Theoretische Physik Lehramt III – Quantenmechanik und Statistik

HandOut Hilbert[1]

Ausgabe: 28.10.2005

---

1 Der Zoo der Räume

Die Bühne der klassischen Mechanik ist der Phasenraum. Die Bühne der Quantenmechanik ist der Hilbertraum. Da Hilberträume meist unendlich viele Dimensionen haben kann man sich in ihnen leicht verlaufen. Höchst Zeit also, sich Hilberträume genauer anzusehen.[2]

1.1 Der lineare Raum

Sie erinnern sich – wenn sie eine Menge von Dingen haben (Funktionen, Pfeile, Spalten, Matrizen) die sie "addieren" können und die sie mit Elementen eines Körpers multiplizieren können, genannt *Koeffizientenkörper*, dann haben sie schon einen Vektorraum. In der Quantenmechanik ist der Koeffizientenkörper der Körper der komplexen Zahlen – und los gehts:

Komplexer Vektorraum ist ein Tupel $(V, +, \cdot)$ worin V eine Menge mit einem ausgezeichneten Nullelement $o \in V$, für die eine Addition $+ : V \times V \to V$ und eine skalare Multiplikation $\cdot : \mathbb{C} \times V \to V$ erklärt ist, so dass für alle $\psi, \phi, \chi \in V$ und alle $\alpha, \beta \in \mathbb{C}$ gilt:

$$
\begin{array}{ll}
\text{(V1)} & \psi + \phi = \phi + \psi \\
\text{(V2)} & \psi + (\phi + \chi) = (\psi + \phi) + \chi \\
\text{(V3)} & \psi + o = \psi \\
\text{(V4)} & \exists (-\psi) \in V \quad : \psi + (-\psi) = o \\
\text{(V5)} & \alpha \cdot (\psi + \phi) = \alpha \cdot \psi + \alpha \cdot \phi \\
\text{(V6)} & (\alpha + \beta) \cdot \psi = \alpha \cdot \psi + \beta \cdot \psi \\
\text{(V7)} & (\alpha\beta) \cdot \psi = \alpha \cdot (\beta \cdot \psi) \\
\text{(V8)} & 1 \cdot \psi = \psi
\end{array}
$$

Bei der Skalarmultiplikation lässt man den Punkt $\cdot$ gerne weg; statt $\alpha \cdot \psi$ schreibt man dann – genauso wie in der Arithmetik – einfach $\alpha\psi$. Die Skalarmultiplikation sollte übrigens nicht mit dem Skalarprodukt – ein noch einzuführendes Strukturelement – verwechselt werden.

Vektorräume heißen auch *lineare Räume*. Ein komplexer Vektorraum wird in der deutschsprachigen Literatur gerne auch "Vektorraum über dem Körper der komplexen Zahlen" genannt. Statt $\mathbb{C}$ kann auch irgendein anderer Körper (engl. field) benutzt werden – beliebt

[1]Das HandOut ist durch Vorarbeiten von Timo Felbinger und Kim Boström maßgeblich inspiriert.

[2]Potsdamer Studierende hören im Diplom parallel zur QM I eine Mathematikvorlesung "Funktionalanalysis". Studierende im Lehramt kommen mit der Funktionalanalysis nur in Berhrung, wenn sie Mathe als anderes Fach haben (und auch dann nur wenn sie's wollen).

ist beispielsweise der Körper der reellen Zahlen. Vektorräume werden übrigens meistens bei dem Namen der ihr zugrundeliegenden Menge gerufen. Statt vom Vektorraum $(V, +, \cdot)$ spricht man einfach vom Vektorraum V.

Beispiele von Vektorräumen sind

1. Die Menge aller komplexen N-Tupel
$$\mathbb{C}^N := \{\psi | \psi = (\psi_1, \ldots, \psi_N), \psi_i \in \mathbb{C}, i = 1, \ldots, N\} \tag{1}$$
wird mit der Verabredung einer Vektoraddition $\psi + \chi := (\psi_1 + \chi_1, \ldots, \psi_N + \chi_N)$ und Skalarmultiplikation $\alpha\psi := (\alpha\psi_1, \ldots, \alpha\psi_N)$ zum Vektorraum.

2. Die Menge aller komplexen $M \times N$-Matrizen
$$\mathbb{M}^{MN} := \{\psi | \psi = (\psi_{ij}), \psi_{ij} \in \mathbb{C}, i = 1, \ldots, M; j = 1, \ldots, N\} \tag{2}$$
wird mit der Verabredung der üblichen Matrixaddition (also elementweise) und Multiplikation mit einer komplexen Zahl zum Vektorraum. Matrixmultiplikation ist in diesem Vektorraum natürlich nicht zugelassen – selbst dann nicht, wenn es sich um quadratische Matrizen handelt, $M = N$. Allerdings kann man die *Algebra* der quadratischen Matrizen verabreden. Ausgangspunkt ist dabei der soeben eingeführte Vektorraum auf dem zusätzlich eine Multiplikation $(\psi\phi)_{ij} := \sum_{k=1}^{N} \psi_{ik}\phi_{kj}$ verabredet wird.

3. Die Menge aller unendlichen Zahlenfolgen, spezifiziert für festes p mit $1 \leq p < \infty$
$$\ell^p := \left\{ \psi | \psi = (\psi_1, \ldots, \psi_i, \ldots), 1 \leq i \leq \infty, \psi_i \in \mathbb{C}, \left[\sum_{i=1}^{\infty} |\psi_i|^p \right]^{1/p} < \infty \right\} \tag{3}$$
wird mit der Verabredung $\psi + \chi := (\psi_1 + \chi_1, \ldots, \psi_i + \chi_i, \ldots)$ und $\alpha\psi := (\alpha\psi_1, \ldots, \alpha\psi_i, \ldots)$ zum Vektorraum.

4. Die Menge der stetigen komplexwertigen Funktionen über einem Intervall $[a, b]$, spezifiziert
$$\mathcal{C}(a, b) := \{\psi : [a, b] \to \mathbb{C} | \psi \text{ stetig über } [a, b]\} \tag{4}$$
wird mit der Verabredung der punktweisen Addition $(\psi + \chi)(x) := \psi(x) + \chi(x)$ und Skalarmultiplikation $(\alpha\psi)(x) := \alpha\psi(x)$ zum Vektorraum.

5. Das letztere Beispiel verallgemeinernd: Die Menge der m-mal stetig differenzierbaren komplexen Funktionen über einem Definitionsbereich $E \in \mathbb{R}^n$, spezifiziert
$$\mathcal{C}^m(E) := \left\{ \psi : E \to \mathbb{C} | \partial^a \psi \text{ stetig über } \bar{E} \text{ für alle } a = 0, \ldots, m \right\} \tag{5}$$
worin $\partial^a := \partial^{a_1 + \ldots + a_n} / \partial x^{a_1} \cdots \partial x^{a_n}$, $a = a_1 + \ldots + a_n$ wird mit der Verabredung *punktweiser* Addition und Skalarmultiplikation zum Vektorraum. “Punktweise” soll heißen, dass die Addition zweier Funktionen f und g, also die Funktion $h = f + g$, über ihre Werte (= komplexe Zahlen) erklärt ist $h(x) = f(x) + g(x)$.[3]

[3] Was soll das? Wir wissen doch, wie man addiert! Ja schon – sie wissen vermutlich wie man Zahlen addiert. Aber wissen Sie denn auch, wie man Funktionen, also Abbildungen addiert? Bevor Sie jetzt spontan “Klaro!” sagen – wie addieren Sie denn zwei Funktionen mit Wertebereich “Stimmung” (und Definitionsbereich “Wochentag”)?

