichung lautet

$$i\hbar \frac{\partial \psi_t}{\partial t} = H\left(\underline{q}, \frac{\hbar}{i}\underline{\nabla}_q, t\right)\psi_t, \qquad (A1)$$

$\underline{q} = (\vec{x}_1, \dots, \vec{x}_N) \in \mathbb{R}^f$, mit H wie in (1.115). Die kinetische Energie ist z. B. durch

$$T(\underline{p}) = \frac{1}{2}(\underline{p}, T\underline{p}) \qquad (A2)$$

gegeben, wo T eine positive $f \times f$ Matrix ist;