

# Kapitel 3

## Formalismus der Quantenmechanik

*Es ist unmöglich, die Schönheiten der Naturgesetze angemessen zu vermitteln, wenn jemand die Mathematik nicht versteht. Ich bedaure das, aber es ist wohl so.*

R. Feynman; Nobelpreis 1965

In der Quantenmechanik spielen lineare partielle Differentialgleichungen eine große Rolle. Die Schrödinger- und Klein-Gordon-Gleichungen sind zwei Ihnen schon bekannte Beispiele. Jedoch kommt noch eine völlig neue Komponente hinzu: Die diskrete Struktur von Observablen in der Mikrophysik erfordert, Aspekte der Funktionalanalysis beim Studium der entsprechenden Differentialgleichungen zu berücksichtigen. Grob gesagt geht es darum, die Quantisierung von physikalischen Größen im Kontext einer Eigenwerttheorie zu verstehen, ähnlich zur Situation in der linearen Algebra.

### 3.1 Hilberträume und lineare Operatoren

Wir betrachten ein idealisiertes Beugungsexperiment mit Elektronen, die auf eine Blende mit Doppelspalt fallen. Eine Photoplatte in der Schirmebene hinter dem Doppelspalt gebe uns Informationen über das von den auftreffenden Elektronen erzeugte Bild. Zunächst bleibe jeweils einer der beiden Spalte geschlossen. Sind  $\psi_1$  und  $\psi_2$  diejenigen Wellenfunktionen, die zu geöffneten Spalt 1 *oder* Spalt 2 gehören, dann erhält man die Verteilungen

$$w_1(t, \mathbf{x}) = |\psi_1(t, \mathbf{x})|^2 \quad \text{und} \quad w_2(t, \mathbf{x}) = |\psi_2(t, \mathbf{x})|^2$$

auf dem Schirm. öffnet man beide Spalte, so entsteht ein Interferenzbild mit Verstärkung

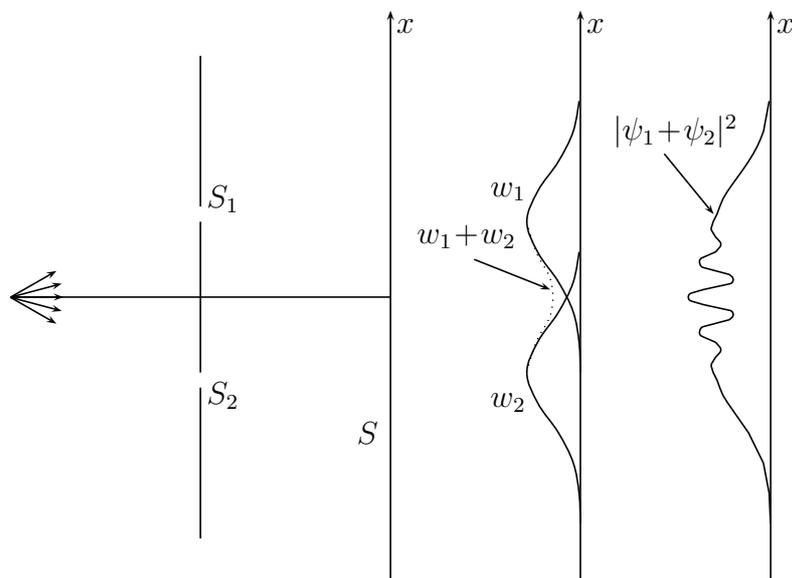


Abbildung 3.1: Auf dem Schirm liefert der Spalt  $S_i$  eine Intensität proportional zu  $w_i$ ,  $i = 1, 2$ . Sind beide Spalte gleichzeitig geöffnet, so ist die Intensität nicht die Summe der Intensitäten, sondern zeigt das oszillierende Muster, wie es durch Interferenz von  $\psi_1$  und  $\psi_2$  entsteht.

dort, wo die Wegdifferenz  $\Delta\ell$  von beiden Spalten ein ganzzahliges Vielfaches der Wellenlänge ist,  $\Delta\ell = n\lambda$ . Wegen der Interferenz ist die Wahrscheinlichkeitsverteilung  $w$  nicht die Summe der Verteilungen  $w_1$  und  $w_2$ . Man muss, wie aus der Wellenoptik bekannt, die beiden Wellen überlagern,  $\psi = \alpha\psi_1 + \beta\psi_2$ , und entsprechend ist die Schirmschwärzung proportional zu

$$w = \bar{\psi}\psi = |\alpha|^2 w_1 + |\beta|^2 w_2 + \bar{\alpha}\beta\bar{\psi}_1\psi_2 + \bar{\beta}\alpha\bar{\psi}_2\psi_1.$$

Zwei Bemerkungen sind hier angebracht:

- Jedes Elektron macht einen lokalen Einschlag, die Schwärzung der Photoplatte durch ein Elektron ist nicht ausgeschmiert.  $w$  ist nicht die Ladungsverteilung des Elektrons, sondern gibt seine Aufenthaltswahrscheinlichkeit an.
- Die Wahrscheinlichkeitsverteilung kommt nicht durch Interferenz vieler gleichzeitig einfallender Elektronen zustande, sondern man erhält das gleiche Interferenzbild auch bei sehr kleiner Intensität der Quelle, selbst wenn jedes Elektron einzeln eintrifft.

Wegen des Superpositionsprinzips müssen die Summe zweier Wellenfunktionen oder das Produkt einer Wellenfunktion mit einer Zahl wieder eine Wellenfunktion sein. Die  $\psi$ 's bilden also einen *linearen Raum* oder *Vektorraum*  $\mathcal{H}$ . Wegen

$$\langle f(\mathbf{x}) \rangle_\psi = \int d^3x \bar{\psi}(\mathbf{x}) \chi(\mathbf{x}) \quad \text{mit} \quad \chi(\mathbf{x}) = f(\mathbf{x})\psi(\mathbf{x})$$

sollte dies ein linearer Raum mit positiv-definitem inneren Produkt sein,

$$(\phi, \psi) = \int d^3x \bar{\phi}(\mathbf{x})\psi(\mathbf{x}). \quad (3.1)$$

Dieses Skalarprodukt hat folgende evidente Eigenschaften:

$$\begin{aligned} \text{hermitesch:} & \quad (\phi, \psi) = \overline{(\psi, \phi)} \in \mathbb{C}, \quad \forall \phi, \psi \in \mathcal{H} \\ \text{sesqui-linear:} & \quad (\phi, \alpha_1\psi_1 + \alpha_2\psi_2) = \alpha_1(\phi, \psi_1) + \alpha_2(\phi, \psi_2), \quad \text{mit} \quad \alpha_1, \alpha_2 \in \mathbb{C} \\ \text{positiv:} & \quad \|\psi\|^2 \equiv (\psi, \psi) > 0, \quad \text{wenn} \quad \psi \neq 0 \in \mathcal{H}. \end{aligned} \quad (3.2)$$

Es ist nun naheliegend, den Raum der Wellenfunktionen mit dem Vektorraum der quadratintegrierbaren Funktionen zu identifizieren. Das Skalarprodukt definiert eine Norm auf diesem Raum,  $\|\psi\| = \sqrt{(\psi, \psi)}$ . Vervollständigt man den Raum bezüglich der von dieser Norm induzierten Metrik, so ergibt sich ein unendlich dimensionaler, vollständiger Vektorraum mit Skalarprodukt, ein Hilbertraum  $\mathcal{H}$ . Eine Wellenfunktion ist also ein Vektor in  $\mathcal{H}$ . Hat ein Vektor die Norm Null, so ist es der Nullvektor

$$\|\psi\|^2 = 0 \iff \psi = 0.$$

Den Hilbertraum der quadratintegrierbaren Funktionen  $\mathbb{R}^3 \rightarrow \mathbb{C}$  bezeichnet man mit  $L_2(\mathbb{R}^3)$ . Zwei Wellenfunktionen  $\psi, \psi' \in L_2(\mathbb{R}^3)$  werden identifiziert, wenn sie sich nur auf einer Menge mit Maß Null unterscheiden.

