

## 6. Die Hilbertraum-Struktur der Quantenmechanik

Wir beginnen mit einem weiteren Beispiel zur Adjungiertenbildung, das für uns im folgenden sehr nützlich sein wird.

### Beispiel 6.1

Wir definieren die folgende Teilmenge von  $L^2(\mathbb{R})$ , wobei die  $e_n, n \in \mathbb{N}_0$  wiederum die normierten Hermite-Funktionen bedeuten:

$$\Omega := \left\{ \psi = \sum_{n=0}^{\infty} c_n e_n \mid \sum_{n=0}^{\infty} |c_n|^2 n < \infty \right\} \quad (242)$$

Weiterhin definieren wir den Operator  $a$  durch

$$a : D(a) := \Omega \rightarrow L^2(\mathbb{R}) \quad (243)$$

$$a\psi = a \sum_{n=0}^{\infty} c_n e_n := \frac{1}{\sqrt{2}} \sum_{n=0}^{\infty} c_n A e_n = \sum_{n=0}^{\infty} c_n \sqrt{n} e_{n-1} \quad (244)$$

Dann gilt insbesondere

$$\forall m, n \in \mathbb{N}_0 : (a e_m, e_n) = (e_m, a^* e_n) \quad (245)$$

und wir erhalten hieraus für die Wirkung von  $a^*$  auf die normierten Hermite-Funktionen

$$a^* e_n = \sqrt{n+1} e_{n+1} = \frac{1}{\sqrt{2}} S e_n \quad (246)$$

Wir wollen als erstes zeigen, dass

$$y \in D(a) \Rightarrow y \in D(a^*) \quad (247)$$

Es sei  $y = \sum_{m=0}^{\infty} \gamma_m e_m \in D(a)$ . Offensichtlich gilt für alle  $\psi \in D(a) = \Omega$ :

$$a^* \psi = a^* \sum_{n=0}^{\infty} c_n e_n = \frac{1}{\sqrt{2}} \sum_{n=0}^{\infty} c_n \sqrt{n+1} e_{n+1} \quad (248)$$

Man kann sich leicht davon überzeugen, dass  $a^* \psi = a^* \sum_{n=0}^{\infty} c_n e_n$  wieder in  $L^2(\mathbb{R})$  liegt, denn es gilt

$$\sum_{n=0}^{\infty} |c_n|^2 (n+1) = \sum_{n=0}^{\infty} n |c_n|^2 + \sum_{n=0}^{\infty} |c_n|^2 \quad (249)$$

Der erste Summand auf der rechten Seite existiert, da  $\psi$  nach Voraussetzung in  $\Omega$  ist. Der zweite Summand auf der rechten Seite existiert, da  $\psi$  auch in  $L^2(\mathbb{R})$  ist. D.h. wir haben  $y \in D(a) \Rightarrow y \in D(a^*)$  gezeigt.

Wir zeigen im folgenden, dass in diesem Beispiel in der Tat  $D(a) = D(a^*)$  gilt. Sicherlich gilt nach unseren obigen Ausführungen  $D(a^*) \neq \{ \}$ , denn die normierten

Hermite-Funktionen liegen ja bereits in  $D(a^*)$ . Es sei also  $y = \sum_{n=0}^{\infty} \gamma_n e_n \in D(a^*)$ . Dann existiert ein  $z \in E = L^2(\mathbb{R})$ , so dass

$$\forall x \in D(a) : \quad (ax, y) = (x, z) \quad (250)$$

Wählen wir jetzt  $x = \sum_{n=0}^{\infty} c_n e_n$  beliebig, aber fest, so erbringt die letzte Gleichung

$$\left( a \sum_{n=0}^{\infty} c_n e_n, \sum_{m=0}^{\infty} \gamma_m e_m \right) = \left( \sum_{n=0}^{\infty} c_n e_n, z \right) \quad (251)$$

Wir zeigen, dass diese Beziehung durch

$$z := \sum_{m=0}^{\infty} \gamma_m S e_m \quad (252)$$

erfüllt werden kann, wobei als Forderung  $z \in \Omega$  gelten muss. Setzt man  $z$  aus (252) in (251) ein, so erhält man

$$\left( a \sum_{n=0}^{\infty} c_n e_n, \sum_{m=0}^{\infty} \gamma_m e_m \right) = \left( \sum_{n=0}^{\infty} c_n e_n, \sum_{m=0}^{\infty} \gamma_m S e_m \right) \quad (253)$$