6. Die Menge der p-integrablen Funktionen über einem Intervall $I := (a,b) \subseteq \mathbb{R}$, für p fest, $1 \leq p < \infty$ spezifiziert
$$\tilde{\mathcal{L}}^p(I,dx) := \left\{ \psi : I \to \mathbb{C} | \psi \text{ messbar, } p\text{-integrabel} \left[\int_I |\psi(x)|^p dx \right]^{1/p} < \infty \right\} \tag{6}$$
wird mit der Verabredung punktweiser Addition und Skalarmultiplikation zum Vektorraum. "Messbarkeit" bedeutet hier, dass Real- und Imaginärteil messbar sind; eine reelle Funktion f heißt messbar, wenn die Mengen $F_a := \{x | f(x) < c\}$ für alle $c \in \mathbb{R}$ messbar sind. Wichtige Spezialfälle sind der $\tilde{\mathcal{L}}^1(I,dx)$ der absolut integrablen Funktionen, und der $\tilde{\mathcal{L}}^2(I,dx)$ der quadratintegrablen Funktionen.

7. Die Menge der schnell abfallenden Funktionen, spezifiziert
$$\mathcal{S}(\mathbb{R},dx) := \left\{ \psi \in \mathcal{C}^\infty | \int x^n |\psi^{(m)}(x)| dx < \infty \text{ für alle } m,n \in \mathbb{N}_0 \right\} \tag{7}$$
wird mit punktweiser Addition und Skalarmultiplikation zum Vektorraum, genannt *Schwartzraum*. Der Schwartzraum spielt für viele Überlegungen eine wichtige Rolle – seine Elemente sind einfach schön glatt und machen im Unendlichen keine Schwierigkeiten. Wie wir weiter unten sehen werden ist er zwar nicht vollständig, ist aber dicht im $\mathcal{L}^2(\mathbb{R},dx)$.

Der Vollständigkeit halber sei hier noch kurz an einige wichtige algebraische Begriffe erinnerts:

Unterraum Eine Teilmenge $U \subset V$ eines Vektorraums V heißt Linearmannigfaltigkeit (auch: linearer Teilraum bzw Unterraum) wenn alle endlichen Linearkombinationen $\sum_{i<\infty} \alpha_i \chi_i$, $\chi_i \in U$, wiederum in U liegen. Äquivalent: U ist Unterraum von $V \Leftrightarrow U$ ist selber Vektorraum.

Lineare Hülle Hat man eine zunächst beliebige Teilmenge $M \subseteq V$ so erhält man durch die Bildung aller endlichen Linerakombinationen einen linearen Teilram, genannt die lineare Hülle von M.

Lineare Unabhängigkeit Man nennt n Vektoren $\psi_1, \ldots, \psi_n$ linear unabhängig, wenn die Gleichung $\sum_{i=1}^n \alpha_i \psi_i = o$ nur für $\alpha_1 = \ldots = \alpha_n = 0$ erfüllt werden kann. Andernfalls heißen die Vektoren linear abhängig. Eine beliebige (nicht notwendigerweise abzählbare) Menge von Vektoren heißt linear unabhängig wenn je endlich viele ihrer Elemente linear unabhängig sind.

Basis und Dimension Eine *Basis* eines Vektorraums V ist eine Menge von linear unabhängigen Elementen, deren lineare Hülle den Raum ergibt. Es gibt i.A. viele Basen in einem Vektorraum. Die Mächtigkeit einer Basis ist allerdings eindeutig und heißt *Dimension* des Vektorraums. Alternativ: Ein Vektorraum hat die Dimension N wenn es N linear unabhängige Vektoren gibt, aber $N+1$ Vektoren stets linear abhängig sind. Ein Vektorraum hat die Dimension ∞ wenn es zu jeder natürlichen Zahl n linear unabhängige Vektoren $\psi_1, \ldots, \psi_n$ gibt.

Von den oben aufgeführten Beispielen sind nur der $\mathbb{C}^N$ und der $\mathbb{M}^{MN}$ endlich-dimensional, genauer: $\dim \mathbb{C}^N = N$ und $\dim \mathbb{M}^{MN} = MN$. Alle anderen Räume sind unendlich-dimensional. Allerdings gibt es verschiedene Arten von Unendlich, abzählbar unendlich, etwa, oder überabzählbar unendlich ...

1.2 Der metrische Raum

Wenn man mal einen Vektorraum hat, hat man schon einiges, aber noch nicht sehr viel. Beispielsweise hat man noch keine Ahnung wie nah (oder entfernt) zwei Elemente (Vektoren) voneinander sind, oder gar "wie lang" sie sind, nicht zu reden vom Winkel zwischen zwei Vektoren. Dazu bedarf es schon ein bischen mehr.

Fangen wir mal mit der Entfernung an. MathematikerInnen benutzen dafür eine

Metrik auf einer Menge M ist eine Abbildung $d : M \times M \to \mathbb{R}$ mit Eigenschaften

$$\begin{aligned} d(x,y) &\geq 0 && (\textsc{positiv}) \\ d(x,y) = 0 &\Leftrightarrow x = y && (\textsc{definit}) \\ d(x,y) &= d(y,x) && (\textsc{symmetrisch}) \\ d(x,z) &\leq d(x,y) + d(y,z) && (\textsc{Dreiecksungleichung}) \end{aligned}$$

für alle $x, y, z \in M$.[4]

Aus Ihren Flugerfahrungen wissen Sie natürlich, dass eine Metrik keineswegs einen linearen Raum voraussetzt – denken Sie an eine Kugeloberfläche. Auch darf ich Sie daran erinnern dass man auf einer Menge durchaus verschiedene Metriken einführen kann. Auf $\mathbb{C}$ beispielsweise sind sowohl $d(z_1, z_2) := |z_1 - z_2|$ als auch $d(z_1, z_2) := |z_1 - z_2|/(1 + |z_1 - z_2|)$ Metriken.

Metriken sind überaus nützlich– mit ihrer Hilfe kann man zumindest sinnvoll über Abstände reden. Und also über "Nachbarschaft" bzw Umgebung eines Punktes. Jeder metrische Raum lässt sich mit Hilfe seiner Metrik topologisieren. Die Topologie (Menge der Umgebungen) wird mittels Kugeln $K_\epsilon(\psi) := \{\chi \in M | d(\psi, \chi) < \epsilon; \psi \in M \text{ fest}; \epsilon \geq 0 \text{ fest}\}$ eingeführt.

Mit einem Umgebungsbegriff kann man nun auch über Konvergenz sinnvoll reden. Wichtig in diesem Zusammenhang der Begriff der

Cauchy-Folge Eine unendliche Folge $\psi_n \in M$, $n = 1, 2, \ldots$ ist eine Cauchyfolge genau dann wenn $\underset{\epsilon>0}{\forall} \underset{N_\epsilon}{\exists} \underset{n>N_\epsilon}{\forall} \underset{m>N_\epsilon}{\forall} : d(\psi_m, \psi_n) < \epsilon$.