Es wird nun postuliert, dass durch eine Wellenfunktion  $\psi \in \mathcal{H}$  das physikalische System für alle erzielbaren Messresultate hinreichend vollständig beschrieben wird. Wir haben früher gesehen, dass

$$\begin{aligned} (\psi, \mathbf{x}\psi) &= \int \bar{\psi}(\mathbf{x}) \mathbf{x} \psi(\mathbf{x}) d^3x \\ (\psi, \mathbf{p}\psi) &= \int \bar{\psi}(\mathbf{x}) \frac{\hbar}{i} \nabla \psi(\mathbf{x}) d^3x \end{aligned}$$

die mittlere Position und der mittlere Impuls eines Teilchens sind, falls der Zustandsvektor auf Eins normiert ist,  $\int \omega(\mathbf{x}) = (\psi, \psi) = 1$ . Die Komponenten von  $\mathbf{x}$  und  $\mathbf{p}$  sind lineare

Operatoren auf dem Hilbertraum der Zustandsvektoren. Ein Operator  $A$  ist linear, wenn

$$A(\alpha_1\psi_1 + \alpha_2\psi_2) = \alpha_1A\psi_1 + \alpha_2A\psi_2$$

für beliebige komplexe Zahlen  $\alpha_i$  und Vektoren (Wellenfunktionen)  $\psi_i$  gilt. Relevante Beispiele von linearen Operatoren sind

$$x^i, \quad p_j = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x^j}, \quad H_0 = \frac{1}{2m} \mathbf{p}^2 \quad \text{und} \quad f(\mathbf{x}). \quad (3.3)$$

In der Ortsdarstellung sind der erste und letzte Multiplikationsoperatoren, während die mittleren beiden Ableitungsoperatoren sind. Operatoren kann man linear superponieren und miteinander multiplizieren,

$$(A + B)\psi \equiv A\psi + B\psi, \quad (\alpha A)\psi = \alpha(A\psi), \quad (AB)\psi = A(B\psi).$$

Im allgemeinen kommutieren zwei Operatoren nicht,  $A(B\psi) \neq B(A\psi)$ , und die Nichtvertauschbarkeit wird durch ihr *Kommutator* charakterisiert

$$[A, B] = AB - BA = -[B, A]. \quad (3.4)$$

Zum Beispiel berechnet sich die Kommutatoren der Orts- und Impulsoperatoren gemäß

$$[x^i, p_j]\psi = \frac{\hbar}{i} (x^i \partial_j - \partial_j x^i) \psi = \frac{\hbar}{i} (x^i \partial_j - \delta_j^i - x^i \partial_j) \psi = i\hbar \delta_j^i \psi$$

und haben, da  $\psi$  beliebig ist, die einfache Form

$$[x^i, p_j] = i\hbar \delta_j^i. \quad (3.5)$$

Dagegen kommutieren die  $x^i$  miteinander und genauso die Impulse:

$$[x^i, x^j] = 0 \quad \text{und} \quad [p_i, p_j] = 0. \quad (3.6)$$

Der Kommutator erfüllt die wichtige *Derivations-* oder *Produktregel*

$$\begin{aligned} [A, BC] &= B[A, C] + [A, B]C \\ [AB, C] &= A[B, C] + [A, C]B, \end{aligned} \quad (3.7)$$

wie man leicht nachrechnet. Mit dieser für explizite Rechnungen sehr hilfreichen Regel folgt zum Beispiel

$$[x^i, p_j^n] = i\hbar\delta_j^i n p_j^{n-1} = i\hbar \frac{\partial}{\partial p_i} (p_j)^n. \quad (3.8)$$

Wir beweisen diese Formel (die Ihnen aus der klassischen Mechanik bekannt vorkommen sollte) mittels Induktion und unter Hinzunahme der Produktregel. Offensichtlich gilt die Formel für  $n = 1$ . Sie gelte auch für alle Potenzen von  $p_j$  bis zur Potenz  $n$ . Wegen

$$\begin{aligned} [x^i, p_j^{n+1}] &= p_j [x^i, p_j^n] + [x^i, p_j] p_j^n = p_j i\hbar\delta_j^i n p_j^{n-1} + i\hbar\delta_j^i p_j^n \\ &= i\hbar\delta_j^i (n+1) p_j^n = i\hbar \frac{\partial}{\partial p_i} (p_j)^{n+1} \end{aligned}$$

gilt sie dann auch für die Potenz  $n+1$ , was zu beweisen war. Ganz analog beweist man

$$[p_i, (x^j)^n] = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x^i} (x^j)^n. \quad (3.9)$$

Wegen der Linearität des Kommutators kann man die Formeln (3.8,3.9) zuerst auf Polynome und danach auf Funktionen ausdehnen:

$$\begin{aligned} [x^i, A(\mathbf{x}, \mathbf{p})] &= i\hbar \frac{\partial A(\mathbf{x}, \mathbf{p})}{\partial p_i} \\ [p_i, A(\mathbf{x}, \mathbf{p})] &= -i\hbar \frac{\partial A(\mathbf{x}, \mathbf{p})}{\partial x^i}. \end{aligned} \quad (3.10)$$

Die Analogie zu den Poisson-Klammern zwischen Ort bzw. Impuls und Funktionen von Ort und Impuls springt ins Auge. Wir werden darauf zurückkommen.

### 3.1.1 Dirac-Notation

Die Formulierung der Quantenmechanik wird transparenter, wenn wir die Diracschen Bras und Kets verwenden. In der Dirac-Notation entspricht einem beliebigen  $\psi$  im Hilbertraum das Ket  $|\psi\rangle$ . Die Kets  $|\psi\rangle$  sind nichts anderes als unsere üblichen Hilbert-Raum-Vektoren  $\psi$ . Dabei wird offen gelassen, ob man in der Orts-, Impuls- oder irgend einer anderen Darstellung arbeitet. Gerade beim Übergang zwischen verschiedenen Darstellungen ist die abstrakte Formulierung hilfreich.

Die Erklärung der bra-Vektoren  $\langle\psi|$  ist etwas schwieriger. Am verständlichsten ist vielleicht die Folgende: Die bra-Vektoren sind die linearen stetigen Funktionale auf  $\mathcal{H}$ , d.h. die Elemente aus  $\mathcal{H}'$ . Nach dem Satz von Riesz entspricht jedem  $f \in \mathcal{H}'$  ein eindeutiges

$|\phi\rangle \in \mathcal{H}$  mit  $f(\psi) = \langle\phi|\psi\rangle$  für alle  $\psi \in \mathcal{H}$ . Dann bedeutet  $\langle\phi|\psi\rangle$  nicht anderes als das *Skalarprodukt*,

$$(\phi, \psi) = \langle\phi|\psi\rangle = \overline{\langle\psi|\phi\rangle}. \quad (3.11)$$

In einem endlich-dimensionalen Vektorraum mit Skalarprodukt ist (nach Wahl einer Basis) das Ket  $|\psi\rangle$  ein Spaltenvektor und das Bra  $\langle\psi|$  ein Zeilenvektor.

Dagegen ist der eindimensionale Operator  $|\psi\rangle\langle\phi|$  eine *lineare Abbildung*  $\mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}$ :

$$|\psi\rangle\langle\phi| : |\chi\rangle \longrightarrow \langle\phi|\chi\rangle |\psi\rangle.$$

Eine Eigenwertgleichung  $A\psi_n = a_n\psi_n$  mit Eigenwert  $a_n$  und Eigenfunktion  $\psi_n$  schreibt man dann mit zunehmender Abstraktion

$$\begin{aligned} A|\psi_n\rangle &= a_n|\psi_n\rangle \\ A|a_n\rangle &= a_n|a_n\rangle \\ A|n\rangle &= a_n|n\rangle. \end{aligned}$$

Matrizelemente von Operatoren schreiben sich gemäß

$$\langle\phi|A|\psi\rangle \equiv (\phi, A\psi).$$

Im Folgenden wollen wir neben der bisherigen Notation auch die in Physikbüchern oft benutzte Diracsche Notation verwenden.

### 3.1.2 Symmetrische Operatoren

Wir kehren zu den Erwartungswerten zurück.  $\langle\psi|x^i|\psi\rangle$  und  $\langle\psi|p_i|\psi\rangle$  können gemessen werden und müssen deshalb reell sein. Davon wollen wir uns überzeugen. Zuerst werden wir zeigen, dass die Orts- und Impulsoperatoren 'überwältzbar', d.h. hermitesch oder zu sich selbst adjungiert sind. Der zu einem linearen Operator  $A$  *adjungierte Operator*  $A^\dagger$  ist definiert durch

$$\langle\phi|A|\psi\rangle \equiv (\phi, A\psi) = (A^\dagger\phi, \psi) \quad \text{für } \psi \in \mathcal{D}(A) \subset \mathcal{H}. \quad (3.12)$$

Ist  $A$  beschränkt, d.h. gilt  $\langle\psi|A|\psi\rangle \leq \text{Konstante} \cdot \langle\psi|\psi\rangle$  für alle Elemente des Hilbert-Raums, dann ist  $A$  auf dem ganzen Hilbertraum definiert und entsprechend ist sein Definitionsbereich  $\mathcal{D}(A)$  gleich dem ganzen Hilbert-Raum. Für unbeschränkte Operatoren, wie zum Beispiel den Orts- oder Impulsoperator, wählt man einen geeigneten Unter-

raum  $\mathcal{D}(A) \subset \mathcal{H}$  als Definitionsbereich. Im Folgenden soll der Definitionsbereich dicht im Hilbertraum liegen. Dann entfällt die Unterscheidung zwischen hermiteschen und symmetrischen Operatoren. Wir werden in dieser Vorlesung meistens etwas sorglos mit den Definitionsbereichen umgehen. Trotzdem lohnt es, an dieser Stelle den Unterschied zwischen symmetrischen und selbstadjungierten Operatoren festzuhalten:

Ein Operator  $A$  mit *dichtem* Definitionsbereich  $\mathcal{D}(A) \subset \mathcal{H}$  heißt:

- *symmetrisch*,  $A \subset A^\dagger$ , wenn  $A$  hermitesch ist und  $\mathcal{D}(A) \subset \mathcal{D}(A^\dagger)$  gilt.
- *selbstadjungiert*,  $A = A^\dagger$ , wenn  $A$  hermitesch ist und  $\mathcal{D}(A) = \mathcal{D}(A^\dagger)$  gilt.

