Quantenmechanische Konzepte

Kim Boström

1 Der Hilbertraum

1.1 Definition

Vektorraum Ein Vektorraum V über dem Körper $\mathbb{C}$ ist eine Menge mit einem ausgezeichneten Nullelement 0, einer Addition $+ : V \times V \longrightarrow V$ und einer skalaren Multiplikation $\cdot : \mathbb{C} \times V \longrightarrow V$, so dass für alle $\psi, \varphi, \chi \in V$ und alle $c, d \in \mathbb{C}$ gilt:

$$\begin{aligned}
&\psi + \varphi = \varphi + \psi && (1)\\
&\psi + (\varphi + \chi) = (\psi + \varphi) + \chi && (2)\\
&\psi + 0 = \psi && (3)\\
\exists(-\psi) \in V: \ &\psi + (-\psi) = 0 && (4)\\
&c(\psi + \varphi) = c\psi + c\varphi && (5)\\
&(c + d)\psi = c\psi + d\psi && (6)\\
&(cd)\psi = c(d\psi) && (7)\\
&1\psi = \psi && (8)
\end{aligned}$$

1.2 Normen und Skalarprodukte

Metrischer Raum Eine Menge M mit einer Abbildung $d : M \times M \longrightarrow \mathbb{R}$ heißt **metrischer Raum** und die Abbildung d heißt **Metrik**, wenn für alle $x, y, z \in M$ gilt:

$$\begin{aligned}
d(x, y) &\geq 0 && \text{(positiv)} && (9)\\
d(x, y) = 0 &\Longleftrightarrow x = y && \text{(definit)} && (10)\\
d(x, y) &= d(y, x) && \text{(symmetrisch)} && (11)\\
d(x, z) &\leq d(x, y) + d(y, z) && \text{(Dreiecksungleichung)} && (12)
\end{aligned}$$

Normierter Raum Ein Vektorraum V ist **normiert**, wenn es eine Abbildung $\|\cdot\| : V \to \mathbb{R}$ gibt, so dass für alle $\psi, \varphi \in V$, $c \in \mathbb{C}$ gilt:

$$\begin{aligned}
\|\psi\| &\geq 0 && \text{(positiv)} && (13)\\
\|\psi\| = 0 &\Longleftrightarrow \psi = 0 && \text{(definit)} && (14)\\
\|c\psi\| &= |c|\,\|\psi\| && \text{(homogen)} && (15)\\
\|\psi + \varphi\| &\leq \|\psi\| + \|\varphi\| && \text{(Dreiecksungleichung)} && (16)
\end{aligned}$$

Diese Abbildung heißt **Norm** des Raumes V. Jede Norm liefert sofort die Metrik $d(x, y) := \|x - y\|$, normierte Räume sind somit stets auch metrische Räume.

Banachraum (vollständiger normierter Raum) Ein normierter Raum V ist vollständig, wenn jede Cauchyfolge in V gegen ein Element aus V konvergiert, d. h.

$$\|\psi_n - \psi_m\| \to 0 \quad \Rightarrow \quad \exists \psi \in V: \ \|\psi_n - \psi\| \to 0 \tag{17}$$

Skalarprodukt Ein (komplexes) Skalarprodukt auf dem Vektorraum V ist eine Abbildung $\langle\cdot|\cdot\rangle : V \times V \to \mathbb{C}$ mit

$$\langle\psi|\psi\rangle \geq 0 \tag{18}$$
$$\langle\psi|\psi\rangle = 0 \quad \Leftrightarrow \quad \psi = o \tag{19}$$
$$\langle\psi|\varphi\rangle = \langle\varphi|\psi\rangle^* \tag{20}$$
$$\langle\psi|\varphi_1 + \varphi_2\rangle = \langle\psi|\varphi_1\rangle + \langle\psi|\varphi_2\rangle \tag{21}$$
$$\langle\psi|c\varphi\rangle = c\langle\psi|\varphi\rangle \tag{22}$$

Unitärer Raum Ein unitärer Raum V ist ein normierter Raum mit Skalarprodukt, so dass für alle $\psi \in V$ gilt:

$$\langle\psi|\psi\rangle = \|\psi\|^2 \tag{23}$$

Prä-Hilbertraum Ein Raum mit Skalarprodukt.

Hilbertraum Ein unitärer Banachraum.

1.3 Morphismen

1.3.1 Der Zoo der Morphismen

Homomorphismus Eine Abbildung $f : V \longrightarrow W$ zwischen zwei Vektorräumen V und W heißt **Homomorphismus**, wenn sie **linear** ist, d. h., sie ist **additiv**,

$$\underset{\phi_1,\phi_2 \in V}{\forall} \ f(\phi_1 + \phi_2) \ = \ f(\phi_1) + f(\phi_2)\,, \tag{24}$$

und **homogen**,

$$\underset{\phi \in V, \alpha \in \mathbb{C}}{\forall} \ f(\alpha\phi) \ = \ \alpha f(\phi)\,. \tag{25}$$

Homomorphismen heißen auch (lineare) **Operatoren**.
Gilt statt der Homogenität

$$\underset{\phi \in V, \alpha \in \mathbb{C}}{\forall} \ f(\alpha\phi) \ = \ \alpha^* f(\phi)\,, \tag{26}$$

so heißt die Abbildung f **antilinear** und ist ein **Antihomomorphismus**. Entsprechend kann man "anti"-Varianten aller weiter unten angegebenen Morphismen definieren; von einer gewissen Bedeutung in der Quantenmechanik sind die **antiunitären** Abbildungen.

Endomorphismus Ein Homomorphismus $V \longrightarrow V$.

Isomorphismus Ein bijektiver Homomorphismus. Die Räume V und W heißen **isomorph**, wenn zwischen ihnen ein Isomorphismus existiert.

Automorphismus Ein isomorpher Endomorphismus.

Normisomorphismus Ein normerhaltender Isomorphismus $f : V \longrightarrow W$ zwischen zwei normierten Räumen V und W, d. h.

$$\underset{\phi \in V}{\forall} \; \|f(\phi)\| = \|\phi\| \,. \tag{27}$$

Die Räume V und W heißen **normisomorph**, wenn zwischen ihnen ein Normisomorphismus existiert.

Isometrie Ein Homomorphismus $f : V \longrightarrow W$ zwischen zwei Räumen V und W mit Skalarprodukt, der das Skalarprodukt erhält, d. h.

$$\underset{\phi,\psi \in V}{\forall} \; \langle\, f(\phi) \,|\, f(\psi) \,\rangle = \langle\, \phi \,|\, \psi \,\rangle \,. \tag{28}$$

Unitäre Abbildung Ein isometrischer Isomorphismus.
Normisomorphismen zwischen unitären Räumen sind stets auch isometrisch, und somit sogar unitär. Umgekehrt sind alle unitären Abbildungen zwischen unitären Räumen auch Normisomorphismen.

Formen Eine Abbildung $f : V \longrightarrow \mathbb{C}$ heißt **Form**. Auf Funktionenräumem heißen Formen auch **Funktionale**. Von besonderer Bedeutung sind lineare Formen, also Homomorphismen von V nach $\mathbb{C}$.

1.3.2 Stetigkeit und Beschränktheit

Der Homomorphismus $f : V \longrightarrow W$ zwischen normierten Räumen V und W heißt beschränkt, wenn gilt:

$$\sup_{\|\psi\|=1} \|f(\psi)\| < \infty \,. \tag{29}$$

Stetigkeit kann für Homomorphismen zwischen normierten Räumen in der für alle Abbildungen zwischen metrischen Räumen üblichen Weise definiert werden: die Abbildung $f : V \longrightarrow W$ zwischen metrischen Räumen V und W heißt

- stetig, wenn gilt

$$\underset{\psi \in V}{\forall} \; \underset{\epsilon>0}{\forall} \; \underset{\delta>0}{\exists} \; \underset{\phi \in V}{\forall} \quad d(\psi,\phi) < \delta \Longrightarrow d(f(\psi), f(\phi)) < \epsilon \,, \tag{30}$$

- gleichmäßig stetig, wenn gilt

$$\underset{\epsilon>0}{\forall} \; \underset{\delta>0}{\exists} \; \underset{\psi \in V}{\forall} \; \underset{\phi \in V}{\forall} \quad d(\psi,\phi) < \delta \Longrightarrow d(f(\psi), f(\phi)) < \epsilon \,, \tag{31}$$

wobei im Falle normierter Räume V und W die von der Norm gelieferte Metrik $d(\phi,\psi) = \|\phi - \psi\|$ zu verwenden ist.
Es gilt: ein Homomorphismus ist genau dann stetig, wenn er beschränkt ist. Stetige Homomorphismen sind stets sogar gleichmäßig stetig.