Dies kann geschrieben werden als

$$\left( \sum_{n=0}^{\infty} c_n \sqrt{n} e_{n-1}, \sum_{m=0}^{\infty} \gamma_m e_m \right) = \left( \sum_{n=0}^{\infty} c_n e_n, \sum_{m=0}^{\infty} \gamma_m \sqrt{m+1} e_{m+1} \right) \quad (254)$$

Führt man die beiden Skalarprodukte aus, so bedeutet dies

$$\sum_{n=0}^{\infty} \sum_{m=0}^{\infty} c_n \sqrt{n} \gamma_m \delta_{n-1,m} = \sum_{m=0}^{\infty} \sum_{n=0}^{\infty} c_n \sqrt{m+1} \gamma_m \delta_{n,m+1} \quad (255)$$

Verrechnen der Kronecker- $\delta$ -Symbole macht (255) zu

$$\sum_{n=0}^{\infty} c_n \sqrt{n} \gamma_{n-1} = \sum_{n=0}^{\infty} c_n \sqrt{n} \gamma_{n-1} \quad (256)$$

was offensichtlich eine richtige Aussage ist. Fassen wir diese Rechnungen zusammen, so erkennen wir:

$y = \sum_{m=0}^{\infty} \gamma_m e_m$  ist genau dann in  $D(a^*)$ , sofern der Ausdruck  $z = \sum_{m=0}^{\infty} \gamma_m S e_m$  in  $L^2(\mathbb{R})$  ist. In diesem Fall gilt

$$a^* y = a^* \sum_{m=0}^{\infty} \gamma_m e_m = z = \sum_{m=0}^{\infty} \gamma_m \sqrt{m+1} e_{m+1} \quad (257)$$

$z \in L^2(\mathbb{R})$  bedeutet hierbei, dass  $\sum_{m=0}^{\infty} |\gamma_m|^2 (m+1) < \infty$ . Dies ist wegen  $y = \sum_{m=0}^{\infty} \gamma_m e_m \in L^2(\mathbb{R})$  äquivalent zu der Forderung

$$\sum_{m=0}^{\infty} |\gamma_m|^2 m < \infty \quad (258)$$

Wir stellen abschließend die Frage, ob für dieses  $y = \sum_{m=0}^{\infty} \gamma_m e_m$  auch der Ausdruck  $ay$  erklärt ist und in  $L^2(\mathbb{R})$  liegt. Offensichtlich liegt  $y$  wegen (258) in  $\Omega \subseteq L^2(\mathbb{R})$  und damit in  $D(a) = \Omega \subseteq L^2(\mathbb{R})$ . D. h. wir haben insgesamt gezeigt, dass

$$y \in D(a^*) \Rightarrow y \in D(a) \quad (259)$$

Mit der in (247) fortfolgend bis (249) bewiesenen Umkehrrichtung zu (259) gilt schließlich

$$D(a) = D(a^*) = \Omega, \quad (260)$$

was wir behauptet hatten.

Offensichtlich sind die Operatoren  $a$  und  $a^*$  - bis auf Normierung - eng mit den Operatoren  $A$  und  $S$  aus dem dritten Kapitel verwandt. Konkret gilt für die Wirkung auf die normierten Hermite-Funktionen

$$\forall n \in \mathbb{N}_0 : \quad Ae_n = \sqrt{2} ae_n = \sqrt{2n} e_{n-1} \quad (261)$$

$$\forall n \in \mathbb{N}_0 : \quad Se_n = \sqrt{2} a^* e_n = \sqrt{2n+2} e_{n+1} \quad (262)$$

Der wichtigste Unterschied ist aber derjenige der Definitionsbereiche: Der Definitionsbereich für  $A$  bzw. für  $S$  war lediglich der endliche komplexe Spann aller Hermite-Funktionen, während der Definitionsbereich für  $a$  und  $a^*$  weit größer ist, siehe (242) und (260).