Der Definitionsbereich des adjungierten Operators ist

$$\mathcal{D}(A^\dagger) = \{\phi \in \mathcal{H} \mid \text{existiert } \psi \in \mathcal{H}, \text{ so dass } (\phi, A\chi) = (\psi, \chi) \text{ für alle } \chi \in \mathcal{D}(A)\}.$$

Da nach Voraussetzung  $\mathcal{D}(A)$  dicht in  $\mathcal{H}$  liegt, ist der Vektor  $\psi$  eindeutig und man setzt  $A^\dagger\phi = \psi$ . Jeder beschränkte symmetrische Operator ist offensichtlich selbstadjungiert.

Die meisten Operatoren der Quantenmechanik sind unbeschränkt und zu ihrer Charakterisierung gehört die Angabe ihres Definitionsbereichs. Ist der Operator symmetrisch, so kann er eine, keine oder auch viele verschiedene selbstadjungierte Erweiterungen haben. Häufig hat man es aber mit *wesentlich selbstadjungierten* Operatoren zu tun. Das sind Operatoren, für die der Abschluss mit dem adjungierten Operator zusammenfällt,  $\bar{A} = A^\dagger$ . Ein wesentlich selbstadjungierter Operator hat also genau eine selbstadjungierte Erweiterung. In der Quantenmechanik mit Hilbertraum  $L_2$  bietet sich oft der Schwartzraum als Definitionsbereich an. Es gilt der folgende nützliche

**Satz:** *Es sei  $A$  ein symmetrischer Operator. Dann sind folgende Aussagen äquivalent:*

1.  $A$  ist *wesentlich selbstadjungiert*
2.  $n_\pm = \text{Ker}(A^\dagger \pm i) = \{0\}$
3.  $R(A \pm i)$  ist *dicht* in  $\mathcal{H}$ .

Im dritten Punkt ist  $R(A \pm i)$  das Bild (range) des Operators  $A \pm i\mathbb{1}$ , also

$$R(A \pm i) = (A \pm i)\mathcal{D}(A) \subset \mathcal{H}.$$

Bei den letzten beiden Charakterisierungen von wesentlich selbstadjungierten Operatoren müssen jeweils *beide* Bedingungen erfüllt sein. Zum Beispiel müssen beide *Defekt-Indizes*  $n_+$  und  $n_-$  verschwinden.

Im Folgenden möchte ich die Probleme mit den Definitionsbereichen nicht mehr weiter behandeln. Meistens kann man die formalen Betrachtungen im Nachgang mit den Methoden der Funktionalanalysis streng begründen. Wir kehren zu (3.12) zurück. Aus der Definition des adjungierten Operators folgt nun

$$((AB)^\dagger \phi, \psi) = (\phi, AB\psi) = (A^\dagger \phi, B\psi) = (B^\dagger A^\dagger \phi, \psi),$$

oder die wichtige, aus der linearen Algebra bekannte (formale) Identität

$$(AB)^\dagger = B^\dagger A^\dagger. \quad (3.13)$$

Man sieht auch leicht, dass die  $\dagger$ -Operation antilinear ist.

$$(\alpha A + \beta B)^\dagger = \bar{\alpha} A^\dagger + \bar{\beta} B^\dagger. \quad (3.14)$$

Nun wollen wir uns davon überzeugen, dass Orts- und Impulsoperator übergewälzt werden können. Auf dem dichten Schwartzschen Raum der Testfunktionen gelten

$$\begin{aligned} (\phi, \mathbf{x}\psi) &= \int dx \bar{\phi} \mathbf{x} \psi = \int dx \overline{\mathbf{x} \phi} \psi = (\mathbf{x} \phi, \psi) \quad \text{und} \\ (\phi, \mathbf{p}\psi) &= \frac{\hbar}{i} \int dx \bar{\phi} \nabla \psi = -\frac{\hbar}{i} \int dx \nabla \bar{\phi} \psi = (\mathbf{p} \phi, \psi). \end{aligned}$$

Also ist jede Komponente der Operatoren  $\mathbf{x}$  und  $\mathbf{p}$  symmetrisch. Beide können zu selbstadjungierten Operatoren erweitert werden<sup>1</sup>. Für einen symmetrischen Operator gilt offensichtlich

$$\langle \psi | A | \psi \rangle \equiv (\psi, A\psi) = (A\psi, \psi) = \overline{(\psi, A\psi)} \equiv \overline{\langle \psi | A | \psi \rangle}$$

wobei wir benutzt haben, dass bei Vertauschung der beiden Einträge das Skalarprodukt komplex konjugiert wird. Also sind die Matrixelemente  $\langle \psi | A | \psi \rangle$  eines symmetrischen Operators für alle  $|\psi\rangle \in \mathcal{D}(A)$  reell. Speziell sind der mittlere Teilchenort und Impuls reell.

An dieser Stelle entlehnen wir ein Resultat aus der Funktionalanalysis, nach dem jeder selbstadjungierte Operator  $A$  diagonalisiert werden kann und reelle Eigenwerte hat. Wir wollen uns jetzt überzeugen, dass die Eigenwerte eines s.a. Operators reell sind und die Eigenfunktionen zu *verschiedenen* Eigenwerten senkrecht aufeinander stehen. Sei also

$$A|n\rangle = a_n|n\rangle \quad \text{und} \quad A|m\rangle = a_m|m\rangle.$$

---

<sup>1</sup>Die Defektindizes sind jeweils  $(0, 0)$ .

Dann folgt nach Überwälzen von  $A$  die Identität

$$\langle n|A|m\rangle = a_m\langle n|m\rangle = \bar{a}_n\langle n|m\rangle.$$

Für gleiche Vektoren  $|n\rangle = |m\rangle$  folgt, dass die Eigenwerte  $a_n$  reell sein müssen. Für verschiedene Eigenwerte  $a_n \neq a_m$  folgt hingegen, dass die Eigenvektoren senkrecht sind,  $\langle n|m\rangle \equiv (\psi_n, \psi_m) = 0$ . Gibt es mehrere Eigenfunktionen mit demselben Eigenwert  $a_n$ , oder in anderen Worten, ist  $a_n$  entartet, so sind die Eigenfunktionen nicht automatisch orthogonal. In diesem Fall können wir uns aber mit dem Schmidtschen Verfahren Linearkombinationen von Eigenfunktionen mit demselben Eigenwert beschaffen, die orthogonal zueinander sind. Also, unabhängig davon ob  $A$  entartete Eigenwerte hat oder nicht, können wir immer annehmen, dass die Eigenfunktionen eines selbstadjungierten Operators ein *orthonormiertes System* im Hilbertraum bilden

$$A|n\rangle = a_n|n\rangle, \quad |n\rangle \text{ orthonormiert.}$$

Nun wollen wir ein weiteres Resultat aus der Funktionalanalysis übernehmen, nachdem die Eigenfunktionen jedes selbstadjungierten Operators in  $\mathcal{H}$  ein vollständiges System bilden. Ein vollständiges normiertes Orthogonalsystem nennt man eine Menge  $|n\rangle$  von Vektoren mit  $\langle n|m\rangle = \delta_{nm}$  und mit  $\sum_{n=1}^N \alpha_n|n\rangle$  überall dicht im Hilbert-Raum; d.h. zu jedem Vektor  $|\psi\rangle$  und vorgegebenen  $\epsilon > 0$  gibt es Zahlen  $\alpha_n$  und  $N$  mit

$$\left\| |\psi\rangle - \sum_{n=1}^N \alpha_n|n\rangle \right\| = \epsilon_N < \epsilon. \quad (3.15)$$

$\epsilon_N$  wird bei vorgegebenem  $N$  am kleinsten, wenn man

$$\alpha_n = \langle n|\psi\rangle$$

wählt. Daher gilt

$$|\psi\rangle = \sum_{n=1}^{\infty} \alpha_n|n\rangle = \sum_{n=1}^{\infty} \langle n|\psi\rangle|n\rangle. \quad (3.16)$$

Da insbesondere die orthonormiert gewählten Eigenfunktionen jedes selbstadjungierten Operators mit diskrettem Spektrum ein vollständiges orthonormiertes System bilden, können wir in (3.16) diese Eigenfunktionen wählen. In anderen Worten: wir können jedes Element  $|\psi\rangle$  im Hilbertraum nach den Eigenfunktionen eines gegebenen selbstadjungierten Operators entwickeln.