Cauchyfolgen heißen auch "in-sich" konvergent, oder einfach "Cauchy". Es gibt leider (zum Glück?) viele Folgen die sind zwar Cauchy, konvergieren aber gegen etwas, das jenseits des Bekannten liegt. Man stelle sich vor man kenne nur die rationalen Zahlen. Jedes Glied der Folge $s_n = (1 + 1/n)^n$ wäre keine Überraschung, da rational, die Folge bezgl der Metrik $d(x, y) := |x-y|$ sogar Cauchy, das Grenzelement $\lim s_n = e$ läge aber in einem unbekannten Universum – schliesslich ist Euler's e transzendent, nicht rational. Mengen bei denen das nicht passiert heißen auch *vollständig.* Die Menge der reellen Zahlen, beispielsweise, ist vollständig. Die Menge der rationalen offensichtlich nicht. Allerdings lässt sich jede reelle Zahl beliebig genau durch eine rationale Zahl approximieren. Man sagt, die rationalen lägen dicht in den rellen. Verallgemeinert

Dichte Teilmenge Eine Menge M liegt dicht in einem metrischen Raum V, wenn es für jedes $\psi \in V$ und $\epsilon > 0$ ein $\varphi \in M$ gibt mit $d(\psi, \varphi) < \epsilon$.

[4] Wird der Begriff der Metrik axiomatisch eingeführt, reicht die Forderung nach Definitheit und die Dreiecksungleichung. Aus diesen beiden Forderungen können dann die Positivität und Symmterie hergeleitet werden.

Separabler Raum Ein metrischer Raum V (nicht notwendig linear) ist separabel, wenn es in ihm eine abzählbare, dichte Teilmenge gibt.

Ist V ein separabler metrischer Vektorraum, so gibt es eine abzählbare Basis $B = (\varphi_i)$, d. h. für jeden Vektor $\psi \in V$ gibt es eine Darstellung

$$\psi = \sum_i c_i \varphi_i \,. \tag{8}$$

mit eindeutig bestimmten sog *Entwicklungskoeffizienten* c_i. Mit der Gleichheit ist gemeint, dass die Folge der Partialsummen $s_n := \sum_i^n c_i\varphi_i$ bezüglich der Metrik d konvergiert, $\lim_{n\to\infty} d(\psi, s_n) = 0$.

1.3 Der normierte Raum

Hat man eine Metrik kann man trefflich über Abstände, Konvergenz usw reden, nicht allerdings über Längen oder gar Winkel. Um zumindest über Längen sinnvoll zu reden, braucht's halt mehr als eine Punktmenge – was wäre denn die Länge eines Punktes?

Normierter Raum Ein normierter Raum ist ein Vektorraum V auf dem eine Abbildung $\|\cdot\| : V \to \mathbb{R}$, genannt Norm, erklärt ist, so dass für alle $\psi, \phi \in V$, $\alpha \in \mathbb{C}$:

$$\|\psi\| \geq 0 \qquad (\textsc{positiv}) \tag{9}$$
$$\|\psi\| = 0 \Leftrightarrow \psi = o \qquad (\textsc{definit}) \tag{10}$$
$$\|\alpha\psi\| = |\alpha|\|\psi\| \qquad (\textsc{homogen}) \tag{11}$$
$$\|\psi + \phi\| \leq \|\psi\| + \|\phi\| \qquad (\textsc{Dreiecksungleichung}) \tag{12}$$

Fein. In normierten Räumen lässt sich trefflich über Längen reden. Aber auch über Abstände! Schließlich liefert jede Norm via $d(\phi, \psi) := \|\phi - \psi\|$ auch eine Metrik (man sagt die Norm *induziere* eine Metrik). Gemeint ist damit, dass die via $d(\phi, \psi) := \|\phi - \psi\|$ definierte Zahlenfunktion die Axiome einer Metrik befriedigt. In jedem Fall sehen wir hier, dass ein normierter Raum immer auch ein metrischer Raum ist. Umgekehrt gilt das allerdings nicht: nicht jeder metrische Raum ist auch ein normierter Raum. Denken Sie nur an die Kugeloberfläche.

Wenn man mit einer Norm schon über Abstände reden kann, kann man sich endlich auch um Konvergenz in linearen Räumen kümmern, und das Licht der Welt erblickt der

Banachraum Ein Banachraum ist ein vollständiger normierter Vektorraum, also ein Vektorraum, in dem jede Cauchyfolge ψ_n in V gegen ein Element ψ in V konvergiert, $\|\psi_n - \psi\| \to 0$.

Dem oben erwähnten Missgeschick, beim Herumlaufen im Unbekannten zu landen, wird im Banachraum offensichtlich ein Riegel vorgeschoben. Die Operatoren der Quantenmechanik, beispielsweise, bevölkern einen Banachraum (und wirken im Hilbertraum).

1. Der $\mathbb{C}^N$ mit Norm $\|\psi\|_p := \left[\sum_{i=1}^N |\psi_i|^p\right]^{1/p}$, $1 \leq p < \infty$ fest (sog p-Norm) ist ein normierter Raum, sogar Banachraum da endlich-dimensional. Wichtige Spezialfälle sind $p = 1$, $p = 2$ und $p = \infty$. Für $p = 1$ erhält man die sog 1-Norm, $\|\psi\| = \sum_{i=1}^N |\psi_i|$, für $p = 2$ die sog 2-Norm, und für $p = \infty$ die sog max-Norm, $\|\psi\| = \max_{1\leq i\leq N} |\psi_i|$.

2. Der Raum der $M \times N$ Matrizen $\mathbb{M}^{MN}$ mit 2-Norm $\|\psi\| = \left[\sum_{i,j=1}^{M,N} |\psi_{ij}|^2\right]^{1/2}$ ist ein normierter Raum, sogar Banachraum da endlichdimensional.
3. Der Raum ℓ^2 mit p-Norm $\|\psi\|_p := [\sum_{n=1}^{\infty} |\psi_n|^p]^{1/p}$ ist normierter Raum, sogar Banachraum da vollständig (wird in Mathe-Vorlesung bewiesen).

Bei Funktionenräumen ist das mit der Norm schon nicht mehr ganz so einfach. Auf $\tilde{\mathcal{L}}^2$ würde man das Funktional $N[\psi] := \sqrt{\int |\psi(x)|^2 dx}$ gern zur Norm befördern, nur widerspräche das dem Axiom $\|\psi\| = 0 \Leftrightarrow \psi = o$ worin o die Nullfunktion, $o(x) = 0$. Es gibt nämlich im $\tilde{\mathcal{L}}^2$ durchaus Funktionen, die sind nicht die Null-Funktion, liefern aber $N = 0$. Das Monster $\psi(x) = 17$ für x rational, $\psi(x) = 0$ sonst, ist ein schönes Beispiel.

Der Ausweg sei kurz skizziert. Man definiert zunächst die Menge $\mathcal{N} := \left\{\psi \in \tilde{\mathcal{L}}^2 | N[\psi] = 0\right\}$ in der alle Funktionen zusammengefasst werden, die fast überall (f.ü.) der Nullfunktion gleichen. Dann definiert man den sog Quotientenraum

$$\mathcal{L}^2 := \tilde{\mathcal{L}}^2/\mathcal{N} \tag{13}$$

dessen Elemente nun Äquivalenzklassen von Funktionen sind, deren Differenz in $\mathcal{N}$ liegen. Auf dem so eingeführten Quotientenraum ist $N[\psi]$ wohldefiniert, insbesondere unabhängig vom Repräsentaten, und also eine Norm, sog $\mathcal{L}^2$-Norm $\|\psi\| := \sqrt{\int |\psi(x)|^2 dx}$.