1.4 Basis eines Vektorraums

Dichte Teilmenge Eine Menge M liegt dicht in einem normierten Raum V, wenn es für jedes $\psi \in V$ und $\epsilon > 0$ ein $\varphi \in M$ gibt mit

$$\|\psi - \varphi\| < \epsilon \tag{32}$$

Separabler Raum Ein Vektorraum ist separabel, wenn es in ihm eine abzählbare, dichte Teilmenge gibt.

Basis und Dimension Jeder Vektorraum hat eine Basis. Das ist eine Menge von linear unabhängigen Elementen, deren lineare Hülle den Raum ergibt. Die Mächtigkeit der Basis ist eindeutig und heißt **Dimension** des Vektorraums. Isomorphe Vektorräume haben gleiche Dimension.
Ist der Vektorraum *separabel*, so gibt es eine abzählbare Basis $B = \{\varphi_n\}$, d. h. für jeden Vektor $\psi \in V$ gibt es eine eindeutige Zerlegung:

$$\psi = \sum_n c_n \varphi_n \quad . \tag{33}$$

Ist B eine **Orthonormalbasis**, d. h.

$$\langle \varphi_n | \varphi_m \rangle = \delta_{nm} \quad , \tag{34}$$

so gilt

$$c_n = \langle \varphi_n | \psi \rangle \quad . \tag{35}$$

und damit

$$\|\psi\|^2 = \sum_n |c_n|^2 \quad . \tag{36}$$

Die so bestimmten c_n heißen auch **Fourierkoeffizienten** von ψ bezüglich der Basis B.
Eine abzählbare Basis auf einem Raum mit Skalarprodukt kann stets orthomormiert werden (siehe **Gram-Schmidt'sches Orthonormierungsverfahren**).

1.5 Beispiele

1.5.1 Der ℓ^2

Der $\ell^2(N)$ Der Vektorraum $\mathbb{C}^N$ zusammen mit seinem Standardskalarprodukt

$$\langle\, (c_n) \,|\, (d_n) \,\rangle = \sum_{n=1}^{N} c_n^* d_n \tag{37}$$

heißt $\ell^2(N)$ und ist ein N-dimensionaler Hilbertraum.
Alle N-dimensionalen Hilberträume sind isomorph (sogar normisomorph) zum $\ell^2(N)$; insbesondere sind alle endlich-dimensionalen Hilberträume der Quantenmechanik von diesem Typ.

Der $\boldsymbol{\ell}^2(\infty)$ Der Raum

$$\ell^2(\infty) := \{ (c_n) \in \mathbb{C}^\infty \mid \sum_{n=1}^{\infty} |c_n|^2 < \infty \} \tag{38}$$

ist zusammen mit dem Skalarprodukt

$$\langle (c_n) \mid (d_n) \rangle = \sum_{n=1}^{\infty} c_n^* d_n \tag{39}$$

ein ∞-dimensionaler separabler Hilbertraum.

Alle ∞-dimensionalen separablen Hilberträume sind normisomorph zum $\ell^2(\infty)$. Alle "vernünftigen" ∞-dimensionalen Hilberträume der Quantenmechanik sind separabel, und damit stets normisomorph zum $\ell^2(\infty)$.

1.5.2 Der $\mathcal{L}^2$

Für eine geeignete Teilmenge $I \subseteq \mathbb{R}^n$, über der (eigentliche oder uneigentliche) Lebesgue-Integrale erklärt sind, definieren wir

$$\tilde{\mathcal{L}}^2(I) := \{ \phi : I \longrightarrow \mathbb{C} \mid \int_I d^n x \, |\phi(x)|^2 < \infty \} . \tag{40}$$

Die Abbildung $\langle \cdot | \cdot \rangle : \tilde{\mathcal{L}}^2(I) \times \tilde{\mathcal{L}}^2(I) \to \mathbb{C}$, $(\phi, \psi) \mapsto \langle \phi \mid \psi \rangle = \int_I dx^n \, \phi^*(x)\psi(x)$ ist dann wohldefiniert (der Beweis ist nicht ganz offensichtlich) und "fast" ein Skalarprodukt, bis auf einen Makel: sie ist nämlich nicht positiv-definit. So ist zum Beispiel die Funktion

$$f \in \tilde{\mathcal{L}}^2(\mathbb{R}) , \quad f(x) := \begin{cases} 1 & \text{, für } x = 17 \\ 0 & \text{, sonst} \end{cases} \tag{41}$$

sicher verschieden von der 0-Funktion, obwohl $\langle f \mid f \rangle = 0$.

Wir definieren daher die Menge

$$\mathcal{N}(I) := \{ \phi \in \tilde{\mathcal{L}}^2(I) \mid \langle \phi \mid \phi \rangle = 0 \} \tag{42}$$

und schließlich den Raum

$$\mathcal{L}^2(I) := \tilde{\mathcal{L}}^2(I) / \mathcal{N}(I) . \tag{43}$$

Die Abbildung $(\phi, \psi) \longmapsto \langle \phi \mid \psi \rangle = \int_I d^n x \, \phi^*(x)\psi(x)$ ist wohldefiniert auf dem Quotientenraum, also unabhängig von der Wahl des Repräsentanten, und ist dort ein Skalarprodukt. Zusammen mit diesem Skalarprodukt ist der $\mathcal{L}^2(I)$ ein separabler Hilbertraum.

Der Schwarzraum $\mathcal{S}(\mathbb{R})$

$$\mathcal{S}(\mathbb{R}) := \{ \phi \in C^\infty(\mathbb{R}) \mid \underset{n,m \in \mathbb{N}_0}{\forall} \int_{\mathbb{R}} dx \, |x^n \phi^{(m)}| < \infty \} . \tag{44}$$

Wichtige Eigenschaften:

- Der Schwarzraum ist *nicht* vollständig bezüglich der $\mathcal{L}^2$-Norm, taugt also leider nicht zum Hilbertraum.
- $\mathcal{S}(\mathbb{R})$ ist dicht in $\mathcal{L}^2(\mathbb{R})$, d. h., $\mathcal{L}^2(\mathbb{R})$ ist gerade der Abschluss des Schwarzraumes $\mathcal{S}(\mathbb{R})$.
- Man kann eine abzählbare Basis von $\mathcal{L}^2(\mathbb{R})$ aus lauter Schwarz-Funktionen finden, etwa die **Hermite-Funktionen**.

Allgemeiner kann man die Schwarzräume $\mathcal{S}(\mathbb{R}^n)$ definieren, die jeweils dicht in $\mathcal{L}^2(\mathbb{R}^n)$ sind.

2 Der Dualraum

2.1 Definition

Für einen beliebigen normierten Raum V definieren wir den **(topologischen) Dualraum** $V^\dagger$ als den Raum der beschränkten Linearformen auf V. Dieser Raum ist ebenfalls wieder ein Vektorraum, und mit der Norm

$$\|f\| := \sup_{\|\psi\|=1} |f(\psi)| \tag{45}$$

ebenfalls normiert.