Aus (3.16) leiten wir folgende wichtige Eigenschaft für die Entwicklungskoeffizienten

$\alpha_n$  in dieser Entwicklung ab:

$$\langle \psi | \psi \rangle = \sum_{nm} \langle \alpha_n n | \alpha_m m \rangle = \sum_{nm} \bar{\alpha}_n \alpha_m \langle n | m \rangle = \sum_{nm} \bar{\alpha}_n \alpha_m \delta_{nm} = \sum_n |\alpha_n|^2.$$

Die Menge der Koeffizientenfolgen  $\{\alpha_n\}$  bilden einen linearen Raum, auf welchem wir das Skalarprodukt

$$(\alpha, \beta) = \sum_n \bar{\alpha}_n \beta_n$$

definieren können. Nach Vervollständigung erhalten wir den Hilbertraum  $\ell_2$  der quadratsummierbaren Zahlenfolgen. Wir haben soeben gezeigt, dass die lineare Abbildung

$$|\psi\rangle \longrightarrow \{\alpha_n = \langle n | \psi \rangle\}$$

von  $L_2$  nach  $\ell_2$  das Skalarprodukt erhält. In der Tat ist diese Abbildung ein längenerhaltender Isomorphismus von  $L_2$  auf  $\ell_2$ , also der quadratintegrierbaren Funktionen auf die quadratsummierbaren Zahlenfolgen. Dieser Isomorphismus ist die Grundlage des Schrödingerschen Beweises der Äquivalenz zwischen seiner Wellen- und Heisenbergs Matrizenmechanik. Ist der Zustandsvektor normiert,  $(\psi, \psi) = 1$ , so dass  $|\psi(\mathbf{x})|^2$  eine Wahrscheinlichkeitsdichte darstellt, so ist

$$\sum_n |\alpha_n|^2 = 1. \quad (3.17)$$

Wir werden später argumentieren, dass für ein System im 'Zustand'  $|\psi\rangle$  die Wahrscheinlichkeit, bei der Messung von  $A$  den Eigenwert  $a_n$  zu finden, gleich  $|\alpha_n|^2$  ist. (3.17) besagt dann, dass die Wahrscheinlichkeit, irgend einen Messwert zu finden, gleich Eins ist.

Wir beenden diesen Abschnitt mit einem lehrreichen Beispiel. Wir betrachten den Impulsoperator auf der Kreislinie  $S$  mit Umfang  $L$  und quasiperiodischen Randbedingungen,

$$p = \frac{\hbar}{i} \frac{d}{dx}, \quad \mathcal{D}(p, \theta) = \{\psi \in C^\infty(S, \mathbb{C}) \mid \psi(x+L) = e^{2\pi i \theta} \psi(x)\}. \quad (3.18)$$

Für verschiedene reelle Parameter  $\theta$  handelt es sich um verschiedene Operatoren. Obwohl sich die Impulsoperatoren nur im Definitionsbereich unterscheiden, haben sie unterschiedliche Spektren.

Diese Operatoren sind symmetrisch, da für alle  $\phi, \psi$  aus dem im Hilbertraum  $\mathcal{H} =$

$L_2(S)$  dichten Definitionsbereich  $\mathcal{D}(p, \theta)$  gilt

$$(\phi, p\psi) - (p\phi, \psi) = \frac{\hbar}{i} \int_S \frac{d}{dx} (\bar{\phi}\psi) = \frac{\hbar}{i} \bar{\phi}\psi \Big|_0^L = 0. \quad (3.19)$$

Die normierten Eigenfunktionen von  $p$  sind ebene Wellen mit  $\theta$ -abhängiger Wellenzahl,

$$\psi_n(x) = \frac{1}{\sqrt{L}} e^{ik_n x}, \quad k_n = \frac{2\pi}{L}(n + \theta), \quad (3.20)$$

und die zugehörigen Eigenwerte hängen ebenfalls von  $\theta$  ab,

$$p\psi_n = p_n\psi_n, \quad p_n = \hbar k_n. \quad (3.21)$$

Die Eigenfunktionen bilden eine orthonormierte Basis von  $\mathcal{H}$ . Jede Funktion in  $\mathcal{H}$  kann beliebig genau durch eine endliche Linearkombination der  $\psi_n$  approximiert werden.

## 3.2 Eigenfunktionen und Spektralzerlegung

Die normierten Eigenvektoren  $|n\rangle$  einer hermiteschen linearen Abbildung (Matrix)  $A : V \rightarrow V$  definieren eine *Orthonormalbasis* des Vektorraums  $V$ ,

$$A|n\rangle = a_n|n\rangle, \quad \langle n|m\rangle = \delta_{nm}, \quad a_n \in \mathbb{R}.$$

Für entartete Eigenwerte muss die Basis der Eigenvektoren eventuell angepasst werden. Bezüglich der Eigenbasis  $|n\rangle$  ist die Matrix  $A$  diagonal,

$$|v\rangle = \sum_n \alpha_n |n\rangle \implies A|v\rangle = \sum_n a_n \alpha_n |n\rangle = \sum_n a_n \langle n|v\rangle |n\rangle.$$

Beim letzten Schritt benutzten wir  $\alpha_n = \langle n|v\rangle$ . Da dies für jeden Vektor gilt, folgt sofort die *Spektralzerlegung* der linearen Abbildung  $A$ ,

$$A = \sum_n a_n |n\rangle \langle n|.$$

Die Abbildung  $P_n = |n\rangle \langle n|$  projiziert orthogonal auf den von  $|n\rangle$  aufgespannten eindimensionalen Unterraum von  $V$  und daher ist  $A$  eine Linearkombination von orthogonalen Projektoren,  $A = \sum a_n P_n$ . Diese Konstruktion wollen wir nun auf lineare selbstadjungierte Operatoren im Hilbertraum ausdehnen. Es ist gerade die delikate Eigenschaft eines Operators, selbstadjungiert zu sein und nicht lediglich hermitesch, welche die Quanten-

mechanik für Operatoren fordert, denen Observablen zugeordnet werden (siehe unten). Der Grund dafür liegt in den Spektraleigenschaften selbstadjungierter Operatoren, die physikalisch interpretiert werden.

### 3.2.1 Operatoren mit diskretem Spektrum

Für lineare selbstadjungierte Operatoren mit diskretem Spektrum hat die Spektralzerlegung die gleiche Form wie in der linearen Algebra. Im Allgemeinen enthalten die auftretenden Summen aber unendlich viele Glieder. Seien  $|n, \alpha\rangle$  die orthonormierten Eigenfunktionen eines selbstadjungierten (s.a.) Operators  $A$  zu gegebenem Eigenwert  $a_n$ ,

$$A|n, \alpha\rangle = a_n|n, \alpha\rangle.$$

Abweichend von obiger Notation berücksichtigen wir nun die mögliche *Entartung* von  $a_n$  durch eine zusätzliche Quantenzahl  $\alpha$ , die endlich viele Werte annehmen kann. Der Projektor auf den Unterraum von  $\mathcal{H}$ , auf dem  $A$  den Wert  $a_n$  hat, ist

$$P_n = \sum_{\alpha} |n, \alpha\rangle\langle n, \alpha| \implies P_n|\psi\rangle = \sum_{\alpha} \langle n, \alpha|\psi\rangle |n, \alpha\rangle.$$

In der Tat ist jeder Vektor im Unterraum  $P_n\mathcal{H}$  Eigenvektor von  $A$  mit Eigenwert  $a_n$ ,

$$\begin{array}{cccccccc} P_1 & P_2 & P_3 & P_4 & P_5 & P_6 & \text{Projektoren} \\ \hline | & | & | & | & | & | & \\ a_1 & a_2 & a_3 & a_4 & a_5 & a_6 & \text{Eigenwerte} \end{array}$$