1.4 Der unitäre Raum

Im Banachraum sind allerdings Winkel ("steht senkrecht auf") noch nicht erklärt. Dazu bemüht man das

Skalarprodukt: Ein (komplexes) Skalarprodukt auf dem komplexen Vektorraum V ist eine Abbildung $\langle\cdot,\cdot\rangle : V \times V \to \mathbb{C}$, so dass für alle $\psi, \phi, \chi \in V$, $\alpha \in \mathbb{C}$:

$$\langle\psi,\psi\rangle \geq 0 \qquad \text{(positiv)} \tag{14}$$
$$\langle\psi,\psi\rangle = 0 \Leftrightarrow \psi = o \qquad \text{(definit)} \tag{15}$$
$$\langle\phi,\psi\rangle = \langle\psi,\phi\rangle^* \qquad \text{(hermitesch)} \tag{16}$$
$$\langle\phi,\alpha\psi\rangle = \alpha\langle\psi,\phi\rangle \qquad \text{(homogen)} \tag{17}$$
$$\langle\chi,\phi+\psi\rangle = \langle\chi,\phi\rangle + \langle\chi,\psi\rangle \qquad \text{(linear)} \tag{18}$$

Beachten Sie übrigens $\langle\alpha\phi,\psi\rangle = \alpha^*\langle\phi,\psi\rangle$ – also *anti-homogen*, zuweilen genannt "antilinear", im ersten Eintrag (folgt aus Hermitizität).

In der Mathematik wird das Skalarprodukt zuweilen homogen im ersten Eintrag definiert; statt (17) also $\langle\alpha\phi,\psi\rangle = \alpha\langle\phi,\psi\rangle$. Wir folgen hier aber der Konvention der Physik – also homogen im zweiten Eintrag, anti-homogen im ersten Eintrag. Ausserdem bezeichnen wir hier immer das konjugiert-komplexe einer komplexen Zahl z mit z^*, und nicht wie in der Mathematik zuweilen üblich mit dem Strich überm Kopf $\bar{z}$. Den adjungierten eines Operators $\hat{A}$, um diese Frage auch gleich zu beantworten, bezeichnen wir mit $\hat{A}^\dagger$.

Mit so einem Skalarprodukt lässt sich bekanntlich trefflich über Winkel reden. Beispielsweise heißen zwei Vektoren ϕ, ψ orthogonal genau dann wenn $\langle\phi,\psi\rangle = 0$.

Aber auch über Längen! Schließlich liefert das Skalarprodukt via $\|\psi\| := \sqrt{\langle\psi|\psi\rangle}$ auch eine Norm. Man sagt das Skalarprodukt *induziere* eine Norm. Damit ist gemeint, dass die durch $\|\psi\| := \sqrt{\langle\psi,\psi\rangle}$ definierte Zahlenfunktion, sog 2-*Norm*, die Normaxiome erfüllt. Das Licht der Welt erblickt ein

Unitärer Raum Normierter Raum mit Skalarprodukt, wobei die Norm durch das Skalarprodukt induziert ist, $\|\psi\| := \sqrt{\langle\psi,\psi\rangle}$.

Im unitären Raum gilt die sog *Schwarz'sche Ungleichung*

$$|\langle\psi,\chi\rangle| \leq \|\psi\|\|\chi\|\,, \tag{19}$$

und die sog *Parallelogramm-Gleichung*

$$\|\psi+\chi\|^2 + \|\psi-\chi\|^2 = 2\|\psi\|^2 + 2\|\chi\|^2\,. \tag{20}$$

Ausserdem kann im unitären Raum das Skalarprodukt immer durch die Norm ausgedrückt werden,

$$4\langle\psi,\chi\rangle = \|\psi+\chi\|^2 - \|\psi-\chi\|^2 + i\|i\psi+\chi\|^2 - i\|i\psi-\chi\|^2\,. \tag{21}$$

Was aber nicht bedeutet, dass für einen jeden normierten Raum via (21) ein Skalarprodukt eingeführt werden kann. Es gilt nämlich der wichtige

Satz: Ein linearer, normierter Raum V ist dann und nur dann ein linearer, unitärer Raum mit Skalarprodukt gemäß (21), wenn die Norm die Parallelogrammgleichung (20) erfüllt.

Für die p-Normen im $\mathbb{C}^N$ findet man für $\psi = (1,1,0,\ldots,0)$ und $\chi = (1,-1,0,\ldots,0)$ dass die Norm die Parallelogramm-Gleichung nur für $p = 2$ erfüllt (nachrechnen!). Die 2-Norm ist also genau dadurch ausgezeichnet, dass sie allein via (21) eine Erweiterung zum Skalarprodukt erlaubt!

Festzuhalen bleibt hier jedenfalls: Ein unitärer Raum ist immer auch ein normierter Raum, und also immer auch ein metrischer Raum. Umgekehrt gilt das allerdings nicht. Eine Kugeloberfläche ist ein metrischer Raum, aber kein normierter Raum. Und ein p-normierter Vektorraum ist zwar ein normierter Raum, lässt sich aber nur für $p = 2$ zum unitären Raum erweitern.

Man beachte, dass unitäre Raum nicht unbedingt vollständig sein müssen. Da nun aber Vollständigkeit so schön ist, und auch Winkel nützlich sind, spendierte man einen

Hilbertraum Ein unitärer Banachraum.

Mit anderen Worten: Die Bühne der Quantentheorie ist ein linearer, komplexer, normierter, vollständiger Raum mit Skalarprodukt, wobei die Norm durch das Skalarprodukt induziert ist.[5]

Hilberträume der Quantenmechanik, insbesondere Wellenmechanik, sind im Allgemeinen unendlich-dimensional. Prinzipiell gibt es da zwei Typen, die separablen und die nicht-separablen. Mit den nicht-separablen muss man sich allerdings erst in der Quantenfeldtheorie herumschlagen; und auch das nur, wenn man mathematische(r) PhysikerIn ist. Für

[5] In der Literatur kann Ihnen auch der sog *Prä-Hilbertraum* begegnen. Das ist einfach ein normierter Raum in dem die Norm die Parallelogramm-Gleichung erfüllt.

unsere Zwecke reichen die separablen. Sofern also nichts Gegenteiliges gesagt wird, soll im Folgenden mit dem Begriff Hilbertraum immer ein separabler Hilbertraum gemeint sein.

Separable Hilberträume sind dadurch ausgezeichnet, dass sie abzählbare Basen haben. Dank des Skalarprodukts kann so eine Basis auch stets orthomormiert werden (Gram-Schmidt'sches Orthonormierungsverfahren). Man erhält dann eine Orthonormalbasis,

$$\langle \varphi_n, \varphi_m \rangle = \delta_{nm} \,. \tag{22}$$

Sei also $B := \{\varphi_1, \ldots, \varphi_n, \ldots\}$ Orthonormalbasis, auch genannt vollständiges Orthonormalsystem. Dann kann jeder Vektor $\psi \in \mathcal{H}$ entwickelt werden

$$\psi = \sum_n c_n \phi_n \tag{23}$$

mit eindeutig bestimmten Entwicklungskoeffizienten

$$c_n = \langle \varphi_n, \psi \rangle \,, \tag{24}$$

sog *Fourierkoeffizienten* von ψ bezüglich der Basis B. Vollständigkeit der Basis impliziert

$$\|\psi\|^2 = \sum_n |c_n|^2 \,. \tag{25}$$

sog *Parsevalsche Gleichung.*

1. Alle endlichdimensionalen komplexen Vektorräume, etwa $\mathbb{C}^N$ oder $\mathbb{M}^N$, sind – nachdem sie mit einem Skalarprodukt versehen sind – unitäre Räume, da endlichdimenmsional grundsätzlich vollständig und separabel, also separable Hilberträume. Auf $\mathbb{C}^N$ kann beispielsweise $\langle \psi, \chi \rangle := \sum_{n=1}^N \psi_n^* \chi_n$ als Skalarprodukt dienen, sog *Standard-Skalarprodukt*. Das ist zwar die beliebteste Version, aber lange nicht die einzige. Eine anderer Wahl ist $\langle \psi, \chi \rangle := \sum_{i,j=1}^n \psi_i^* a_{ij} \chi_j$ worin (a_{ij}) positiv definite hermitesche Matrix, $a_{ij} = a_{ji}^*$. Für $a_{ij} = \delta_{ij}$ erhält man offensichtlich das Standard-Skalarprodukt.