Im Gegensatz zum topologischen Dualraum (der im Folgenden stets gemeint ist, sofern nicht explizit anders angegeben) definiert man den **algebraischen Dualraum** als den Raum aller, auch der nicht beschränkten, Linearformen. Diese Unterscheidung ist allerdings häufig redundant, denn es gilt: auf separablen Hilberträumen sind alle Linearformen beschränkt[1].

2.2 Der Dirac-Formalismus

2.2.1 Lineare Formen und Skalarprodukt

Für ein beliebiges Element ϕ eines Hilbertraums $\mathcal{H}$ ist die Abbildung

$$f_\phi : \mathcal{H} \longrightarrow \mathbb{C}\,, \quad \psi \mapsto f_\phi(\psi) = \langle\, \phi \,|\, \psi \,\rangle \tag{46}$$

eine Linearform. Aus der Cauchy-Schwarz-Ungleichung folgt sofort, dass f_ϕ beschränkt ist und somit im Dualraum $\mathcal{H}^\dagger$ liegt. Man kann also jedem Element ϕ eines Hilbertraums in ganz kanonischer Weise eine duale lineare Form f_ϕ zuordnen, wobei die Zuordnung $\phi \longrightarrow f_\phi$ antilinear und normerhaltend ist. Die Umkehrung gilt ebenfalls in allen für die Quantenmechanik relevanten Fällen:

Darstellungssatz von Frechet-Riesz Zu jeder beschränkten Linearform f eines Hilbertraums $\mathcal{H}$ existiert genau ein Element $\phi \in \mathcal{H}$ mit

$$\underset{\psi\in\mathcal{H}}{\forall}\; f(\psi) \;=\; \langle\, \phi \,|\, \psi \,\rangle\,. \tag{47}$$

Ein Hilbertraum ist somit zu seinem Dualraum normisomorph.

[1] Dies gilt natürlich nur für Linearformen, die tatsächlich auf dem gesamten Raum definiert sind; so sind etwa die δ-Funktionale nur auf einem Teilraum des $\mathcal{L}^2(\mathbb{R})$ definiert, und brauchen daher auch nicht beschränkt sein (und sind es auch nicht).

2.2.2 Die Dirac-Notation

Die Möglichkeit, lineare Formen auf Hilberträumen durch Skalarprodukte darzustellen, legt die Einführung der folgenden Konvention nahe: wir schreiben ab sofort alle Vektoren ψ eines Hilbertraums als **Kets**, also als $|\psi\rangle$. Die dem Vektor $|\psi\rangle$ zugeordnete duale Linearform schreiben wir als **Bra**, also als $\langle\psi|$. Für beliebige $|\psi\rangle, |\phi\rangle \in \mathcal{H}$ gilt dann:

$$\langle\psi||\phi\rangle \equiv \langle\psi\,|\,\phi\rangle\,. \tag{48}$$

Wir benutzen das Symbol † ("dagger") für die kanonische eineindeutige Abbildung zwischen $\mathcal{H}$ und $\mathcal{H}^\dagger$:

$$|\psi\rangle^\dagger = \langle\psi|\,, \quad \langle\psi|^\dagger = |\psi\rangle\,. \tag{49}$$

Die Abbildung † ist *antiunitär*.

3 Der Operator in der Quantenmechanik

3.1 Definitionsbereich

Operatoren der Quantenmechanik sind in der Regel Homomorphismen $\hat{A} : D_A \longrightarrow \mathcal{H}$, wo $\mathcal{H}$ der Hilbertraum des betrachteten Systems und der Definitionsbereich $D_A \subseteq \mathcal{H}$ ein dichter Unterraum von $\mathcal{H}$ ist. Obwohl man sich natürlich wünschen würde, Operatoren auf ganz $\mathcal{H}$ anwenden zu können, ist dies für viele praktisch interessante Operatoren leider nicht möglich; damit der Operatorbegriff sinnvoll bleibt, sollte allerdings wenigstens die Dichtheit von D_A in $\mathcal{H}$ gewährleistet sein.

Beispiel: Im Fall $\mathcal{H} = \mathcal{L}^2(\mathbb{R})$ lassen sich viele wichtige Operatoren ausdrücken als Polynome von x (der Operator, der die Funktion $\psi(x)$ mit x multipliziert) und $\frac{\partial}{\partial x}$, sie sind damit mindestens auf dem Schwarzraum $\mathcal{S}(\mathbb{R})$, und damit insbesondere auch auf einer abzählbaren Basis von $\mathcal{H}$, wohldefiniert.

Ein wichtiges Beispiel ist der Impulsoperator $\hat{p} : \psi \mapsto -i\hbar\psi'$: Funktionen im Definitionsbereich müssen nicht nur differenzierbar sein, sondern ihre Ableitung muss außerdem quadratintegrabel sein. Maximaler Definitionsbereich von $\hat{p}$ ist daher:

$$D_p = \{\,\phi \in \mathcal{L}^2(\mathbb{R}) \mid \phi \text{ differenzierbar und } \phi' \in \mathcal{L}^2(\mathbb{R})\,\}\,. \tag{50}$$

Etwas salopp schreiben wir das auch als

$$D_p = \{\,\phi \in \mathcal{L}^2(\mathbb{R}) \mid \int dx \left|\frac{\partial\phi(x)}{\partial x}\right|^2 < \infty\,\}\,, \tag{51}$$

wobei die Existenz der Ableitung und des Integrals implizit gefordert wird.

Im Folgenden sei $\hat{A} : D_A \longrightarrow \mathcal{H}$ ein linearer Operator mit Definitionsbereich $D_A \subseteq \mathcal{H}$; der Definitionsbereich D_A sei ein dichter Unterraum von $\mathcal{H}$, und $\mathcal{H}$ sei separabel.

3.2 Inverser Operator

Bild und Rang eines Operators Für einen Operator $\hat{A} : D_A \longrightarrow \mathcal{H}$ nennen wir die Menge $R(\hat{A}) := \{\hat{A}|\psi\rangle \mid |\psi\rangle \in D_A\}$ das **Bild** des Operators $\hat{A}$. Sofern D_A ein Vektorraum ist, ist auch $R(\hat{A})$ ein Vektorraum. Im angelsächsischen Sprachraum heißt das Bild **range**, was man nicht mit dem deutschen **Rang** des Operators verwechseln darf: der **Rang** von $\hat{A}$ ist die Dimension $\dim R(\hat{A})$ des Bildes.

Inverser Operator Ist $\hat{A}$ injektiv, so existiert eine Umkehrung

$$\hat{A}^{-1} : R(\hat{A}) \longrightarrow D_A \tag{52}$$

mit

$$\hat{A}^{-1}\hat{A} = \mathbb{1}_{D_A} . \tag{53}$$

Für alle $|\phi\rangle \in R(\hat{A})$, $|\phi\rangle = \hat{A}|\psi\rangle$, gilt

$$\hat{A}\hat{A}^{-1}|\phi\rangle = \hat{A}\hat{A}^{-1}\hat{A}|\psi\rangle = \hat{A}|\psi\rangle = |\phi\rangle , \tag{54}$$

somit gilt auch

$$\hat{A}\hat{A}^{-1} = \mathbb{1}_{R(\hat{A})} . \tag{55}$$

Der Operator $\hat{A}^{-1}$ ist stets ein Isomorphismus, und falls $\hat{A}$ isometrisch ist, so ist es auch $\hat{A}^{-1}$. Insbesondere gilt: unitäre Operatoren sind stets umkehrbar, und ihre Umkehrung ist wieder unitär.

3.3 Symmetrische Operatoren

Der Operator $\hat{A}$ heißt **symmetrisch**, wenn gilt

$$\underset{|\phi\rangle,|\psi\rangle\in D_A}{\forall} \langle\phi|\hat{A}|\psi\rangle = \langle\psi|\hat{A}|\phi\rangle^* . \tag{56}$$

3.4 Adjungierter Operator

3.4.1 Definition

Bisher haben wir den Operator $\hat{A}$ aufgefasst als etwas, das "nach rechts" wirkt, also auf einen Vektor:

$$\hat{A} : |\psi\rangle \longmapsto \hat{A}|\psi\rangle . \tag{57}$$

Für die Wahl des Definitionsbereichs $D_A \subseteq \mathcal{H}$ ist es dabei entscheidend, dass die Wirkung von $\hat{A}$ sinnvoll erklärt ist und das Ergebnis wiederum in $\mathcal{H}$ liegt.