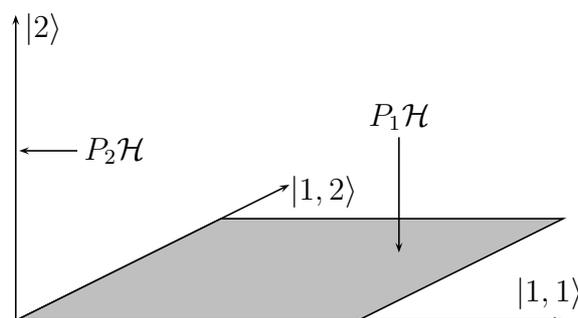


Abbildung 3.2: Die  $P_n$  projizieren auf orthogonale  $A$ -Eigenräume  $P_n\mathcal{H}$  von  $\mathcal{H}$ .

$$AP_n|\psi\rangle = \sum_{\alpha} \langle n, \alpha | \psi \rangle A|n, \alpha\rangle = a_n P_n|\psi\rangle, \quad \forall |\psi\rangle \in \mathcal{H}.$$

Da dies für beliebige  $|\psi\rangle \in \mathcal{H}$  wahr ist, gilt die Operator-Identität

$$AP_n = a_n P_n. \quad (3.22)$$

Der Unterraum  $P_n\mathcal{H} \subset \mathcal{H}$  ist also der Eigenraum zum Eigenwert  $a_n$  von  $A$ . Die Projektoren  $P_n$  auf die Eigenräume haben die Eigenschaften

$$\sum_n P_n = \mathbb{1}, \quad P_n^\dagger = P_n \quad \text{und} \quad P_m P_n = \delta_{mn} P_n. \quad (3.23)$$

Die erste Eigenschaft ist gerade die Vollständigkeitsrelation (3.16). Die beiden anderen Eigenschaften bedeuten, dass die Unterräume  $P_n\mathcal{H}$  und  $P_m\mathcal{H}$  zu verschiedenen Eigenwerten  $a_n$  und  $a_m$  orthogonal zueinander sind, wie in Abbildung (3.2) skizziert. Dies haben wir schon früher gesehen, als wir zeigten, dass Eigenfunktionen zu verschiedenen Eigenwerten orthogonal sind. Der explizite Beweis macht auch davon Gebrauch,

$$P_m P_n = \sum_{\alpha, \beta} |m, \beta\rangle \langle m, \beta | n, \alpha\rangle \langle n, \alpha | = 0,$$

da  $|n, \alpha\rangle$  und  $|m, \beta\rangle$  senkrecht aufeinander stehen. Wegen (3.22) und der Vollständigkeitsrelation in (3.23) folgt die wichtige *spektrale Zerlegung* des s.a. Operators  $A$

$$A = \sum a_n P_n. \quad (3.24)$$

Ist die Spektralzerlegung von  $A$  bekannt, so folgt die Spektralzerlegung von Potenzen von  $A$  oder allgemeiner beliebiger Funktionen von  $A$ ,

$$A^p = \sum_n a_n^p P_n \quad \text{oder allgemeiner} \quad f(A) = \sum_n f(a_n) P_n \quad (3.25)$$

Diese Zerlegungen werden bei der Diskussion des Messprozesses von großer Bedeutung sein. Wir wollen uns nun davon überzeugen, dass zwei kommutierende s.a. Operatoren  $A$  und  $B$  *gleichzeitig* diagonalisiert werden können. Diese Beobachtung erleichtert oft die Berechnung der Eigenwerte von Operatoren.

Sei nun  $|n, \alpha\rangle$  eine Eigenfunktion von  $A$  mit Eigenwert  $a_n$ , d.h.  $|n, \alpha\rangle \in P_n\mathcal{H}$ . Da  $A$  und  $B$  vertauschen, ist

$$AB|n, \alpha\rangle = BA|n, \alpha\rangle = a_n B|n, \alpha\rangle,$$

und deshalb liegt auch das Bild  $B|n, \alpha\rangle$  im  $A$ -Eigenraum  $P_n\mathcal{H}$ . Ist  $a_n$  nicht entartet, dann ist  $B|n\rangle$  proportional zu  $|n\rangle$ ,

$$B|n\rangle = b_n|n\rangle.$$

Für ein entartetes  $a_n$  ist das Bild  $B|n, \alpha\rangle$  im Allgemeinen nicht mehr parallel zu  $|n, \alpha\rangle$ . Aber wir können  $B : P_n\mathcal{H} \rightarrow P_n\mathcal{H}$  auf dem Eigenraum  $P_n\mathcal{H}$  diagonalisieren. Die entsprechenden Eigenvektoren  $|n, \beta\rangle$  von  $B$  sind gleichzeitig Eigenvektoren von  $A$  mit Eigenwert  $a_n$ . Bezüglich der neuen Basis sind die Operatoren  $A$  und  $B$  beide diagonal.

### 3.2.2 Operatoren mit kontinuierlichen Spektren

Das Standardbeispiel eines Operators mit kontinuierlichem Spektrum ist der Impulsoperator. Wir wollen uns hier nicht auf 3 Dimensionen beschränken und untersuchen diesen Operator in  $d$  Dimensionen. Im Ortsraum ist  $\hat{\mathbf{p}} = \frac{\hbar}{i}\nabla$  und die Eigenfunktionen sind ebene Wellen

$$\psi_{\mathbf{p}}(\mathbf{x}) = \kappa e^{i\mathbf{p}\cdot\mathbf{x}/\hbar}, \quad \kappa = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{d/2}} \quad \text{mit Eigenwert} \quad \mathbf{p} = (p_1, \dots, p_d).$$

Die Fourierdarstellung einer quadratintegrierbaren Funktion im Ortsraum hat die Form

$$\psi(\mathbf{x}) = \int d\mathbf{p} \tilde{\psi}(\mathbf{p}) \psi_{\mathbf{p}}(\mathbf{x}), \quad \tilde{\psi}(\mathbf{p}) = \int d\mathbf{x} \bar{\psi}_{\mathbf{p}}(\mathbf{x}) \psi(\mathbf{x}) = (\psi_{\mathbf{p}}, \psi),$$

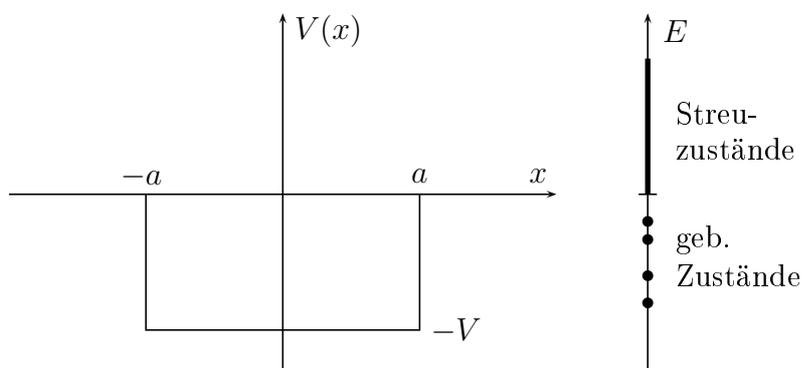
wobei  $d\mathbf{x}$  und  $d\mathbf{p}$  für die Integrationen über die kartesischen Koordinaten im  $d$ -dimensionalen Orts- bzw. Impulsraum stehen. Die Fouriertransformierte  $\tilde{\psi}$  von  $\psi$  ist also gleich dem Skalarprodukt von  $\psi_{\mathbf{p}}$  und  $\psi$ , so dass

$$\psi(\mathbf{x}) = \int d\mathbf{p} (\psi_{\mathbf{p}}, \psi) \psi_{\mathbf{p}}(\mathbf{x}). \quad (3.26)$$

Dies sollte mit der Entwicklung (3.16) eines Zustandsvektors nach der vollständigen orthonormierten Eigenbasis eines s.a. Operators mit diskretem Spektrum verglichen werden:

$$\psi(\mathbf{x}) = \sum (\psi_n, \psi) \psi_n(\mathbf{x}).$$

Ein weiteres Beispiel sind die Eigenfunktionen des eindimensionalen Hamilton-Operators mit einem Kastenpotential wie in der Abbildung (3.3). Es gibt eine endliche Anzahl normierbarer Eigenzustände des zugehörigen Hamilton-Operators mit  $E_n < 0$  und Eigenzustände mit beliebigen  $E > 0$ , die Streuzustände. Die Streuzustände haben ein kontinuier-

Abbildung 3.3: Kastenpotential und das entsprechende Spektrum von  $H$ 

liches Energiespektrum und sind nicht normierbar.