2. Der ℓ^2 mit Skalarprodukt $\langle \psi, \chi \rangle := \sum_{n=1}^\infty \psi_n^* \chi_n$ ist ein unitärer Raum, da vollständig und separabel sogar ein separabler Hilbertraum. Der ℓ^2 ist soetwas wie die "Mutter aller Hilberträume".

3. Der $\mathcal{L}^2$ mit Skalarprodukt $\langle \psi, \chi \rangle := \int \psi^*(x) \chi(x) dx$ ist ein unitärer Raum, obendrein vollständig und separabel, also auch ein separabler Hilbertraum.

4. Der Schwarzraum $\mathcal{S}$ ist mit dem $\mathcal{L}^2$ Skalarprodukt ein unitärer Raum, nicht aber vollständig und daher kein Hilbertraum. Allerdings liegt der $\mathcal{S}$ dicht im $\mathcal{L}^2(\mathbb{R}, dx)$.

2 Der Garten der Morphismen

Der Daseinszweck von Räumen sind die Abbildungen die man auf ihnen vornehmen kann. In der Analysis haben Sie ja auch erst die reellen Zahlen kennengelernt um dann Funktionen zu studieren. Letzteres war dann das eigentlich interessante, denken sie nur an Begriffe wie Stetigkeit, Beschränktehit, Differenzierbarkeit usw. In der Funktionalanalysis ist das genauso, nur dass die Funktionen dort Abbildungen bzw Funktional heißen. Von hervorragender Bedeutung sind dabei die linearen Abbildungen, in der Quantenmechanik genannt *Operatoren*. Zeit also, sich Operatoren einmal näher anzusehen ...

2.1 Typen linearer Abbildungen

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

$$\underset{\psi,\chi \in V}{\forall} f(\psi + \chi) = f(\psi) + f(\chi)\,, \tag{26}$$

und *homogen*,

$$\underset{\psi \in V, \alpha \in \mathbb{C}}{\forall} f(\alpha\psi) = \alpha f(\psi)\,. \tag{27}$$

Homomorphismen heißen auch lineare Abbildungen. Gilt statt der Homogenität

$$\underset{\phi \in V, \alpha \in \mathbb{C}}{\forall} f(\alpha\psi) = \alpha^* f(\psi)\,, \tag{28}$$

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 (sog. Zeitumkehr) sind die *antiunitären* Abbildungen.

Homomorphismen werden weiter klassifiziert nach ihren Typ injektiv, surjektiv, bijektiv. Die folgenden Bezeichnungen haben sich eingebürgert

Endomorphismus ist ein Homomorphismus $V \to V$.

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

Automorphismus ist ein isomorpher Endomorphismus.

Des weiteren verdienen Homomorphismen immer dann einen eigenen Namen, wenn sie mit den Strukturelementen Norm, Skalarprodukt etc pfleglich umgehen. Hier haben sich die folgenden Bezeichnungen eingebürgert

Normisomorphismus Ein normerhaltender Isomorphismus $f : V \to W$ zwischen zwei normierten Räumen V und W, d. h. $\underset{\phi \in V}{\forall} \|f(\phi)\| = \|\phi\|$. Die Räume V und W heißen *normisomorph*, wenn zwischen ihnen ein Normisomorphismus existiert.

Isometrie Ein Homomorphismus $f : V \to W$ zwischen zwei unitären Räumen V und W, der das Skalarprodukt erhält, d. h. $\underset{\phi,\psi \in V}{\forall} \langle f(\phi), f(\psi)\rangle = \langle \phi, \psi\rangle$.

Unitäre Abbildung Ein isometrischer Isomorphismus.

Ganz wie in der gewähnlichen Analysis wüsste man über eine gegebene Abbildung gerne mehr als nur ob sie injektiv, oder vielleicht bijektiv ist. Man wüsste beispielsweise gerne ob sie stetig ist, oder vielleicht beschränkt. Dazu bedarf es allerdings zumindest einer Metrik bzw einer Norm: nur mit deren Hilfe kann schließlich sinnvoll entschieden werden, ob etwas "nah" bei etwas anderem ist (Stetigkeit), bzw ob etwas "groß" oder "klein" ist (Beschränktheit).

Stetigkeit Der Homomorphismus $f : V \to W$ zwischen metrischen Räumen V und W heißt *stetig*, wenn gilt

$$\underset{\psi\in V}{\forall}\,\underset{\epsilon>0}{\forall}\,\underset{\delta>0}{\exists}\,\underset{\phi\in V}{\forall}\quad d(\psi,\phi)<\delta \Rightarrow d(f(\psi),f(\phi))<\epsilon\,, \tag{29}$$

und *gleichmäßig stetig*, wenn gilt

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

Man beachte hier die Reihenfolge der Quantoren.

Beschränktheit Der Homomorphismus $f : V \to W$ zwischen normierten Räumen V und W heißt *beschränkt*, wenn es eine reelle Zahl $C < \infty$ gibt, so dass

$$\|f(\psi)\| \leq C\|\psi\| \quad \text{für alle } \psi \in V\,. \tag{31}$$

Die kleinste der Beschränktheitszahlen C heißt *Norm* des Homomorphismus,

$$\|f\| := \sup_{\psi\in V} \frac{\|f(\psi)\|}{\|\psi\|}\,. \tag{32}$$

In normierten Räumen hängen Stetigkeit und Beschränktheit eng miteinander zusammen. Es gilt nämlich der super wichtige

Satz: Ein Homomorphismus zwischen normierten Räumen V, W ist genau dann bezüglich der durch die Norm gelieferten Metrik stetig, wenn er beschränkt ist. Beschränkte Homomorphismen sind stets sogar gleichmäßig stetig.

Viele wichtige Homomorphismen sind stetig, z.B. die Matrizen über dem $\mathbb{C}^N$. Aber auch in unendlich-dimensionalen Vektorräumen gibt es stetige Homomorphismen, denken Sie nur an die "Null-Abbildung", oder die "Identität". Die vielleicht wichtigsten stetigen Homomorphismen sind aber die Linearformen, und denen wenden wir uns jetzt zu.