In einem Hilbertraum existiert zu jedem Element $|\phi\rangle$ eine dazu duale Linearform $\langle\phi|$, deren Wirkung erklärt ist durch Bildung des Skalarprodukts:

$$\langle\phi| : \mathcal{H} \longrightarrow \mathbb{C} , \quad |\psi\rangle \longmapsto \langle\phi|\psi\rangle . \tag{58}$$

Man kann daher auch die Wirkung des Operators $\hat{A}$ "nach links", also auf lineare Formen, untersuchen:

$$\hat{A} : \langle\phi| \longmapsto \langle\phi|\hat{A} \equiv \langle\phi| \circ \hat{A} . \tag{59}$$

Es ist leicht einzusehen, dass $\langle\phi|\hat{A}$ für beliebige $\langle\phi| \in \mathcal{H}^\dagger$ eine wohldefinierte Linearform *auf* D_A ist. Weniger offensichtlich ist, für welche $\langle\phi|$ die Linearform $\langle\phi|\hat{A}$ mit einem auf D_A eingeschränkten Element $\langle\chi| \in \mathcal{H}^\dagger$ identifiziert werden kann, und falls ja, ob diese Zuordnung eindeutig ist. Unter den obigen Voraussetzungen,

- $\mathcal{H}$ ist separabel, und
- D_A ist ein Vektorraum und liegt dicht in $\mathcal{H}$,

lässt sich diese Frage eindeutig beantworten:

- Alle Linearformen $\langle\chi|$ sind beschränkt auf $\mathcal{H}$, und damit erst recht beschränkt auf D_A. Ist die Linearform $\langle\phi|\hat{A}$ auf D_A nicht beschränkt, so kann es kein $\langle\chi| \in \mathcal{H}^\dagger$ geben mit $\langle\chi| \restriction D_A = \langle\phi|\hat{A}$.
- Ist $\langle\phi|\hat{A}$ auf D_A beschränkt und somit stetig, so können wir $\langle\phi|\hat{A}$ in naheliegender und eindeutiger Weise zu einer stetigen Linearform $\overline{\langle\phi|\hat{A}}$ auf ganz $\mathcal{H}$ fortsetzen: Für jedes $|\psi\rangle \in \mathcal{H}$ existiert eine Folge $(|\psi_n\rangle)$ mit $|\psi_n\rangle \in D_A$ und $|\psi_n\rangle \stackrel{n\to\infty}{\longrightarrow} |\psi\rangle$. Wir definieren dann:
$$\overline{\langle\phi|\hat{A}}\,|\psi\rangle := \lim_{n\to\infty} \langle\phi|\hat{A}|\psi_n\rangle\,. \tag{60}$$
Offenbar liegt $\overline{\langle\phi|\hat{A}}$ in $\mathcal{H}^\dagger$ und nach dem Satz von Frechet-Riesz kann es mit einem Bra $\langle\chi|$ aus $\mathcal{H}^\dagger$ identifiziert werden.

Wir definieren nun den adjungierten Operator $\hat{A}^\dagger$ mit dem Definitionsbereich

$$D_{A^\dagger} := \Big\{ |\phi\rangle \in \mathcal{H} \;|\; \langle\phi|\hat{A} \text{ ist beschränkt auf } D_A \Big\} \tag{61}$$

und der Wirkung

$$\hat{A}^\dagger : |\phi\rangle \mapsto \hat{A}^\dagger|\phi\rangle \;\text{ mit }\; \Big(\hat{A}^\dagger|\phi\rangle\Big)^\dagger \restriction D_A = \langle\phi|\hat{A}\,. \tag{62}$$

Die Dichtheit von D_A in $\mathcal{H}$ garantiert dabei die Eindeutigkeit dieser Definition.
Für Operatoren, die auf dem gesamten Hilbertraum definiert sind, also mit $D_A = \mathcal{H}$, ist $\langle\phi|\hat{A}$ für beliebiges $\langle\phi|$ bereits eine wohldefinierte Linearform auf ganz $\mathcal{H}$ und somit beschränkt; es gilt daher auch $D_{A^\dagger} = \mathcal{H}$.
Kennen wir eine abzählbare orthonormierte Basis $\{|n\rangle\}$ von $\mathcal{H}$ mit $|n\rangle \in D_A$, so können wir den Definitionsbereich alternativ definieren: es ist

$$\langle\phi|\hat{A} = \langle\phi|\hat{A}\,\mathbb{1}_{D_A} = \sum_n \langle\phi|\hat{A}|n\rangle\langle n| \restriction D_A \tag{63}$$

für beliebiges $|\phi\rangle \in \mathcal{H}$ eine wohldefinierte Linearform auf D_A. Ohne die Einschränkung auf D_A ist

$$\sum_n \langle\phi|\hat{A}|n\rangle\langle n| \tag{64}$$

eine wohldefinierte Linearform auf ganz $\mathcal{H}$, also ein Bra, genau dann, wenn

$$\sum_n |\langle\phi|\hat{A}|n\rangle|^2 < \infty\,. \tag{65}$$

Folglich gilt:

$$D_{A^\dagger} := \{\, |\phi\rangle \in \mathcal{H} \mid \sum_n |\langle\phi|\hat{A}|n\rangle|^2 < \infty \,\} . \quad (66)$$

Auch die Wirkung von $\hat{A}^\dagger$ können wir mit Hilfe der Basis $\{|n\rangle\}$ angeben:

$$\begin{aligned} \hat{A}^\dagger|\phi\rangle &= \sum_n |n\rangle\langle n|\hat{A}^\dagger|\phi\rangle \\ &= \sum_n \Big((\hat{A}^\dagger|\phi\rangle)^\dagger|n\rangle\Big)^* |n\rangle \\ &= \sum_n \langle\phi|\hat{A}|n\rangle^*|n\rangle . \end{aligned} \quad (67)$$

3.4.2 Eigenschaften

Satz: Für beschränkte oder symmetrische Operatoren $\hat{A}$ gilt stets:

$$D_{A^\dagger} \supseteq D_A . \quad (68)$$

Beweis: Annahme: Es gibt ein $|\phi\rangle \in D_A$ mit $|\phi\rangle \notin D_{A^\dagger}$.
Dann ist $\langle\phi|\hat{A}$ unbeschränkt auf D_A, und es gibt eine Folge $(|\phi_n\rangle)$ mit $|\phi_n\rangle \in D_A$, sodass $\|\,|\phi_n\rangle\| = 1$ und $\langle\phi|\hat{A}|\phi_n\rangle \overset{n\to\infty}{\longrightarrow} \infty$.
Aus der Cauchy-Schwarz'schen Ungleichung folgt, dass bereits $\|\hat{A}|\phi_n\rangle\| \overset{n\to\infty}{\longrightarrow} \infty$, somit ist $\hat{A}$ nicht beschränkt.
Ebenso folgt, dass

$$|\langle\phi_n|\hat{A}|\phi\rangle| \le \|\,|\phi_n\rangle\| \cdot \|\hat{A}|\phi\rangle\| \;=\; \|\hat{A}|\phi\rangle\| = \text{const} . \quad (69)$$

Für hinreichend große n muss daher $\langle\phi_n|\hat{A}|\phi\rangle \neq \langle\phi|\hat{A}|\phi_n\rangle^*$ gelten, somit ist $\hat{A}$ auch nicht symmetrisch.

(q.e.d.)

Umgekehrt ist leicht einzusehen: ist $D_{A^\dagger} \supseteq D_A$ und $\hat{A}^\dagger \restriction D_A = \hat{A}$, so ist $\hat{A}$ symmetrisch.