Wie in diesen Beispielen gilt auch in der allgemeinen Situation, dass die Eigenfunktionen eines selbstadjungierten Operators  $A$  im diskreten Teil des Spektrums,

$$A\psi_n = a_n\psi_n, \quad a_n \in \mathbb{R} \quad (3.27)$$

normierbar sind und diejenigen mit Eigenwerten im kontinuierlichen Spektrum,

$$A\psi_a = a\psi_a, \quad a \in \mathbb{R}, \quad (3.28)$$

nicht normierbar sind. Die Formeln werden übersichtlicher, wenn wir wieder die Dirac'schen Bras und Kets verwenden. In dieser Notation entspricht einem beliebigen  $\psi$  im Hilbertraum das Ket  $|\psi\rangle$  und für die Eigenzustände schreiben wir

$$|\psi_n\rangle \sim |n\rangle \quad \text{und} \quad |\psi_a\rangle \sim |a\rangle.$$

Die Beziehungen (3.27) und (3.28) schreiben sich dann wie folgt,

$$\begin{aligned} A|n\rangle = a_n|n\rangle &\Rightarrow f(A)|n\rangle = f(a_n)|n\rangle \\ A|a\rangle = a|a\rangle &\Rightarrow f(A)|a\rangle = f(a)|a\rangle. \end{aligned} \quad (3.29)$$

Da die Eigenfunktionen  $\{|n\rangle, |a\rangle\}$  ein vollständiges Funktionensystem bilden, ist jeder Zustandsvektor  $|\psi\rangle$  eine Linearkombination dieser Eigenfunktionen,

$$|\psi\rangle = \sum_n \alpha_n |n\rangle + \int da \alpha(a) |a\rangle$$

$$\langle \psi | = \sum_n \bar{\alpha}_n \langle n | + \int da \bar{\alpha}(a) \langle a |. \quad (3.30)$$

Enthält das Spektrum nur diskrete Eigenwerte, dann finden wir wieder die Entwicklung (3.16). Die Koeffizienten  $\{\alpha_n, \alpha(a)\}$  bestimmen den Vektor  $|\psi\rangle$  eindeutig. Mit (3.29) ist dann

$$f(A)|\psi\rangle = \sum_n \alpha_n f(a_n)|n\rangle + \int da \alpha(a) f(a)|a\rangle. \quad (3.31)$$

Früher haben wir bewiesen, dass die quadratintegrierbaren Eigenfunktionen  $|n\rangle$  orthonormiert gewählt werden können. Wir werden jetzt zeigen, dass die Eigenfunktionen im kontinuierlichen Spektrum orthogonal zu den gebundenen Zuständen sind und ebenfalls 'orthonormiert' gewählt werden können:

$$\langle m | n \rangle = \delta_{mn}, \quad \langle a | b \rangle = \delta(a - b) \quad \text{und} \quad \langle n | a \rangle = 0. \quad (3.32)$$

Diese Normierungsvorschriften für die Eigenfunktionen des diskreten und kontinuierlichen Spektrums bezeichnet man als *Normierung auf eine  $\delta$ -Funktion*. Die  $|a\rangle$  sind nicht normierbar, da  $\langle a | a \rangle$  formal unendlich ist.

Um die letzte Eigenschaft in (3.32) zu zeigen wählen wir für  $|\psi\rangle$  eine beliebige Überlagerung der ungebundenen Zustände,  $|\psi\rangle = \int da \alpha(a) |a\rangle$ . Dann ist

$$\langle n | A | \psi \rangle = \int da \alpha(a) a \langle n | a \rangle \stackrel{A=A^\dagger}{=} a_n \int da \alpha(a) \langle n | a \rangle.$$

Wir wollen annehmen, dass die Mengen  $\{a_n\}$  und  $\{a\}$  disjunkt sind. Dann impliziert diese Gleichung, die ja für beliebige Koeffizientenfunktionen  $\alpha(a)$  gilt, dass die gebundenen Zustände senkrecht zu den ungebundenen Zuständen sind, was zu beweisen war. Die Identität

$$\langle b | A | \psi \rangle = \int da \alpha(a) a \langle b | a \rangle \stackrel{A=A^\dagger}{=} b \int da \alpha(a) \langle b | a \rangle.$$

kann nur gelten wenn  $\langle b | a \rangle$  proportional zu  $\delta(b - a)$  ist. Nun kann man jede Eigenfunktion  $|a\rangle$  mit einer passenden Zahl multiplizieren, so dass die mittlere Beziehung in (3.32) gilt.

Mit den gerade gezeigten Orthogonalitätsrelationen (3.32) findet man nun für die Entwicklungskoeffizienten in (3.30) die Formeln

$$\alpha_n = \langle n | \psi \rangle \quad \text{und} \quad \alpha(a) = \langle a | \psi \rangle, \quad (3.33)$$

so dass

$$|\psi\rangle = \sum_n \langle n|\psi\rangle |n\rangle + \int da \langle a|\psi\rangle |a\rangle \quad \text{und} \quad \langle \psi|\psi\rangle = \sum_n |\alpha_n|^2 + \int da |\alpha(a)|^2 \quad (3.34)$$

ist. Die letzte Gleichung ist die Verallgemeinerung der Parsevalgleichung. Wenn wir die für beliebige Vektoren gültige erste Formel etwas umschreiben,

$$|\psi\rangle = \left( \sum_n |n\rangle \langle n| + \int da |a\rangle \langle a| \right) |\psi\rangle,$$

dann identifizieren wir den Operator zwischen den runden Klammern als Einheitsoperator,

$$\mathbb{1} = \sum_n |n\rangle \langle n| + \int da |a\rangle \langle a|. \quad (3.35)$$

Diese *Zerlegung der Eins* werden wir im Folgenden sehr oft brauchen.

Wegen (3.31) und (3.32) ist der Mittelwert von  $f(A)$  im (normierten) Zustand  $|\psi\rangle$  gleich

$$\langle \psi|f(A)|\psi\rangle = \sum_n f(a_n) |\alpha_n|^2 + \int da f(a) |\alpha(a)|^2. \quad (3.36)$$

Für einen auf Eins normierten Zustand  $|\psi\rangle$  legt uns dieses Resultat und die letzte Gleichung in (3.34) nahe,

$$w(\Delta) = \sum_{a_n \in \Delta} |\alpha_n|^2 + \int_{\Delta} d\alpha |\alpha(a)|^2 \quad (3.37)$$

als Wahrscheinlichkeit dafür anzusehen, bei der Messung der Observablen  $A$  im Zustand  $|\psi\rangle$  einen Wert in  $\Delta \subset \mathbb{R}$  zu finden. Insbesondere ist dann  $|\alpha_n|^2$  die Wahrscheinlichkeit dafür, den Wert  $a_n$  zu messen. Wir kommen darauf zurück bei der Besprechung des Messprozeß.

### 3.2.3 Orts- und Impulsoperator

Wir illustrieren das Gelernte anhand des Orts- und Impulsoperators. In  $\mathbb{R}^d$  haben beide ein kontinuierliches Spektrum und wir bezeichnen die Eigenzustände mit  $|\mathbf{x}\rangle$  und  $|\mathbf{p}\rangle$ ,

$$\hat{\mathbf{x}}|\mathbf{x}\rangle = \mathbf{x}|\mathbf{x}\rangle \quad , \quad \hat{\mathbf{p}}|\mathbf{p}\rangle = \mathbf{p}|\mathbf{p}\rangle. \quad (3.38)$$

Die entsprechenden Zerlegungen der Eins lauten

$$\int dx |\mathbf{x}\rangle\langle\mathbf{x}| = \mathbb{1} \quad \text{und} \quad \int dp |\mathbf{p}\rangle\langle\mathbf{p}| = \mathbb{1}. \quad (3.39)$$

Wir können einen beliebigen Zustandsvektor  $|\psi\rangle$  nach den Eigenzuständen des Orts- bzw. Impulsoperators entwickeln:

$$\begin{aligned} |\psi\rangle &= \int dx \langle\mathbf{x}|\psi\rangle |\mathbf{x}\rangle \equiv \int dx \psi(\mathbf{x}) |\mathbf{x}\rangle \\ |\psi\rangle &= \int dp \langle\mathbf{p}|\psi\rangle |\mathbf{p}\rangle \equiv \int dp \tilde{\psi}(\mathbf{p}) |\mathbf{p}\rangle. \end{aligned} \quad (3.40)$$

In der Ortsdarstellung ist der Ortsoperator diagonal und der (abstrakte) Zustandsvektor  $|\psi\rangle$  wird durch die Koeffizientenfunktion  $\psi(\mathbf{x})$ , also die Wellenfunktion im Ortsraum, charakterisiert. Analog ist  $\tilde{\psi}(\mathbf{p})$  die Koeffizientenfunktion in der Impulsdarstellung. Die verallgemeinerte Parsevalgleichung (3.34) geht über in die gewöhnliche Parsevalgleichung der Fouriertransformation,

$$\langle\psi|\psi\rangle = \int dx |\psi(\mathbf{x})|^2 = \int dp |\tilde{\psi}(\mathbf{p})|^2.$$

Die nach der Gleichung (3.36) gemachten Aussagen bedeuten nun, dass

$$w(\mathbf{x}) = |\psi(\mathbf{x})|^2 \quad \text{und} \quad \tilde{w}(\mathbf{p}) = |\tilde{\psi}(\mathbf{p})|^2$$

die Wahrscheinlichkeitsdichten dafür sind, das System im Ortsraum bei  $\mathbf{x}$  bzw. im Impulsraum bei  $\mathbf{p}$  zu finden, in übereinstimmung mit unseren Grundannahmen über die Struktur der Quantenmechanik in Abschnitt (2.1.1).

