Einige mathematische Grundlagen der Quantenmechanik

Es seien im Folgenden:

- V ein $\mathbb{K}$-Vektorraum;
- $\langle \cdot , \cdot \rangle$ ein Skalarprodukt, $V \times V \to \mathbb{K}$;
- $x, y, z \in V$;
- $\alpha, \beta \in \mathbb{K}$.

Definition: Es heißt V, versehen mit dem Skalarprodukt $\langle \cdot , \cdot \rangle$ <u>Prähilbertraum</u>, wenn gilt:

1.) $\langle x, \alpha y + \beta z \rangle = \alpha \langle x, y \rangle + \beta \langle x, z \rangle$,
2.) $\langle y, x \rangle = \langle x, y \rangle^*$,
3.) $\langle x, x \rangle > 0$ für $x \neq 0$.

Ein vollständiger Prähilbertraum heißt <u>Hilbertraum.</u>

Quantenmechanische Zustände sind Vektoren in einem Hilbertraum. Wir verwenden die Ket-Notation: $|\psi\rangle \in \mathcal{H}$.

Zu jedem Hilbertraum $\mathcal{H}$ existiert ein zugehöriger <u>Dualraum $\mathcal{H}^*$</u>, bestehend aus allen linearen Funktionalen $\mathcal{H} \to \mathbb{K}$. Für dessen Elemente verwendet man die Bra-Notation: $\langle \psi | \in \mathcal{H}^*$.

Man kann das Skalarprodukt auf $\mathcal{H}$ auffassen als ein Funktional $\mathcal{H} \to \mathbb{K}$, also als die Anwendung eines Objektes aus $\mathcal{H}^*$ auf ein Objekt aus $\mathcal{H}$. Daher schreibt man für das Skalarprodukt $\langle \psi_1 | \psi_2 \rangle$.

<u>Bem.:</u> Die mathematische Grundlage hierfür bildet der Satz von Fréchet-Riesz.

Bsp.: Der Raum $L^2(S)$ aller auf $S \subseteq \mathbb{R}^n$ quadratintegrablen Funktionen, also aller Funktionen f mit

$$\int_S |f|^2 \, d^n x < \infty ,$$

ist ein Hilbertraum. Das Skalarprodukt darauf ist definiert als

$$\langle f, g \rangle := \int_S f^*(x) \, g(x) \, d^n x .$$

Der zu $L^2(S)$ gehörige Dualraum ist wieder $L^2(S)$.

Satz: In jedem Hilbertraum gibt es ein vollständiges Orthonormalsystem $\{|n\rangle\}_{n=1}^{N}$.

Also: $\langle n | m \rangle = \delta_{nm}$, $\quad \sum_{n=1}^{N} |n\rangle\langle n| = \mathbb{1}$.

Jedes $|\psi\rangle \in \mathcal{H}$ kann in dieses System entwickelt werden:

$$|\psi\rangle = \sum_{n=1}^{N} c_n |n\rangle \quad \text{mit Fourier-Koeffizienten } c_n = \langle n | \psi \rangle .$$

Auf einem Hilbertraum können <u>Operatoren</u> wirken, also Objekte, die Elemente aus $\mathcal{H}$ wieder auf Elemente aus $\mathcal{H}$ abbilden.

Insbesondere sind physikalische Observablen durch selbstadjungierte Operatoren charakterisiert. Deren Spektrum (Eigenwerte) entspricht den möglichen Ergebnissen einer Messung.

Selbstadjungierte Operatoren und Spektralsatz

Es sei: A ein selbstadjungierter Operator, d.h. $A^\dagger = A$.

$$\left.\begin{aligned} A\,|\psi\rangle &= a\,|\psi\rangle \\ A\,|\psi\rangle &= A^\dagger\,|\psi\rangle = a^*\,|\psi\rangle \end{aligned}\right\}\quad a = a^*$$

=> Die Eigenwerte selbstadjungierter Operatoren sind reell.
Damit gilt für das Spektrum: $\sigma(A) \subset \mathbb{R}$.