Selbstadjungierter Operator Ist $\hat{A} = \hat{A}^\dagger$, also insbesondere $D_{A^\dagger} = D_A$, so heißt $\hat{A}$ **selbstadjungiert**. Selbstadjungierte Operatoren sind insbesondere stets symmetrisch.

Hermitezität Ein beschränkter selbstadjungierter Operator heißt **hermitesch**.

Matrixelemente Für $|\phi\rangle \in D_{A^\dagger}$ und $|\psi\rangle \in D_A$ gilt:

$$\langle\psi|\hat{A}^\dagger|\phi\rangle \;=\; \langle\phi|\hat{A}|\psi\rangle^* . \quad (70)$$

Für die Matritzen gilt dann:

$$A^\dagger = A^{*T} . \quad (71)$$

3.4.3 Unitäre Operatoren

Für unitäre Operatoren $\hat{U}$ mit $D_U = \mathcal{H}$ ist auch $D_{U^\dagger} = \mathcal{H}$. Ferner gilt für alle $|\phi\rangle, |\psi\rangle \in \mathcal{H}$:

$$\left(\hat{U}^\dagger \hat{U}|\phi\rangle\right)^\dagger |\psi\rangle \overset{\text{def. } \hat{U}^\dagger}{=} \left(\hat{U}|\phi\rangle\right)^\dagger \hat{U}|\psi\rangle \overset{\text{isometrisch}}{=} (|\phi\rangle)^\dagger |\psi\rangle \,, \tag{72}$$

und somit

$$\hat{U}^\dagger \hat{U} = \mathbb{1} \,, \tag{73}$$

also

$$\hat{U}^\dagger = \hat{U}^{-1} \,, \tag{74}$$

und damit auch

$$\hat{U}\hat{U}^\dagger = \mathbb{1} \,. \tag{75}$$

Die Umkehrung gilt ebenfalls und ergibt einen Test auf Unitarität: Sei $\hat{A} : \mathcal{H} \longrightarrow \mathcal{H}$ ein Operator mit $\hat{A}\hat{A}^\dagger = \mathbb{1}$. Dann gilt für alle $|\phi\rangle, |\psi\rangle \in \mathcal{H}$:

$$(\hat{A}^\dagger|\phi\rangle)^\dagger \hat{A}|\psi\rangle = \langle\phi|\hat{A}\hat{A}^\dagger|\psi\rangle = \langle\,\phi\,|\,\psi\,\rangle \,. \tag{76}$$

$\hat{A}^\dagger$ ist also isometrisch und damit insbesondere injektiv, da normerhaltend. $\hat{A}^\dagger \hat{A} = \mathbb{1}$. Gilt zusätzlich $\hat{A}^\dagger \hat{A} = \mathbb{1}$, so ist $\hat{A}^\dagger$ auch surjektiv, also ein isometrischer Isomorphismus, also unitär; $\hat{A}$ muss dann ebenfalls unitär sein.
Es ist hier wichtig, tatsächlich beide Voraussetzungen, $\hat{A}^\dagger \hat{A} = \mathbb{1}$ und $\hat{A}\hat{A}^\dagger = \mathbb{1}$, zu prüfen, wie das folgende kanonische Gegenbeispiel zeigt:

Hilbert's Hotel Sei $\mathcal{H}$ ein separabler Hilbertraum mit orthonormierter Basis $\{|n\rangle\}$. Sei $\hat{A} : \mathcal{H} \longrightarrow \mathcal{H}$ der Operator mit der Wirkung

$$\hat{A}|n\rangle = |n+1\rangle \,. \tag{77}$$

Dann ist leicht zu zeigen, dass

$$\hat{A}^\dagger|n\rangle = \begin{cases} 0 & \text{, für } n = 1, \\ |n-1\rangle & \text{, sonst.} \end{cases} \tag{78}$$

Offenbar ist $\hat{A}^\dagger \hat{A} = \mathbb{1}$, aber $\hat{A}$ ist keineswegs unitär.
Die hier definierte Abbildung ergibt sich übrigens als Lösung des Problems: "Was tut man in einem Hotel mit abzählbar vielen Zimmern, wenn alle Zimmer belegt sind und ein weiterer Gast eintrifft?"

4 Endlichdimensionale Quantensysteme

Der Hilbertraum von physikalisch relevanten Quantensystemen ist keinesfalls stets unendlichdimensional. Der Spin eines Elektrons ist etwa assoziiert mit einem nur zweidimensionalen Hilbertraum, $\mathcal{H} = \mathbb{C}^2$. Aus funktionalanalytischer Sicht sind solche Systeme weitaus einfacher zu beschreiben als etwa Systeme mit $\mathcal{H} = \mathcal{L}^2(\mathbb{R})$.

4.1 Basen und Repräsentationen von Zuständen und Observablen

Sei eine Orthonormalbasis eines d-dimensionalen Hilbertraumes $\mathcal{H}$, $d \in \mathbb{N}$, mit

$$\{|1\rangle, ..., |d\rangle\}, \tag{79}$$

bezeichnet, wobei

$$\langle n|m\rangle = \delta_{nm}, \qquad n, m = 1, ..., d. \tag{80}$$

Ein $|\psi\rangle \in \mathcal{H}$ ist durch seine Komponenten bezüglich einer Basis bestimmt, d.h. durch die Zahlen $c_n = \langle n|\psi\rangle$, $n = 1, ..., d$. Diese Zahlen können in einer Repäsentation bezüglich dieser Basis in einem Spaltenvektor angeordnet werden,

$$\begin{pmatrix} \langle 1|\psi\rangle \\ . \\ . \\ . \\ \langle d|\psi\rangle \end{pmatrix}; \tag{81}$$

ebenso kann $\langle\psi|$ als Zeilenvektor $\left(\langle\psi|1\rangle \; ... \; \langle\psi|d\rangle \right)$ repräsentiert werden. Die Matrixrepräsentation eines linearen Operators $\hat{A} : \mathcal{H} \to \mathcal{H}$ ist gegeben durch

$$\begin{pmatrix} a_{11} & ... & a_{1d} \\ \vdots & & \vdots \\ a_{d1} & ... & a_{dd} \end{pmatrix}, \tag{82}$$

wobei $a_{nm} = \langle n|\hat{A}|m\rangle$, $n, m = 1, ...d$.
Um etwa die Komponenten $c'_1, ..., c'_d$ eines Hilbertraumelements $|\phi\rangle = \hat{A}|\psi\rangle$ in der dieser Repräsentation zu bestimmen, ist lediglich eine Multiplikation einer Matrix mit einem Vektor durchzuführen,

$$c'_n = \langle n|\hat{A}|\psi\rangle = \sum_m a_{nm} c_m, \quad n = 1, ..., d. \tag{83}$$

Die Spur von $\hat{A}$ läßt ergibt sich zu $\mathrm{tr}[\hat{A}] = \sum_{n=1}^{d} a_{nn}$, und die Matrixrepräsentation des adjungierten Operators $\hat{A}^\dagger$ ist gegeben durch

$$\begin{pmatrix} a'_{11} & ... & a'_{1d} \\ \vdots & & \vdots \\ a'_{d1} & ... & a'_{dd} \end{pmatrix}, \tag{84}$$

mit $a'_{nm} = a^*_{mn}$, $n, m = 1, ...d$.

4.2 Zusammengesetzte Quantensysteme

Oft bestehen Quantensysteme aus mehreren Teilen, die ihrerseits mit quantenmechanischen Methoden zu beschreiben sind. Die meisten Systeme haben außerdem mehrere Freiheitsgrade (etwa Ort eines Elektrons und dessen Spin). So stellt sich das Problem, wie sich ein zusammengesetztes Quantensystem beschreiben lässt. Hier soll nur der endlichdimensionale Fall beschrieben werden.