Der Übergang von der Orts- in die Impulsdarstellung erfolgt gemäß

$$\psi(\mathbf{x}) \equiv \langle\mathbf{x}|\psi\rangle = \langle\mathbf{x}|\mathbb{1}|\psi\rangle = \int dp \langle\mathbf{x}|\mathbf{p}\rangle\langle\mathbf{p}|\psi\rangle \equiv \int dp \langle\mathbf{x}|\mathbf{p}\rangle \tilde{\psi}(\mathbf{p}).$$

Dabei ist  $\langle\mathbf{x}|\mathbf{p}\rangle$  der Eigenzustand von  $\hat{\mathbf{p}}$  in der Ortsdarstellung,

$$\langle\mathbf{x}|\mathbf{p}\rangle = \psi_p(\mathbf{x}) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{d/2}} e^{i\mathbf{p}\cdot\mathbf{x}/\hbar}. \quad (3.41)$$

Die Koeffizientenfunktion  $\tilde{\psi}(\mathbf{p})$  in der Impulsdarstellung ist, wie erwartet, die Fouriertransformierte der Koeffizientenfunktion  $\psi(\mathbf{x})$  in der Ortsdarstellung. Im Ortsraum lautet

die *Zerlegung der Eins* (3.35) für einen beliebigen selbstadjungierten Operator

$$\delta(\mathbf{x} - \mathbf{y}) = \langle \mathbf{x} | \mathbf{y} \rangle = \langle \mathbf{x} | \mathbb{1} | \mathbf{y} \rangle \stackrel{(3.35)}{=} \sum_n \langle \mathbf{x} | n \rangle \langle n | \mathbf{y} \rangle + \int da \langle \mathbf{x} | a \rangle \langle a | \mathbf{y} \rangle. \quad (3.42)$$

Da sie die Vollständigkeit der Eigenfunktionen  $\{|n\rangle, |a\rangle\}$  im Ortsraum ausdrückt, heisst sie ebenfalls *Vollständigkeitsrelation*. Ein linearer Operator  $A$  wirkt folgendermassen auf eine Wellenfunktion im Ortsraum,

$$(A\psi)(\mathbf{x}) \equiv \langle \mathbf{x} | A | \psi \rangle = \int d\mathbf{y} \langle \mathbf{x} | A | \mathbf{y} \rangle \langle \mathbf{y} | \psi \rangle = \int d\mathbf{y} \langle \mathbf{x} | A | \mathbf{y} \rangle \psi(\mathbf{y}).$$

Dies ist eine Faltung von  $\psi(x)$  mit dem Kern  $\langle \mathbf{x} | A | \mathbf{y} \rangle$ . Speziell ist

$$\langle \mathbf{x} | \hat{\mathbf{x}} | \mathbf{y} \rangle = \mathbf{y} \delta(\mathbf{x} - \mathbf{y}) = \mathbf{x} \delta(\mathbf{x} - \mathbf{y}) \quad \text{und} \quad \langle \mathbf{x} | \hat{\mathbf{p}} | \mathbf{y} \rangle = \frac{\hbar}{i} \nabla_x \delta(\mathbf{x} - \mathbf{y}).$$

### 3.2.4 Spektralprojektoren

ähnlich wie im diskreten Fall kann man für jeden s.a. Operator die Schar der *Projektionsoperatoren*,  $P_\Delta$ , wobei  $\Delta$  ein Intervall in  $\mathbb{R}$  ist, einführen:

$$P_\Delta = \sum_{n: a_n \in \Delta} |n\rangle \langle n| + \int_{a \in \Delta} da |a\rangle \langle a|. \quad (3.43)$$

$P_\Delta$  projiziert senkrecht auf dem Unterraum  $P_\Delta \mathcal{H}$ , der von allen Eigenvektoren  $\{|n\rangle, |a\rangle\}$  von  $A$  aufgespannt wird, deren Eigenwerte  $\{a_n, a\}$  im Intervall  $\Delta$  liegen. Dass die  $P_\Delta$  orthogonale Projektoren sind, folgt aus den Eigenschaften

$$P_\Delta^\dagger = P_\Delta, \quad P_\Delta P_{\Delta'} = P_{\Delta'} P_\Delta = P_{\Delta \cap \Delta'} \quad \text{und} \quad P_{(-\infty, \infty)} = \mathbb{1}. \quad (3.44)$$

Die Symmetrie der Spektralprojektoren ist leicht einzusehen und die letzte Eigenschaft ist gerade die Zerlegung der Eins in (3.35). Wir brauchen deshalb nur die zweite Eigenschaft beweisen. Mit (3.32) folgt

$$\begin{aligned} P_{\Delta'} P_\Delta &= \left( \sum_{a_m \in \Delta'} |m\rangle \langle m| + \int_{\Delta'} db |b\rangle \langle b| \right) \left( \sum_{a_n \in \Delta} |n\rangle \langle n| + \int_{\Delta} da |a\rangle \langle a| \right) \\ &= \left( \sum_{a_n \in \Delta' \cap \Delta} |n\rangle \langle n| + \int_{\Delta' \cap \Delta} da |a\rangle \langle a| \right) = P_{\Delta' \cap \Delta}, \end{aligned}$$

was zu beweisen war. Die  $P_\Delta$  sind also kommutierende Projektoren. Sind  $\Delta$  und  $\Delta'$  disjunkte Spektralbereiche, dann sind die zugehörigen Projektoren orthogonal. Die  $P_\Delta$  kommutieren mit  $A$ . Wählen wir  $\Delta = \Delta'$  in (3.44), dann folgt

$$P_\Delta^2 = P_\Delta.$$

Die Spektralprojektoren haben also die Eigenwerte 0 und 1. Die Eigenfunktionen mit Eigenwert 0 sind senkrecht zu  $P_\Delta \mathcal{H}$  und diejenigen mit Eigenwert 1 liegen in  $P_\Delta \mathcal{H}$ .

Abschliessend wollen wir noch die Spektralprojektoren des Ortsoperators explizit bestimmen. Das rein kontinuierliche Spektrum der gleichzeitig diagonalisierbaren Operatoren  $\hat{\mathbf{x}} = \{\hat{x}^1, \dots, \hat{x}^d\}$  ist  $\mathbb{R}^d$ . Sei also  $\Delta$  eine Untermenge des  $\mathbb{R}^d$ . Dann ist

$$\begin{aligned} (P_\Delta \psi)(\mathbf{x}) &= \langle \mathbf{x} | P_\Delta | \psi \rangle = \int_\Delta d\mathbf{y} \langle \mathbf{x} | \mathbf{y} \rangle \langle \mathbf{y} | \psi \rangle = \int_\Delta d\mathbf{y} \delta(\mathbf{x} - \mathbf{y}) \langle \mathbf{y} | \psi \rangle \\ &= \begin{cases} \langle \mathbf{x} | \psi \rangle = \psi(\mathbf{x}) & \text{falls } \mathbf{x} \in \Delta \\ 0 & \text{falls } \mathbf{x} \notin \Delta \end{cases} \end{aligned} \quad (3.45)$$

und entsprechend ist der Mittelwert des Projektors auf den Unterraum der Eigenfunktionen mit Eigenwert in  $\Delta$  gleich

$$\langle \psi | P_\Delta | \psi \rangle = \int_\Delta d\mathbf{x} |\psi(\mathbf{x})|^2 = \int_\Delta d\mathbf{x} w(\mathbf{x}). \quad (3.46)$$

Die Wahrscheinlichkeit, ein Teilchen im Zustand  $|\psi\rangle$  im Gebiet  $\Delta$  zu finden, ist demnach gleich  $\langle \psi | P_\Delta | \psi \rangle$ . Der Unterraum  $P_\Delta \mathcal{H}$  besteht aus allen Funktionen mit Träger in  $\Delta$ .