Wir fassen abschließend die Relationen zwischen den Operatoren  $a, a^*$  und den normierten Hermite-Funktionen noch einmal zusammen:

$$\forall n \in \mathbb{N}_0 : \quad ae_n = \sqrt{n} e_{n-1} \quad a^* e_n = \sqrt{n+1} e_{n+1} \quad (263)$$

$$\forall n \in \mathbb{N}_0 : \quad (aa^* - a^*a)e_n = e_n \quad (264)$$

und entsprechend gilt auf der Menge

$$\Delta := \{\psi \in L^2(\mathbb{R}) \mid a\psi \in D(a^*), \quad a^*\psi \in D(a)\} \quad (265)$$

die **Oszillator-Vertauschungsrelation**

$$aa^* - a^*a = 1 \quad (266)$$

im Sinne von  $\forall \psi \in \Delta : aa^*\psi - a^*a\psi = \psi$ .

Im Falle endlichdimensionaler symmetrischer quadratischer Matrizen ist bekannt, dass zwei Matrizen  $A, B \in \mathbb{R}^{n \times n}$  mit jeweils paarweise verschiedenen Eigenwerten genau dann die Beziehung

$$AB - BA = 0 \quad (267)$$

erfüllen, wenn sie auch gemeinsame Eigenvektoren haben. Wir geben im folgenden ein ähnliches Resultat in  $L^2(\mathbb{R})$ .

### Definition 6.2

Es sei  $A : D(A) \subseteq L^2(\mathbb{R}) \rightarrow L^2(\mathbb{R})$  linearer Operator auf seinem Definitionsbereich  $D(A)$ . Wir bezeichnen mit

$$K(A) := \{T : D(A) \subseteq L^2(\mathbb{R}) \rightarrow L^2(\mathbb{R}) \mid T = A - \lambda I, \lambda \in \sigma_p(A)\}$$

$$K(A) := \{ \} \Leftrightarrow \sigma_p(A) = \{ \}$$

$$\text{Eig}(A) := \{v \in D(A) \mid \exists T \in K(A) : Tv = 0\}$$

### Lemma 6.3

Es seien  $A, B$  lineare Operatoren auf ihren Definitionsbereichen in  $L^2(\mathbb{R})$  mit

$$\forall \psi \in C := \{v \in L^2(\mathbb{R}) \mid Av \in D(B), Bv \in D(A)\} : (AB - BA)\psi = 0 \quad (268)$$

Falls  $K(A), K(B) \neq \{ \}$  und  $\text{Eig}(A) \subseteq C$  sowie  $\text{Eig}(B) \subseteq C$  und alle Elemente  $T$  aus  $K(A), K(B)$  einen eindimensionalen Kern  $N(T)$  besitzen, so gilt  $\text{Eig}(A) = \text{Eig}(B)$ . Hierbei verstehen wir unter dem Kern eines linearen Operators  $T : D(T) \subseteq L^2(\mathbb{R}) \rightarrow L^2(\mathbb{R})$  den  $\mathbb{C}$ -Vektorraum  $N(T) := \{u \in L^2(\mathbb{R}) \mid Tu = 0\}$ .

### Beweis

Wir nehmen an, es sei  $v \in \text{Eig}(A)$ . d. h. es gebe ein  $\lambda \in \mathbb{C}$ , so dass

$$Av = \lambda v \quad (269)$$

Dann gilt wegen  $v \in C$  auch

$$BAv = \lambda Bv \Leftrightarrow ABv = \lambda Bv \quad (270)$$

Die Tatsache, dass die Elemente von  $K(A)$  alle eindimensionalen Kern haben sollen, bedeutet jetzt folgendes: Mit der ursprünglichen Gleichung  $Av = \lambda v$  folgt aus der Gleichung

$$(A - \lambda I)Bv = 0 \quad (271)$$

die Existenz einer Zahl  $\mu \in \mathbb{C}$ , so dass

$$Bv = \mu v \quad (272)$$

Dies bedeutet aber gerade, dass  $v$  auch Eigenvektor von  $B$  ist. Der gleiche Beweis kann geführt werden, wenn man anstelle von  $B$  mit dem Operator  $A$  beginnt. D.h. unter den getroffenen Voraussetzungen gilt

$$\text{Eig}(A) = \text{Eig}(B),$$

was zu zeigen war.