4.2.1 Tensorprodukt

Seien S_1 und S_2 zwei Quantensysteme mit zugehörigen Hilberträumen $\mathcal{H}_1$ und $\mathcal{H}_2$. Der Hilbertraum $\mathcal{H}$ des aus S_1 und S_2 zusammengesetzten Systems S ist nun gegeben durch

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2. \tag{85}$$

$\mathcal{H}$ ist der Hilbertraum, der von

$$|\psi_1\rangle \otimes |\psi_2\rangle \tag{86}$$

aufgespannt wird, wobei $|\psi_1\rangle \in \mathcal{H}_1$ und $|\psi_2\rangle \in \mathcal{H}_2$. Das Symbol $\otimes$ bezeichnet das Tensorprodukt von Hilbertraumelementen und hat die folgenden Eigenschaften.

- (Multiplikation mit komplexen Zahlen)

$$(\lambda|\psi_1\rangle) \otimes |\psi_2\rangle = \lambda\left(|\psi_1\rangle \otimes |\psi_2\rangle\right), \tag{87}$$
$$|\psi_1\rangle \otimes (\mu|\psi_2\rangle) = \mu\left(|\psi_1\rangle \otimes |\psi_2\rangle\right), \tag{88}$$

- (Vektoraddition)

$$|\psi_1\rangle \otimes (|\psi_2\rangle + |\chi_2\rangle) = |\psi_1\rangle \otimes |\psi_2\rangle + |\psi_1\rangle \otimes |\chi_2\rangle, \tag{89}$$
$$(|\psi_1\rangle + |\chi_1\rangle) \otimes |\psi_2\rangle = |\psi_1\rangle \otimes |\psi_2\rangle + |\chi_1\rangle \otimes |\psi_2\rangle, \tag{90}$$

  ($|\psi_1\rangle, |\chi_1\rangle \in \mathcal{H}_1$, $|\psi_2\rangle, |\chi_2\rangle \in \mathcal{H}_2$, $\lambda, \mu \in \mathbb{C}$).

- Ist außerdem $\{|1\rangle, ..., |N\rangle\}$ eine Orthonormalbasis von $\mathcal{H}_1$, $N = \dim[\mathcal{H}_1]$, und $\{|1\rangle, ..., |M\rangle\}$, $M = \dim[\mathcal{H}_2]$, eine Orthonormalbasis von $\mathcal{H}_2$, so ist

$$\{|n\rangle \otimes |m\rangle | n = 1, ..., N; m = 1, ..., M\} \tag{91}$$

  eine Orthonormalbasis von $\mathcal{H} = \mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2$. Seine Dimension beträgt NM.

4.2.2 Vektoren aus dem Tensorproduktraum

Produktzustände Seien nun $|\psi_1\rangle \in \mathcal{H}_1$ und $|\psi_2\rangle \in \mathcal{H}_1$. Mit der obigen Basiswahl ist

$$|\psi_1\rangle = \sum_{n=1}^{N} a_n|n\rangle \quad \text{und} \quad |\psi_2\rangle = \sum_{m=1}^{M} b_m|m\rangle \tag{92}$$

mit passenden Zahlen $a_1, ..., a_N$, $b_1, ..., b_M$. Die Entwicklung von $|\psi_1\rangle \otimes |\psi_2\rangle$ in der $\{|n\rangle \otimes |m\rangle | n = 1, ..., N; m = 1, ..., M\}$-Basis lautet nun

$$|\psi_1\rangle \otimes |\psi_2\rangle = \sum_{n=1}^{N}\sum_{m=1}^{M} a_n b_m |n\rangle \otimes |m\rangle. \tag{93}$$

Solche Zustände heißen Produktzustände.

Verschränkte Zustände Interessant ist zu bemerken, daß nicht alle Zustände im Produktraum $\mathcal{H} = \mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2$ auch Produktzustände sind: Ein allgemeiner Zustand aus $\mathcal{H}$ ist ja durch

$$|\psi\rangle = \sum_{n=1}^{N} \sum_{m=1}^{M} c_{nm} |n\rangle \otimes |m\rangle. \tag{94}$$

gegeben, $c_{nm} \in \mathbb{C}$, $n = 1, ..., N$, $m = 1, ..., M$, also durch einen allgemeineren Ausdruck als Gl. (93).
Beispiele für Zustände, die keine Produkte sind, gibt es zuhauf. Seien etwa $\mathcal{H}_1 = \mathcal{H}_2 = \mathbb{C}^2$. Der Zustand

$$|\psi\rangle = (|1\rangle \otimes |1\rangle + |2\rangle \otimes |2\rangle) / \sqrt{2} \tag{95}$$

ist sicher ein Element von $\mathcal{H}$ und damit ein erlaubter Zustand des Gesamtsystems, aber er läßt sich nicht in der Form

$$|\psi\rangle = |\psi_1\rangle \otimes |\psi_2\rangle \tag{96}$$

schreiben mit $|\psi_1\rangle \in \mathcal{H}_1$ und $|\psi_2\rangle \in \mathcal{H}_1$. Man kann also den Teilsystemen S_1 und S_2 kein Hilbertraumelement als Zustand mehr zuordnen, obwohl das Gesamtsystem S in einem wohldefinierten Zustand ist. In solchen Zuständen manifestiert sich die Nichtlokalität der Quantenmechanik. Mißt man eine zu S_1 gehörende Eigenschaft (z.B. den Spin eines Elektrons an einem Ort) und ebenso eine mit S_2 assoziierte Eigenschaft S_1 gehörende Eigenschaft (etwa den Spin eines anderen Elektrons an einem anderen Ort), so wird man bei einem verschränkten Zustand Meßergebnisse erhalten, die in einer Weise korreliert sind, wie sie nicht mehr durch klassische Wahrscheinlichkeitsverteilungen beschreibbar ist. Einmal mehr zeigt sich hier, daß das Zustandskonzept der Quantenmechanik mehr enthält als klassische Wahrscheinlichkeitstheorie.

4.2.3 Das Skalarprodukt im Produktraum

Die Definition des Skalarproduktes in $\mathcal{H}_1$ und $\mathcal{H}_2$ erlaubt die Definition eines Skalarproduktes in $\mathcal{H} = \mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2$. Zunächst wird das Skalarprodukt für Produktzustände

$$|\psi_1\psi_2\rangle \equiv |\psi_1\rangle \otimes |\psi_2\rangle \tag{97}$$

$$|\chi_1\chi_2\rangle \equiv |\chi_1\rangle \otimes |\chi_2\rangle \tag{98}$$

erklärt durch

$$\langle\psi_1\psi_2|\chi_1\chi_2\rangle = \langle\psi_1|\chi_1\rangle\langle\psi_2|\chi_2\rangle, \tag{99}$$

$|\psi_1\rangle, |\chi_1\rangle \in \mathcal{H}_1$, $|\psi_2\rangle, |\chi_2\rangle \in \mathcal{H}_2$. Für beliebige $|\psi\rangle, |\chi\rangle \in \mathcal{H}$ ergibt sich die Definition aus den Eigenschaften Gl. (87)–(90).