2.2 Linearform

Zu Erinnerung: Eine Form ist eine Abbildung[6]

$$f : V \to \mathbb{C} \tag{33}$$
$$\psi \mapsto f(\psi)\,. \tag{34}$$

Eine Form ist eine Linearform genau dann wenn die Abbildung $f : V \to \mathbb{C}$ ein Homomorphismus, also

$$f(\alpha\psi) = \alpha f(\psi) \qquad \text{HOMOGEN} \tag{35}$$
$$f(\psi+\chi) = f(\psi) + f(\chi) \qquad \text{ADDITIV} \tag{36}$$

Eine Linearform f ist beschränkt genau dann wenn es ein $C < \infty$ gibt sodass $|f(\psi)| < C\|\psi\|$ für alle $\psi \in \mathcal{H}$.

[6]Synonym *Funktional*.

Alle beschränkten Linearformen über V können zu einer Menge $L(V,\mathbb{C})$ zusammengefasst werden. Mit der Verabredung $(\alpha f+\beta g)(\psi)=\alpha f(\psi)+\beta g(\psi)$ wird daraus ein Vektorraum, normiert $\|f\|:=\sup_{\|\psi\|=1}|f(\psi)|$. Um das Lesen zu erleichtern kriegt dieser Vektorraum einen eigenen Namen, statt $L(V,\mathbb{C})$ schreibt man $V^\dagger$. Gemeint ist aber das Gleiche: der Vektorraum der linear-beschränkten Formen über V.

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. Für QuantenmechanikerInnen ist diese Unterscheidung ist allerdings unwesentlich, denn es gilt: auf separablen Hilberträumen sind alle Linearformen beschränkt.[7]

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

$$\begin{aligned} f_\phi:\mathcal{H} &\to \mathbb{C} \\ \psi &\mapsto \langle\phi,\psi\rangle \end{aligned} \tag{37}$$

eine Linearform. Sie sollten das auch so lesen können: für festes $\phi\in\mathcal{H}$ ist das Skalarprodukt $\langle\phi,\psi\rangle$ bezüglich der $\psi\in\mathcal{H}$ eine Linearform.

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

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

$$\underset{\psi\in\mathcal{H}}{\forall} f(\psi)=\langle\phi,\psi\rangle\,. \tag{38}$$

Ein Hilbertraum ist somit zu seinem Dualraum normisomorph, $\mathcal{H}\simeq\mathcal{H}^\dagger$.

Da der ℓ^2 als "Mutter aller Hilberträume" so eine hervorragende Rolle spielt, wollen wir den Umgang mit Linearformen an diesem Beispiel etwas vertiefen. Zunächst fasse man den ℓ^2 einfach als komplexen Vektorraum der Spaltenvektoren auf, den Dualraum als Vektorraum der liegenden Zeilenvektoren, die kanonische Abbildung zwischen den beiden Räumen

$$\begin{aligned} {}^\dagger:\ell^2 &\to {\ell^2}^\dagger := L(\ell^2,\mathbb{C}) \\ \begin{pmatrix}\phi_1\\ \vdots\\ \phi_i\\ \vdots\end{pmatrix} &\mapsto (\phi_1^*,\dots,\phi_i^*,\dots) \end{aligned} \tag{39}$$

Mit dieser Vereinbarung liest sich die Wirkung der Linearform $\langle\phi,\cdot\rangle$ gemäß

$$\langle\phi,\psi\rangle\mapsto(\phi_1^*,\dots,\phi_i^*,\dots)\begin{pmatrix}\psi_1\\ \vdots\\ \psi_i\\ \vdots\end{pmatrix}\equiv\sum_{i=1}^\infty\phi_i^*\psi_i \tag{40}$$

wobei in der letzten Gleichung die Regeln der Matrizenrechnung zum Einsatz kommen!

[7] 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 $\mathcal{L}^2(\mathbb{R},dx)$ definiert, und brauchen daher auch nicht beschränkt zu sein (und sind es auch nicht).

3 Operatoren der Quantenmechanik

Dummerweise sind nun aber viele wichtige Homomorphismen der Quantenmechanik unbeschränkt, also keineswegs stetig, und das fast überall. Wir müssen daher unsere Instrumentarium noch ein wenig schärfen, bevor wir solche goodies wie den Spektralsatz auch für die Unbeschränkten sauber hinschreiben können.

In der Vorlesung ist Ihnen die Ableitung $\hat{p} := \frac{1}{i}\frac{d}{dx}$ als Operationsvorschrift "nimm die Ableitung und multipliziere das Ganze mit $-i$" begegnet. Die Ableitung kann man natürlich nur von etwas nehmen das man auch ableiten kann. Eine geknickte Funktion, beispielsweise, können Sie nicht überall ableiten: was wäre denn die Ableitung beim Knick? Um hier weiterzukommen muss der Definitionsbereich, also die Menge von Funktionen, auf der die Operationsvorschrift auch definiert ist, angegeben werden. Im vorliegenden Fall sollten die Funktionen mindestens differenzierbar sein. Dazu können weitere Einschränkungen gegeben sein, etwa in Form von Randwerten.

Operator Ein linearer Operator ist ein Tupel $(\hat{A}, D_A)$ wobei $\hat{A}$ ein Homomorphismus $\hat{A} : D_A \to \mathcal{H}'$ und $D_A \subseteq \mathcal{H}$ sein Definitionsbereich. Ein linearer Operator $(\hat{A}, D_A)$ heißt linear-beschränkt genau dann wenn er auf D_A beschränkt ist. Ein linearer Operator $(\hat{A}, D_A)$, nicht unbedingt beschränkt, heisst linear, dicht definiert, genau dann wenn D_A dicht in $\mathcal{H}$.

Da wir hier nur Homomorphismen betrachten ist D_A ein Vektorraum, hier immer ein Unterraum eines Hilbertraums $\mathcal{H}$. Die Operatornorm lässt sich bestimmen,

$$\|\hat{A}\| := \sup_{\|\psi\|=\|\phi\|=1} |\langle \phi, \hat{A}\psi\rangle \qquad \text{wobei } \psi \in D_A \text{ aber } \phi \in \mathcal{H}. \tag{41}$$

Ist $\|\hat{A}\| < \infty$ so ist $\hat{A}$ auf D_A beschränkt. Andernfalls ist $\hat{A}$ auf D_A unbeschränkt.

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.

Bild und Rang Das Bild eines linearen Operators $(\hat{A}, D_A)$ ist die Menge $R_A := \{\hat{A}\psi | \psi \in D_A\} \subseteq \mathcal{H}'$. Der Rang eines linearen Operators ist die Dimension des Bildraums $\dim R_A$.

Da D_A Vektorraum ist das Bild, genannt Wertebereich, auch ein Vektorraum. Im angelsächsischen Sprachraum heißt das Bild *range*, was man nicht mit dem deutschen Rang des Operators verwechseln darf – der heißt im angelsäsischen *rank*.

Eigenwert Für einen linearen Operator $(\hat{A}, D_A)$ heisst $\psi \in D_A$ Eigenvektor zum Eigenwert $\lambda \in \mathbb{C}$ wenn $\hat{A}\psi = \lambda\psi$ für $\psi \neq o$. Sofern es zu einem Eigenwert mehrere linear unabhängige Eigenwektoren gibt, so heißt der Eigenwert λ entartet.

Zwei Operatoren $(\hat{A}, D_A)$ und $(\hat{B}, D_B)$ heißen gleich wenn sie in ihren Operationvorschriften übereinstimmen, $\hat{A} = \hat{B}$, und in ihren Definitionsbereichen, $D_A = D_B$. Im Hilbertraum ist das äquivalent "… wenn sie in allen ihren bildbaren Matrixelementen übereinstimmen", und das ist wiederum äquivalent "… wenn sie in allen ihren Erwartungswerten übereinstimmen".