### Beispiel 6.4

Wir betrachten die Operatoren  $H_1 := a^*a$  und  $H_2 := aa^*$ , wobei  $a$  und  $a^*$  wie zu Beginn dieses Kapitels definiert sein sollen. Im Detail soll gelten

$$D(H_1) := \{\psi \in D(a) \mid a\psi \in D(a) = D(a^*)\} \quad (273)$$

und  $D(H_2)$  analog. Nach unseren bisherigen Ausführungen wissen wir, dass  $\sigma_p(H_1) = \mathbb{N}_0$  und  $\sigma_p(H_2) = \mathbb{N}$ . Dementsprechend ist

$$K(H_1) = \{T_n = H_1 - nI \mid n \in \mathbb{N}_0\} \quad (274)$$

und  $K(H_2)$  analog. Entsprechend wird auch die Menge  $C$  wie in Lemma 6.3 konstruiert. Nach dem Existenz- und Eindeutigkeitssatz, Theorem 4.4, folgt, dass die Elemente von  $K_1$  und  $K_2$  eindimensionalen Kern haben. Damit sind die Voraussetzung von Lemma 6.3 erfüllt und es gilt

$$\text{Eig}(H_1) = \text{Eig}(H_2),$$

und in der Tat, die Hermite-Funktionen sind die gemeinsamen - und einzigen - Eigenvektoren von  $H_1$  und  $H_2$ . Beachte jedoch, dass das Punktspektrum von  $H_1$  größer als das von  $H_2$  ist!

Wir zitieren im folgenden ohne Beweis drei wichtige Sätze aus der Funktionalanalysis, siehe z. B. [He], die für das Verständnis des abstrakten Hilbertraums wichtig sind.

### Theorem 6.5 Isomorphiesatz separabler Hilberträume

Es sei  $E$  ein unendlichdimensionaler  $\mathbb{C}$ -Hilbertraum mit Skalarprodukt  $(*, *)_E$ . Falls es eine höchstens abzählbare Menge gibt, die dicht in  $E$  liegt, so existiert eine bijektive lineare Abbildung  $J : E \rightarrow l^2$ , so dass

$$\forall u, v \in E : (u, v) = \langle Ju | Jv \rangle \quad (275)$$

wobei  $\langle * | * \rangle$  das Standardskalarprodukt in  $l^2$  bedeutet.

### Bemerkung

Wir nennen einen unendlichdimensionalen  $\mathbb{C}$ -Hilbertraum **separabel**, falls eine höchstens abzählbare Menge existiert, die dicht in ihm liegt. Das Theorem besagt, dass jeder separable unendlichdimensionale  $\mathbb{C}$ -Hilbertraum normisomorph zu  $l^2$  ist.

Dieses Theorem bedeutet für die Quantenmechanik letztlich, dass das Studium der Schrödinger-Gleichung sowohl in  $L^2(\mathbb{R})$  durchgeführt werden kann, das ist die sogenannte **Schrödinger-Wellenmechanik**, als auch in  $l^2$ , das ist die sogenannte **Heisenberg-Matrizenmechanik**.

Wir betrachten zur Illustration

$$E := \left\{ \sum_{n=0}^{\infty} c_n e_n \mid \sum_{n=0}^{\infty} |c_n|^2 < \infty, c_n \in \mathbb{C} \right\}, \quad (276)$$

wobei die  $e_n, n \in \mathbb{N}_0$  die normierten Hermite-Funktionen bedeuten.  $E$  ist ein unendlichdimensionaler separabler  $\mathbb{C}$ -Hilbertraum und es existiert nach Theorem 6.5 eine bijektive lineare Abbildung  $J : E \rightarrow l^2$ , so dass

$$\forall m, n \in \mathbb{N}_0 : (e_n, e_m) = \langle J e_n \mid J e_m \rangle \quad (277)$$

Beachten wir, dass bereits die Menge aller endlicher Linearkombinationen aus  $E$  nach Theorem 4.2 dicht in  $L^2(\mathbb{R})$  liegt, so verdeutlicht dieses Beispiel den engen Zusammenhang zwischen  $L^2(\mathbb{R})$  und  $l^2$ . Man führe sich hierbei noch einmal vor Augen, dass alle Funktionen  $\psi \in L^2(\mathbb{R})$ , die bereits auf allen endlichen Linearkombinationen der  $e_n$  orthogonal sind, gleich 0 sein müssen.

### Definition 6.6

Eine **Linearform** auf einem  $\mathbb{C}$ -Hilbertraum  $E$  ist eine  $\mathbb{C}$ -lineare Abbildung  $f : E \rightarrow \mathbb{C}$ . Wir nennen  $f$  stetig und beschränkt, sofern  $\sup_{x \in E \setminus \{0\}} \frac{|f(x)|}{\|x\|} < \infty$ .