### 3.3 Unitäre Operatoren

In der Quantentheorie spielen neben den selbstadjungierten auch die unitären Operatoren eine herausragende Rolle. Zum Beispiel ist die Lösung der zeitabhängigen Schrödinger-Gleichung mit Anfangsfunktion  $|\psi(t_0)\rangle$  durch einen unitären Zeitentwicklungsoperator bestimmt,

$$|\psi(t)\rangle = U(t, t_0) |\psi(t_0)\rangle.$$

Auch *Symmetrien* in der Quantenmechanik werden immer durch (anti)unitäre Operatoren implementiert. Unitäre Operatoren sind spezielle *isometrische Operatoren*. Dies sind

Operatoren, welche die Norm von Vektoren unverändert lassen,

$$(U\psi, U\chi) = (U^\dagger U\psi, \chi) = (\psi, \chi).$$

Invertierbare isometrische Operatoren heißen nun *unitär* und erfüllen

$$U^\dagger U = UU^\dagger = \mathbb{1} \quad \text{beziehungsweise} \quad U^\dagger = U^{-1}. \quad (3.47)$$

Hier wollen wir noch anmerken, dass es zwischen unitären und selbstadjungierten Operatoren den folgenden Zusammenhang gibt:

$$U \text{ unitär} \iff U = e^{iA} \quad A \text{ selbstadjungiert.} \quad (3.48)$$

Dass  $U$  für ein selbstadjungiertes  $A$  unitär ist, ist formal schnell bewiesen

$$U^\dagger = (e^{iA})^\dagger = e^{-iA^\dagger} = e^{-iA} = (e^{iA})^{-1} = U^{-1}.$$

Die Umkehrung erfordert etwas mehr Arbeit und wird hier nicht gezeigt. Ist  $|n\rangle$  eine Eigenfunktion von  $A$  mit reellem Eigenwert  $a_n$ , dann ist

$$U|n\rangle = e^{iA}|n\rangle = e^{ia_n}|n\rangle. \quad (3.49)$$

Die Eigenwerte von unitären Operatoren sind also reine Phasen und die (passend gewählten) Eigenfunktionen bilden ein vollständiges Orthonormalsystem. Ist  $U$  unitär und  $B$  selbstadjungiert, so ist auch der zu  $B$  ähnliche Operator  $UBU^{-1}$  selbstadjungiert:

$$(UBU^{-1})^\dagger = U^{-1\dagger} B^\dagger U^\dagger = UBU^{-1}.$$

ähnlich wie oben kann man nun zeigen, dass ein selbstadjungierter Operator  $B$  und ein unitärer Operator  $U$ , die kommutieren,

$$UBU^{-1} = B \iff UB = BU, \quad (3.50)$$

gleichzeitig diagonalisiert werden können.

Schlussendlich bemerken wir noch, dass jeder selbstadjungierte Operator und damit auch jeder unitäre Operator, mit einem unitären Operator diagonalisiert werden kann. Dies folgt aus den obigen Betrachtungen und insbesondere daraus, dass die Eigenfunktionen von selbstadjungierten und unitären Operatoren ein vollständiges orthonormiertes System bilden. Also gibt es zu jedem selbstadjungierten Operator  $B$  beziehungsweise je-

dem unitären Operator  $U$  einen unitären Operator  $V$ , so dass

$$V_B^{-1} B V_B = D_B, \quad V_U^{-1} U V_U = D_U \quad , \quad D_B, D_U \quad \text{diagonal} \quad (3.51)$$

gelten. Die nichtverschwindenden Diagonalelemente von  $D_B$  bzw.  $D_U$  sind die Eigenwerte von  $B$  bzw.  $U$  und damit reelle Zahlen bzw. reine Phasen.

### 3.3.1 Unitäre Translationsoperatoren

Wir illustrieren nun die allgemeine Theorie anhand der einparametrischen Schar von unitären Operatoren

$$U(a) = e^{iap/\hbar}, \quad \text{wobei} \quad p = \frac{\hbar}{i} \frac{d}{dx}, \quad a \in \mathbb{R}, \quad (3.52)$$

der Impulsoperator auf der Kreislinie  $\mathcal{S}$  mit Umfang  $L$  ist, siehe (3.18). Auf reelle und analytische Wellenfunktionen wirken sie wie folgt,

$$(U(a)\psi)(x) = \psi(x) + a\psi'(x) + \frac{a^2}{2!}\psi''(x) + \dots = \psi(x+a).$$

Die exponentierten Impulse verschieben also das Argument der Wellenfunktion. Aus der letzten Darstellung entnehmen wir, dass die Verschiebungs- oder Translationsoperatoren  $U(a)$  auf dem ganzen Hilbert-Raum, im Beispiel  $L_2(\mathcal{S})$ , definiert sind. Wie nach der allgemeinen Theorie erwartet, sind sie unitär,

$$(U(a)\phi, U(a)\psi) = \int_{\mathcal{S}} dx \bar{\phi}(x+a)\psi(x+a) = \int_{\mathcal{S}} dx \bar{\phi}(x)\psi(x) = \langle \phi | \psi \rangle. \quad (3.53)$$

Unitäre und damit beschränkte Translationsoperatoren können natürlich auch auf dem Hilbertraum  $L_2(\mathbb{R}^3)$  definiert werden,

$$(U(\mathbf{a})\psi)(\mathbf{x}) = (e^{i\mathbf{a}\mathbf{p}/\hbar}\psi)(\mathbf{x}) = \psi(\mathbf{x} + \mathbf{a}). \quad (3.54)$$

Wir werden dieses Resultat später in dieser Vorlesung brauchen.

### 3.3.2 Cayley-Transformation

Neben der Exponentiation gibt es eine weitere Transformation, die einem selbstadjungierten Operator einen unitären Operator zuordnet. Diese nach CAYLEY benannte Transformation ist motiviert durch die einfache Beobachtung, dass für jede reelle Zahl  $a$  die

komplexe Zahl

$$u = \frac{i - a}{i + a}$$

die Länge 1 hat, also eine Phase ist. Die Umkehrtransformation lautet

$$a = i \frac{1 - u}{1 + u}.$$

Sie existiert nur, wenn  $1 + u$  nicht verschwindet. Die Cayley-Transformation  $\mathbb{R} \ni a \rightarrow u \in \mathcal{S}$  wird zu einer Transformation von selbstadjungierten Operatoren (mit reellen Eigenwerten) auf unitäre Operatoren (mit Eigenwerten auf dem Einheitskreis in der komplexen Ebene). Für jeden selbstadjungierten Operator  $A$  ist die Cayley-Transformierte

$$U = (i - A)(i + A)^{-1} \quad (3.55)$$

ein unitärer Operator. Umgekehrt ist für jeden unitären Operator für den  $-1$  nicht im Spektrum liegt, der transformierte Operator

$$A = i(1 - U)(1 + U)^{-1} \quad (3.56)$$

selbstadjungiert.

Wählen wir zum Beispiel für den selbstadjungierten Operator  $A$  eine Linearkombination der Impulse,  $A = \mathbf{a}\mathbf{p}/\hbar = -i\mathbf{a}^i\partial_i$ , dann zeigt eine kurze Rechnung

$$\begin{aligned} (U(\mathbf{a})\psi)(\mathbf{x}) &= \frac{1}{(2\pi)^{n/2}} \int d^n k \frac{1 + i\mathbf{k}\mathbf{a}}{1 - i\mathbf{k}\mathbf{a}} e^{i\mathbf{k}\mathbf{x}} \tilde{\psi}(\mathbf{k}) \\ &= \psi(\mathbf{x}) + 2(\mathbf{a}\nabla\psi + (\mathbf{a}\nabla)^2\psi + \dots)(\mathbf{x}) \\ &= -\psi(\mathbf{x}) + 2 \int_0^\infty e^{-\xi} \psi(\mathbf{x} + \xi\mathbf{a}) d\xi. \end{aligned} \quad (3.57)$$

Offensichtlich ist  $U(\mathbf{a})$  unitär, da die Fourier-Transformierte von  $U\psi$  bis auf eine Phase gleich der Transformierten von  $\psi$  ist. Aus der zweiten Darstellung folgern wir, dass die Cayley-Transformierte mit Parametern  $\mathbf{a}/2$  die Exponentialfunktion (3.54) mit Parametern  $\mathbf{a}$  bis auf einen Fehler der Ordnung  $\mathbf{a}^2$  approximiert. Die letzte Darstellung dagegen macht deutlich, dass die unitären Operatoren  $U(\mathbf{a})$  auf ganz  $L_2(\mathbb{R}^n)$  definiert sind. Die Cayley-Transformation wird in numerischen Codes zur Lösung der zeitabhängigen Schrödinger-Gleichung verwendet.