5 Spektralzerlegungen

5.1 Gelfand-Tripel

Im endlichdimensionalen Hilbertraum ist alles schön einfach: Operatoren sind immer beschränkt, selbstadjungierte Operatoren sind immer hermitesch und haben immer Eigenvektoren. Im unendlichdimensionalen Hilbertraum weht ein rauherer Wind. Orts- und Impulsoperator (die einzig wirklich wichtigen Operatoren hier) haben keine Eigenvektoren und daher auch keinen einzigen Eigenwert: Die Eigenfunktionen des Impulsoperators, die ebenen Wellen e^{ipx}, sind

nicht quadratintegrabel, also keine $\mathcal{L}^2$-Funktionen; die Eigenfunktionen des Ortsoperators, die δ-Funktionen, sind nicht einmal echte Funktionen. Somit hat keiner der beiden Operatoren irgendwelche Eigenwerte, was natürlich eine Katastrophe ist. Der Trick besteht nun darin, den Hilbertraum um gewisse Elemente, die *Distributionen*, zu erweitern, in der Hoffnung, daß es nun Distributionen gibt, die Eigenvektoren zu $\hat{q}$ und $\hat{p}$ sind.
Man wählt einen **Testraum** $\Phi \subset \mathcal{H}$ mit folgenden Eigenschaften

1. Φ ist lokalkonvexer topologischer Vektorraum
2. Φ ist vollständig bezüglich seiner eigenen Topologie,
3. Φ ist dicht in $\mathcal{H}$,

Die Elemente von Φ nennt man **Testfunktionen**.
Nun bildet man den topologischen Dualraum $\Phi^\dagger$ von Φ, d.h. den Raum aller linear-beschränkten Funktionale auf Φ. Dies sind lineare Abbildungen $l_\chi : \Phi \to \mathbb{C}$ mit

$$\varphi_n \to \varphi \quad \Rightarrow \quad l_\chi(\varphi_n) \to l_\chi(\varphi). \tag{100}$$

Die Konvergenz in Φ wird dabei durch die Testraum-Topologie in Φ festgelegt. Die Elemente aus $\Phi^\dagger$ nennt man **Distributionen**. Für $\mathcal{H} = \mathcal{L}^2$ sind dies alle Objekte $\chi(x)$, so daß

$$\int dx\, \chi^*(x)\varphi(x) \tag{101}$$

für jede Testfunktion $\varphi(x)$ existiert. Der Testraum der Quantenmechanik ist der **Schwartz-raum** $\mathcal{S}$ der stark abfallenden Funktionen:

$$\mathcal{S} := \{f \in C^\infty | \sup_x |x^n \partial_x^m f(x)| < \infty \ \forall n, m\} \quad . \tag{102}$$

Dieser Testraum ist physikalisch besonders angenehm, dass hier Orts- und Impulsoperator überall definiert sind und nicht aus dem Raum herausführen:

$$D_{\hat{q}} = \mathcal{S}, \quad \hat{q}\,\mathcal{S} = \mathcal{S} \qquad D_{\hat{p}} = \mathcal{S}, \quad \hat{p}\,\mathcal{S} = \mathcal{S} \quad . \tag{103}$$

Die Elemente aus $\mathcal{S}^\dagger$ sind die *temperierten Distributionen*. Unter ihnen befinden sich nun auch Eigenvektoren des Orts- und Impulsoperators. Die δ-Distribution erhält Sinn, weil

$$\delta_x(\varphi) := \int dx'\, \delta(x - x')\varphi(x') = \varphi(x) \tag{104}$$

für jede Schwartz-funktion existiert. Ebenso sind ebene Wellen sinnvoll, weil

$$\tilde{\delta}_p(\varphi) := \int dx\, e^{-ipx}\varphi(x) = \tilde{\varphi}(p) \tag{105}$$

für jede Schwartz-Funktion existiert. Es ist nämlich der Wert der Fourier-Transformierten von φ an der Stelle p. Die beiden Ausdücke (104) und (105) ergeben nämlich nicht für jede $\mathcal{L}^2$-Funktion Sinn, weil diese auch unstetig sein darf und daher gerade an der Stelle x, bzw. an der Stelle p der Fourier-Transformierten, uneindeutig sein könnte. Schwartz-funktionen sind immer stetig und die Ausdrücke sind damit wohldefiniert.

Das Tripel
$$\Phi \subset \mathcal{H} \subset \Phi^\dagger \tag{106}$$
nennt man **Gelfand-Tripel**. Hier läßt sich der Bra-Ket-Formalismus auf Paare $\varphi \in \Phi$, $\chi \in \Phi^\dagger$ erweitern durch

$$\langle\chi|\varphi\rangle := l_\chi(\varphi) \tag{107}$$
$$\langle\varphi|\chi\rangle := l^*_\chi(\varphi) \quad . \tag{108}$$

Das Skalarprodukt im $\mathcal{L}^2$ macht die Identifikation der Distributionen l_χ mit *Integralkernen* $\chi(x)$ möglich:
$$l_\chi(\varphi) = \int dx\, \chi^*(x)\varphi(x) \quad . \tag{109}$$

Meistens bezeichnet man diese Kerne selbst als Distributionen und nicht das zugehörige Funktional. Während das Funktional aber immer wohldefiniert ist, müssen die Integralkerne nicht unbedingt wohldefinierte Funktionen sein. Die δ-Distribution ist ein solches Beispiel.

5.2 Spektrum und Spektralsatz

Die Zahl $a \in \mathbb{C}$ heißt **Spektralwert** eines Operators A, falls der Operator $(A-a) := (A-a\mathbb{1})$ nicht *bijektiv* auf $\mathcal{H}$ ist. Falls $(A-a)$ nicht *injektiv* ist, so nennt man a einen **Eigenwert** von A. Äquivalent dazu kann man definieren: Genau die Punkte $a \in \mathbb{C}$, für die die **Resolvente** von A,
$$R(z) := \frac{1}{z-A} \quad , \tag{110}$$
kein beschränkter und überall definierter Operator ist, bilden das Spektrum σ von A. Die Punkte, an denen die Resolvente gar nicht existiert, sind die Eigenwerte von A. Sie bilden das *diskrete Spektrum* σ_d. Die anderen Spektralwerte bilden das *kontinuierliche Spektrum* $\sigma_c = \sigma \setminus \sigma_d$. Die Norm eines Operators bildet eine obere Schranke für den Betrag der Spektralwerte:

$$|a| \leq \|A\| \quad . \tag{111}$$

Man kann also aus dem Spektrum ablesen, ob der Operator beschränkt ist oder nicht.
In der Quantenmechanik nennt man alle Spektralwerte grundsätzlich Eigenwerte und unterscheidet nur zwischen diskreten Eigenwerten (isolierte, endlichfache Eigenwerte) und kontinuierlichen Eigenwerten. Es gibt manchmal auch kranke (z.B. dichte oder singulär-kontinuierliche) Spektren, die aber in der Quantenmechanik selten eine Rolle spielen und daher hier vernachlässigt werden. Für die diskreten Eigenwerte $a_n \in \sigma_d$ gibt es Hilbertvektoren $|a_n\rangle$, die die **Eigenwertgleichung**
$$\hat{A}|a_n\rangle = a_n|a_n\rangle \tag{112}$$
erfüllen. Für die kontinuierlichen Eigenwerte $a \in \sigma_c$ gibt es Distributionen $|a\rangle$, die Eigenwertgleichung
$$\hat{A}|a\rangle = a|a\rangle \tag{113}$$

erfüllen.

Satz *Das Spektrum eines selbstadjungierten Operators ist rein rell.*

Dieser Satz erlaubt es, die Eigenwerte selbstadjungierter Operatoren mit Meßwerten zu identifizieren. Der selbstadjungierte Operator selbst repräsentiert die gemessene Größe und wird **Observable** genannt. Der Zustand des gemessenen Systems während der Messung wird mit einem Hilbert-Vektor identifiziert, der im Definitionsbereich des Operators liegt. Zugänglich sind im Prinzip nur **Erwartungswerte** eines Operators $\hat{A}$, gegeben durch

$$< \hat{A} >:= \langle\psi|\hat{A}|\psi\rangle \quad . \tag{114}$$

Spektralsatz Wenn $\hat{A}$ selbstadjungiert ist, ist seine Spektralzerlegung **orthonormal** in folgendem Sinne:

$$\langle a_n|a_m\rangle = \delta_{nm} \tag{115}$$

$$\langle a|a'\rangle = \delta(a-a') \tag{116}$$

und sie ist **vollständig** in folgendem Sinne:

$$\mathbb{1} = \sum_{a_n\in\sigma_d} |a_n\rangle\langle a_n| + \int_{\sigma_c} da\,|a\rangle\langle a| \quad . \tag{117}$$

Im folgenden seien alle Operatoren stets selbstadjungiert, sofern nicht ausdrücklich anders erwähnt.