Festzuhalten bleibt, dass ein Operator durch 2 Dinge spezifiziert wird: die Abbildungsvorschrift $\hat{A}$ und insbesondere den Definitionsbereich D_A. Wird – bei gleicher Abbildungsvorschrift – der Definitionsbereich geändert, erhält man einen i.A. anderen Operator.

Ein kleines Beispiel. Wir betrachten die Ableitungsvorschrift $\hat{p} := \frac{1}{i}\frac{d}{dx}$ auf zwei verschiedenen Definitionsbereichen, $D_p^{(0,2\pi)} := \{\psi \in \mathcal{C}^1(0,2\pi) | \psi(0) = \psi(2\pi) = 0\}$ und $D_p^{\text{per}} := \{\psi \in \mathcal{C}^1(0,2\pi) | \psi(0) = \psi(2\pi)\}$. Das Eigenwertproblem $\hat{p}\psi = k\psi$ hat auf $D_p^{(a,b)}$ keine Lösung, auf D_p^{per} aber Lösungen $\psi \propto e^{ikx}$, $k = 0, \pm 1, \ldots$. Offensichtlich ist also "$\hat{p}$ auf D_p^{per}" ein ganz anderer Operator als "$\hat{p}$ auf $D_p^{(0,2\pi)}$": der eine hat Eigenwerte, der andere hat keine.

Hat man einen Operator $(\hat{A}, D_A)$ lassen sich sich ihm andere Operatoren für besondere Zwecke zuordnen: der Inverse (falls existiert) und der Adjungierte.

Inverser Operator Ist $\hat{A} : D_A \to R_A$ injektiv, so existiert eine Umkehrung

$$\hat{A}^{-1} : R_A \to D_A \tag{42}$$

genannt inverser Operator, mit

$$\hat{A}^{-1}\hat{A} = \hat{1}_{D_A} \,. \tag{43}$$

Für alle $\phi \in R_A$, $\phi = \hat{A}\psi$, gilt $\hat{A}\hat{A}^{-1}\phi = \hat{A}\hat{A}^{-1}\hat{A}\psi = \hat{A}\psi = \phi\rangle$, und also

$$\hat{A}\hat{A}^{-1} = \hat{1}_{R_A} \,. \tag{44}$$

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.

Beim Aufsuchen des Inversen ist der Definitionsbereich wichtig. Wir betrachten wieder einmal $\hat{p} := \frac{1}{i}\frac{d}{dx}$, zunächst auf $D_p = \mathcal{C}^1(0,1)$. Weil hier die nicht-triviale Funktion $x \mapsto c$ mit $c \neq 0$ irgendeinte Konstante auf die Null-Funktion abgebildet wird, ist $\hat{p}$ auf $\mathcal{C}(0,1)$ nicht injektiv, also leider nicht invertierbar. Wählt man allerdings als Definitionsbereich $D_p = \{\psi \in \mathcal{C}^1(0,1) | \psi(0) = \psi(1) = 0\}$, schließt also die problematische Funktion von Anfang an aus, kann $\hat{p}$ invertiert werden. Denn mit $\chi = \psi'$ ist doch zunächst $\psi(x) = \int_0^x \chi(t)dt + c$. Wegen $\psi(0) = 0$ ist $c = 0$, und wegen $\psi(1) = 0$ ist halt $\int_0^1 \chi(t)dt = 0$. Der Bildbereich von $\hat{p}$ auf D_p ist also $R_p = \{\chi \in \mathcal{C}(0,1) | \int_0^1 \chi(x)dx = 0$. Damit kann der Inverse spezifiziert werden, $\hat{p}^{-1} : R_p \to D_p$, $\chi \mapsto \int_0^x \chi(t)dt$.

Adjungierter Operator Für einen linearen , dicht definierten Operator $(\hat{A}, D_A)$ ist durch

$$\langle \hat{A}^\dagger \phi, \psi \rangle := \langle \phi, \hat{A}\psi \rangle \tag{45}$$

ein Operator $(\hat{A}^\dagger, D_{A^\dagger})$ erklärt, dessen Definitionsbereich $D_{A^\dagger}$ genau die ϕ umfasst, für die ein $\tilde{\phi} = \hat{A}^\dagger\phi$ existiert mit $\langle \phi, \hat{A}\psi \rangle = \langle \tilde{\phi}, \psi \rangle$ für alle $\psi \in D_A$.

Die Beschreibung des Definitionsbereiches der Adjungierten mutet etwas umständlich an. In der Tat ist es eine meist etwas kitzlige Sache, diesen Bereich genau zu identifizieren.

Beispiel Wir betrachten $\hat{p} := \frac{1}{i}\frac{d}{dx}$ auf $D_p = \{\psi \in \mathcal{C}^1(0,1)|\psi(0) = \psi(1) = 0\} \subset \mathcal{L}^2([0,1], dx)$. Partielle Integration $\langle\phi, \hat{p}\psi\rangle = [\phi^*(1)\psi(1) - \phi^*(0)\psi(0)] + \langle\hat{p}\phi, \psi\rangle$. Wegen $\psi(0) = \psi(1) = 0$ verschwindet der Randterm – egal welche Werte die ϕ dort annehemen! Die Menge der ϕ für die alles wohldefiniert ist, ist also sicherlch grösser als D_p. Natürlich muss für jedes $\psi \in D_p$ das Funktional $\langle\hat{p}\phi, \psi\rangle$ existieren. Das heisst aber nicht, dass ϕ unbedingt überall differenzierbar sein muss – schließlich erscheint $\hat{p}\phi$ unter dem Schutz eines Integrals. Zumindest aus $\mathcal{L}^2$ sollte es allerdings sein, und ϕ sollte doch zumindest fast überall differenzierbar sein. Formuliert man das ganze mathematisch, mit δs und εs usw, ergibt sich der Definitionsbereich für den Adjungierten $D_{p^\dagger} = \{\phi \in \mathcal{C}(0,1)|\phi \text{absolut stetig mit} \phi' \in \mathcal{L}^2([0,1], dx)\}$.

In unserem Beispiel ist gilt zwar $D_p \neq D_p^\dagger$, genauer $D_p \subset D_p^\dagger$, aber doch zumindest $\langle\hat{p}\phi, \psi\rangle = \langle\phi, \hat{p}\psi\rangle$ für alle $\psi, \phi \in D_p$. Man sagt $(\hat{p}, D_p)$ sei ein

Symmetrischer Operator Ein lineare, dicht definierter Operator $(\hat{A}, D_A)$ heißt symmetrisch, wenn

$$\langle\hat{A}\phi, \psi\rangle = \langle\phi, \hat{A}\psi\rangle \quad \text{für alle } \phi, \psi \in D_A \tag{46}$$

Symmetrische Operatoren sind dadurch ausgezeichnet dass ihre Erwartungswerte samt und sonders rell sind.