Der folgende Satz zeigt einen tiefen Zusammenhang zwischen Skalarprodukt und Linearformen in einem Hilbertraum auf und ist die mathematische Grundlage für die **Dirac-Bra-Ket-Notation**.

### Theorem 6.7 Darstellungssatz von Fréchet-Riesz

Es sei  $E$  ein  $\mathbb{C}$ -Hilbertraum mit Skalarprodukt  $(*, *)_E$ . Dann wird für jedes feste Element  $z$  von  $E$  durch  $f(x) := (x, z)_E$  für alle  $x \in E$  eine stetige Linearform auf  $E$  definiert. Umgekehrt gibt es zu jeder stetigen Linearform  $f$  auf  $E$  genau einen Vektor  $z \in E$ , so dass  $f(x) = (x, z)_E$  für alle  $x \in E$  gilt.

Wir nennen den  $\mathbb{C}$ -Vektorraum  $E'$  der stetigen Linearformen auf  $E$  den **Dualraum** oder das **Dual** zu  $E$ . Es seien  $f, g \in E'$ . Dann existieren eindeutige Elemente  $z_f, z_g \in E$ , die  $f, g$  durch die Vorschriften  $f(x) := (x, z_f)_E$ ,  $g(x) := (x, z_g)_E$  erzeugen. Durch  $(f, g)_{E'} := (z_f, z_g)_E$  können wir auf  $E'$  ein Skalarprodukt definieren und erhalten die nachstehende beachtliche Aussage:

### Theorem 6.8 Dualitätssatz

Jeder  $\mathbb{C}$ -Hilbertraum  $E$  ist normisomorph zu seinem Dual  $E'$ . D. h.  $E'$  ist wiederum ein  $\mathbb{C}$ -Hilbertraum.

Betrachten wir jetzt noch einmal die Situation der abgeschlossenen komplexen Spanns  $E$  aller normierten Hermite-Funktionen, definiert wie in (276). Es ist also gleich, ob man die Elemente von  $E$  der Bauart  $\psi = \sum_{n=0}^{\infty} c_n e_n$  studiert oder die zugehörigen Linearformen  $f = \sum_{n=0}^{\infty} c_n (e_n, *)$ .

Dies gibt die Möglichkeit in die Hand, das Skalarprodukt auf einem Hilbertraum auch noch völlig anders zu verstehen: Es ist nicht nur eine Paarung zweier Elemente aus  $E$ , sondern auch die Wirkung einer Linearform  $f$ :

$$(x, y)_E = f_x(y) \quad (278)$$

Betrachten wir z.B. den Raum  $l^2$ , so bedeutet dies: Die

#### **bilineare Paarung $\langle x|y \rangle$**

zweier Elemente  $x, y \in l^2$  kann auch interpretiert werden als

#### **Wirkung einer Linearform $\langle x|*$ auf den Vektor $y$**

Der Tatsache, dass auch hier wiederum Element und Linearform zwei Seiten ein und derselben Medaille sind, trägt man im Hilbertraum  $l^2$  auch dadurch Rechnung, dass man verschiedene Schreibweisen wählt. Man bezeichnet die Elemente aus  $l^2$  von jetzt an mit  $|y\rangle$  und die Element seines Dualraums mit  $\langle x|$ . Die Wirkung der Linearform  $\langle x|$  auf das Element  $|y\rangle$  des Hilbertraums  $l^2$  ist gerade nach Fréchet-Riesz das Skalarprodukt von  $|x\rangle$  mit  $|y\rangle$ .

Die so gewählte Notation heisst auch

#### **Dirac-Bra-Ket-Notation      “Bra” $\langle u|$      “Ket” $|v\rangle$**

Wir führen diese Notationen im darstellungstheoretischen Teil der Vorlesung noch intensiver ein.

Mit diesen Ausführungen verlassen wir die eindimensionale Schrödinger-Theorie und arbeiten jetzt an den mathematischen Grundlagen der dreidimensionalen Theorie. Wie bereits im eindimensionalen Fall, wird hierbei speziellen Funktionen und zu einander paarweise orthogonalen Polynomen eine besondere Rolle zukommen. Diese Sorte spezieller Funktionen soll im nächsten Kapitel vorrangig behandelt werden.