Obige Relation stellt eine *Spektralzerlegung* der Eins dar. Um genau die rechte Seite, d.h. die Spektralzerlegung in der Eigenbasis des Operators A zu kennzeichnen, wollen wir den Ausdruck $\mathbb{1}_A$ benutzen. Im Sinne einer Operator-Identität gilt dann $\mathbb{1} = \mathbb{1}_A$.
Mit (112,113) und der obigen *Vollständigkeitsrelation* erhält man die Spektralzerlegung von $\hat{A}$, in der der Operator diagonal wird:

$$\hat{A} = \hat{A}\mathbb{1}_A = \sum_n a_n|a_n\rangle\langle a_n| + \int da\, a|a\rangle\langle a| \quad . \tag{118}$$

Jede Funktion des Operators läßt sich damit als Funktion der Spektralzerlegung definieren:

$$f(\hat{A}) := \sum_n f(a_n)|a_n\rangle\langle a_n| + \int da\, f(a)|a\rangle\langle a| \quad . \tag{119}$$

Unitäre Operatoren haben stets die Form

$$U = e^{i\hat{A}} \quad , \tag{120}$$

wobei $\hat{A}$ ein selbstadjungierter Operator ist.

5.3 Komponenten-darstellung von Kets

Mit der Vollständigkeitsrelation erhält man auch die Spektralzerlegung jedes Hilbertvektors $|\psi\rangle$:

$$|\psi\rangle = \mathbb{1}_A|\psi\rangle = \sum_n \psi_n|a_n\rangle + \int da\,\psi(a)|a\rangle \tag{121}$$

mit den **Komponenten**

$$\psi_n := \langle a_n|\psi\rangle \tag{122}$$
$$\psi(a) := \langle a|\psi\rangle \tag{123}$$

In der Eigenbasis von $\hat{A}$ könnte man also Hilbertvektoren auch als Tupel

$$|\psi\rangle \,\widehat{=} \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \\ \vdots \\ \psi(a) \end{pmatrix} \tag{124}$$

darstellen. Man sieht hier sehr gut, daß die Ket-Vektoren *basisunabhängig* sind, während Tupel und Funktionen stets *basisabhängig* sind.

5.4 Matrixdarstellung von Operatoren

Mit der Vollständigkeitsrelation erhält man auch die Spektralzerlegung jedes Operators $\hat{B}$:

$$B = \mathbb{1}_A B \mathbb{1}_A = \sum_{nm} B_{nm}|a_n\rangle\langle a_m| + \int da\, da'\, B(a,a')|a\rangle\langle a'| \tag{125}$$

mit den **Matrixelementen**

$$B_{nm} := \langle a_n|B|a_m\rangle \tag{126}$$
$$B(a,a') := \langle a|B|a'\rangle \quad . \tag{127}$$

Die Darstellung von B über die Matrixelemente nennt man dann **Matrixdarstellung** des Operators B. Auch sie ist natürlich basisabhängig.

5.5 Orts- und Impulsdarstellung

Der Ortsoperator $\hat{q}$ hat ein rein kontinuierliches Spektrum und daher die Spektralzerlegung

$$\hat{q} = \int dx\, x\, |x\rangle\langle x| \quad . \tag{128}$$

Die Spektralzerlegung eines Kets $|\psi\rangle$ in der Ortsbasis lautet dann

$$|\psi\rangle = \mathbb{1}_q|\psi\rangle = \int dx\, \psi(x)|x\rangle \quad , \tag{129}$$

mit den Ortskomponenten

$$\psi(x) = \langle x|\psi\rangle \quad . \tag{130}$$

Die Darstellung von $|\psi\rangle$ als Funktion $\psi(x) = \langle x|\psi\rangle$ nennt man die **Ortsdarstellung** von $|\psi\rangle$. Offenbar ist

$$\langle x|\hat{q}|\psi\rangle = x\langle x|\psi\rangle = x\psi(x) \quad , \tag{131}$$

d.h. die Abbildungsvorschrift des Ortsoperators im Ortsbild ist die Multiplikation der Ortsfunktion mit ihrem Argument:

$$\langle x|\hat{q} = x\langle x| \quad . \tag{132}$$

Der Impulsoperator $\hat{p}$ hat ebenfalls ein rein kontinuierliches Spektrum und läßt sich also schreiben als

$$\hat{p} = \int dp\, p\, |p\rangle\langle p| \quad . \tag{133}$$

Die Spektralzerlegung eines Kets $|\psi\rangle$ in der Impulsbasis lautet dann

$$|\psi\rangle = \mathbb{1}_p|\psi\rangle \int dp\, \psi(p)|p\rangle \quad , \tag{134}$$

mit den Impulskomponenten

$$\psi(p) = \langle p|\psi\rangle \quad . \tag{135}$$

Die Darstellung von $|\psi\rangle$ als Funktion $\tilde{\psi}(p) = \langle p|\psi\rangle$ nennt man die **Impulsdarstellung** von $|\psi\rangle$. Das ist ja alles ganz schön, doch wie kommt man von einer gegebenen Ortsdarstellung zur Impulsdarstellung? Des Rätsels Lösung sind die **Transformationselemente**

$$\langle x|p\rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\, e^{ipx} \tag{136}$$

Damit erhalten wir

$$\begin{aligned} \tilde{\psi}(p) &= \langle p|\psi\rangle = \langle p|\mathbb{1}_q|\psi\rangle = \int dx\, \langle p|x\rangle\langle x|\psi\rangle & (137)\\ &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int dx\, e^{-ipx}\psi(x) \quad , & (138) \end{aligned}$$

d.h. die Impulsdarstellung ist gerade die **Fourier-Transformierte** der Ortsdarstellung. Umgekehrt gilt:

$$\begin{aligned} \tilde{\psi}(x) &= \langle x|\psi\rangle = \langle x|\mathbb{1}_p|\psi\rangle = \int dp\, \langle x|p\rangle\langle p|\psi\rangle & (139)\\ &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int dx\, e^{ipx}\tilde{\psi}(p) \quad , & (140) \end{aligned}$$

d.h. die Ortsdarstellung erhält man aus der Impulsdarstellung durch **inverse Fourier-Transformation**. Die Abbildungsvorschrift für den Impulsoperator im Ortsraum ist:

$$\begin{aligned} \langle x|\hat{p}|\psi\rangle &= \int dp\, p\langle x|p\rangle\langle p|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int dp\, p\, e^{ipx}\tilde{\psi}(p) & (141)\\ &= \left(-i\frac{\partial}{\partial x}\right) \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int dp\, e^{ipx}\tilde{\psi}(p) \quad , & (142) \end{aligned}$$

d.h. die Abbildungsvorschrift des Impulsoperators im Ortsbild ist die Ableitung der Ortsfunktion nach ihrem Argument:

$$\langle x|\hat{p} = -i\frac{\partial}{\partial x}\langle x| \quad . \tag{143}$$

Damit gilt die **Kommutatorrelation**

$$[\hat{q}, \hat{p}] = i \quad . \tag{144}$$

Man hätte auch mit der Kommutatorrelation anfangen und daraus den Zusammenhang der Darstellungen via Fourier-Transformation ableiten können. Orts- und Impulsdarstellung sind völlig äquivalente Darstellungen für den Zustandsvektor eines Systems.

Der Impulsoperator generiert eine **unitäre Orts-Translation** der Zustände vermittels

$$\langle x + x' | \psi \rangle = \langle x | e^{i\hat{p}x'} | \psi \rangle \tag{145}$$
$$\Leftrightarrow \quad \psi(x + x') = e^{i\hat{p}x} \psi(x) \tag{146}$$

und ebenso generiert der Ortsoperator eine unitäre Impuls-Translation vermittels

$$\langle p + p' | \psi \rangle = \langle p | e^{-i\hat{x}p'} | \psi \rangle \tag{147}$$
$$\Leftrightarrow \quad \psi(p + p') = e^{-i\hat{x}p'} \psi(p) \quad . \tag{148}$$