Allerdings hat der adjungierte in unserem Beispiel, wie schon gesagt, einen etwas größeren Definitionsbereich. Dahinter verbirgt sich der wichtige

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

$$D_{A^\dagger} \supseteq D_A\,. \tag{47}$$

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 Ein linearer, dicht definierter Operator $(\hat{A}, D_A)$ heißt selbstadjungiert, auch hypermaximal-symmetrisch, wenn $\hat{A} = \hat{A}^\dagger$ symmetrisch und $D_A = D_A^\dagger$, kurz

$$\langle\hat{A}\phi, \psi\rangle = \langle\phi, \hat{A}\psi\rangle \quad \text{für alle } \phi, \psi \in D_A = D_{A^\dagger} \tag{48}$$

Ist $\hat{A}$ auf ganz $\mathcal{H}$ definiert, dort beschränkt und symmetrisch, heißt $\hat{A}$ *hermitesch.*

In den Lehrbüchern der Physik werden symmetrische Operatoren meist hermitesch genannt. Auch wird nicht zwischen symmetrischen und selbstadjungierten unterschieden. Bezüglich der bildbaren Matrixelemente ist da ja auch kein Unterschied. Allerdings sollte man zumindest einmal in seinem Leben den kleinen aber feinen Unterschied zwischen Selbstdajungiert und Symmetrisch gewürdigt haben.

Dazu ein kleines Beispiel für einen Operator der sowohl symmetrisch als auch selbstadjungiert. Wir betrachten $\hat{p} := \frac{1}{i}\frac{d}{dx}$ auf $D_p := \{\psi \in \mathcal{C}^1(a,b)|\psi(a) = \psi(b)\}$. In diesem Fall ist der adjungierte $\hat{p}^\dagger = \hat{p}$ auf $D_{p^\dagger} = D_p$, also selbstadjunigert.

4 Kets and Bras and Rock'n Roll

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 $|\psi\rangle, |\phi\rangle \in \mathcal{H}$ legen wir fest:

$$\langle\psi|\phi\rangle := \langle\psi, \phi\rangle\,. \tag{49}$$

Lies: "Bra(c)ket" dt. Klammer.[8] Das "c" in der Mitte ist der beim Zusammenkleben von $\langle\phi|$ und $|\psi\rangle$ verbleibende senkrechte Strich. Der andere wurde beim Zusammenkleben kassiert.

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

$$|\psi\rangle^\dagger = \langle\psi|\,, \quad \langle\psi|^\dagger = |\psi\rangle\,. \tag{50}$$

Die Abbildung † ist *antiunitär*.

Für die Vorlesung ist die folgende Übersetzungstabelle in die Bra(c)ket Sprache nützlich:

$$\begin{array}{c|c} \hat{A}\psi & \hat{A}|\psi\rangle \\ \langle\phi, \hat{A}\psi\rangle & \langle\phi|\hat{A}|\psi\rangle \\ \langle\hat{A}^\dagger\phi, \psi\rangle & \langle\psi|\hat{A}^\dagger|\phi\rangle^* = \langle\phi|\hat{A}|\psi\rangle \end{array} \tag{51}$$

Den Bra $\langle\hat{A}^\dagger\phi| \equiv \left(\hat{A}|\phi\rangle\right)^\dagger$ dürfen wir auch schreiben $\langle\hat{A}^\dagger\phi| = \langle\phi|\hat{A}$. In der Bra(c)ket Syntax können dann immer alle Skalarprodukte als Butterbrot $\langle\phi|\hat{O}|\psi\rangle$ geschrieben werden wobei der Operator $\hat{O}$ die Rolle der Butter spielt.

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

$$\langle\phi|\hat{A} \;=\; \langle\phi|\hat{A}\hat{1}_{D_A} \;=\; \sum_n \langle\phi|\hat{A}|n\rangle\langle n| \restriction D_A \tag{52}$$

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

$$\sum_n \langle\phi|\hat{A}|n\rangle\langle n| \tag{53}$$

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

$$\sum_n |\langle\phi|\hat{A}|n\rangle|^2 < \infty\,. \tag{54}$$

Folglich gilt:

$$D_{A^\dagger} \;:=\; \{\,|\phi\rangle \in \mathcal{H}|\sum_n |\langle\phi|\hat{A}|n\rangle|^2 < \infty\,\}\,. \tag{55}$$

[8] Die Notation geht auf Dirac zurück. Die MathematikerInnen konnten sich mit ihr nie so recht anfreunden. Wahrscheinlich weil sie einfach so genial ist, dass mit ihr auch so einige kleine Schweinereien hingeschrieben werden können, ohne dass es weiter auffällt. Wie etwa $\langle x|x'\rangle = \delta(x - x')$, wobei man so tut als seien $|x\rangle$ und $\langle x'| = (|x\rangle)^\dagger$ Hilbertraumvektoren, was sie aber nicht sind. Macht nichts – mit ein bischen Gefühl für den Kalkül funktionieren Dirac's Bras und Kets ganz hervorragend ...

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

$$\begin{aligned} \hat{A}^\dagger|\phi\rangle &= \sum_n |n\rangle\langle n|\hat{A}^\dagger|\phi\rangle & (56)\\ &= \sum_n \Big((\hat{A}^\dagger|\phi\rangle)^\dagger|n\rangle\Big)^* |n\rangle & (57)\\ &= \sum_n \langle\phi|\hat{A}|n\rangle^*|n\rangle\,. & (58)\end{aligned}$$

Schließlich vergewissern wir uns, dass die Bra(c)ket Syntax mit unseren Erfahrungen mit endlich-dimensionalen Hilberträumen gut zusammenpasst. Für $|\phi\rangle \in D_{A^\dagger}$ und $|\psi\rangle \in D_A$ gilt:

$$\langle\psi|\hat{A}^\dagger|\phi\rangle = \langle\phi|\hat{A}|\psi\rangle^*\,. \tag{59}$$

Für die Matritzen gilt dann:

$$A^\dagger = A^{*T}\,. \tag{60}$$

4.1 Unitäre Operatoren

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

$$\begin{aligned} \Big(\hat{U}^\dagger\hat{U}|\phi\rangle\Big)^\dagger |\psi\rangle &= \Big(\hat{U}|\phi\rangle\Big)^\dagger \hat{U}|\psi\rangle \quad \text{def. } \hat{U}\\ &= (|\phi\rangle)^\dagger\,|\psi\rangle\,, \qquad \text{Isometrie}\end{aligned} \tag{61}$$

und somit

$$\hat{U}^\dagger\hat{U} = \hat{1}\,. \tag{62}$$

also

$$\hat{U}^\dagger = \hat{U}^{-1}\,, \tag{63}$$

und damit auch

$$\hat{U}\hat{U}^\dagger = \hat{1}\,. \tag{64}$$

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

$$\Big(\hat{A}^\dagger|\phi\rangle\Big)^\dagger \hat{A}|\psi\rangle = \langle\phi|\hat{A}\hat{A}^\dagger|\psi\rangle = \langle\phi|\psi\rangle\,. \tag{65}$$

Der Operator $\hat{A}^\dagger$ ist also isometrisch und damit insbesondere injektiv, da normerhaltend. Gilt zusätzlich $\hat{A}^\dagger\hat{A} = \hat{1}$, 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, $\hat{A}^\dagger\hat{A} = \hat{1}$ und $\hat{A}\hat{A}^\dagger = \hat{1}$, zu prüfen, wie das folgende kanonische Gegenbeispiel zeigt, eine Variante von *Hilberts 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

$$\hat{A}|n\rangle = |n+1\rangle\,. \tag{66}$$

Dann ist leicht zu zeigen, dass

$$\hat{A}^\dagger|n\rangle = \begin{cases} o & \text{für } n = 1\\ |n-1\rangle & \text{sonst.}\end{cases} \tag{67}$$

Offenbar ist $\hat{A}^\dagger \hat{A} = \hat{1}$, 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?"