<u>Spektralsatz</u>: Jeder selbstadjungierte Operator A auf einem Hilbertraum kann durch sein Spektralmaß E dargestellt werden:

$$A = \int \lambda \, dE(\lambda) \quad \text{mit} \quad \lambda \in \sigma(A).$$

Über den Spektralsatz definiert man auch, was es heißt, einen Operator in eine Funktion einzusetzen:

$$f(A) := \int f(\lambda)\, dE(\lambda).$$

<u>Bsp.:</u> Der Hamiltonoperator H des freien Teilchens mit Eigenzuständen $|\vec{k}\rangle$ und Eigenwerten $E_{\vec{k}} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$, $H|\vec{k}\rangle = E_{\vec{k}}|\vec{k}\rangle$, kann geschrieben werden als

$$H = \int d^3\vec{k}\; E_{\vec{k}}\, |\vec{k}\rangle\langle\vec{k}|.$$

Entsprechend gilt für Funktionen von H:

$$f(H) = \int d^3\vec{k}\; f(E_{\vec{k}})\; |\vec{k}\rangle\langle\vec{k}| .$$

Im Funktionalkalkül der Potentialstreuung braucht man beispielsweise die Resolvente $R_H(z)$ des Hamiltonoperators, definiert als

$$R_H(z) := (z - H)^{-1},$$

die man als Funktion von H auffassen kann, also:

$$R_H(z) = \int d^3\vec{k}\; \frac{1}{z - E_{\vec{k}}}\; |\vec{k}\rangle\langle\vec{k}| .$$

<u>Bem.:</u> Der Vollständigkeit halber seien an dieser Stelle relevante Definitionen vermerkt.

Sei: T ein Operator im Hilbertraum $\mathcal{H}$. Dann heißt

$$\varrho(T) := \{ z \in \mathbb{C} \mid (T - z\mathbb{1}) \text{ bijektiv mit stetiger Inversen} \}$$

die <u>Resolventenmenge von T</u> und

$$\sigma(T) := \mathbb{C} \setminus \varrho(T)$$

das <u>Spektrum von T</u>. Es heißt die Abbildung

$$\varrho(T) \to \text{beschränkte Operatoren auf } \mathcal{H}, \quad z \mapsto (T - z\mathbb{1})^{-1}$$

die <u>Resolvente</u>.

Unitäre Operatoren

Es sei: U ein unitärer Operator, d.h. $U^\dagger U = \mathbb{1}$.

$$\langle U\psi_1 | U\psi_2 \rangle = \langle \psi_1 | U^\dagger U \psi_2 \rangle = \langle \psi_1 | \psi_2 \rangle$$

$\Rightarrow$ Unitäre Operatoren lassen das Skalarprodukt und damit die Norm invariant. $\rightarrow$ Erhaltung der Gesamtwahrscheinlichkeit.

Bsp.:

- Fourier - Transformation
  Der Wechsel zwischen Orts- und Impulsraum darf das Messergebnis nicht ändern.

- Zeitentwicklung
  Die Gesamtwahrscheinlichkeit muss erhalten bleiben,
  $\langle \psi(t) | \psi(t) \rangle = \langle \psi(t_0) | U^\dagger(t_0,t)\, U(t_0,t) | \psi(t_0) \rangle \overset{!}{=} \langle \psi(t_0) | \psi(t_0) \rangle$.

- S-Matrix (später)
  Bei Streuung muss der Wahrscheinlichkeitsstrom erhalten sein und die Symmetrie bei Zeitumkehr realisiert werden.

Es seien U, V unitär. Dann gilt:

1.) $(UV)^\dagger UV = V^\dagger U^\dagger U V = V^\dagger V = \mathbb{1}$ $\rightarrow$ Das Produkt ist wieder unitär.
2.) $\mathbb{1} \cdot \mathbb{1}^\dagger = \mathbb{1}$ $\rightarrow$ Die Identität ist unitär.
3.) $(U^{-1})^\dagger U^{-1} = (U^\dagger)^{-1} U^{-1} = (UU^\dagger)^{-1} = \mathbb{1}$ $\rightarrow$ Das Inverse ist wieder unitär.

$\Rightarrow$ Unitäre Operatoren bilden eine Gruppe.