

II.2 Mathematisches Handwerkszeug

2.1 Vektorraum der quadratintegrierbaren Funktionen

Eine Funktion $f = f(x)$ heißt quadratintegrierbar, wenn das Integral von $-\infty$ bis $+\infty$ einen endlichen Wert hat:

$$\int_{-\infty}^{\infty} |f(x)|^2 dx < \infty \quad (1)$$

Für eine einfache Notation betrachten wir zunächst Funktionen einer Variable x , wobei x die x-Koordinate einer 1-dimensionalen Bewegung bezeichnet (z.B. Ort eines Teilchens bei Bewegung längs der x-Achse).

Beispiele für quadratintegrierbare Funktionen:

$$f(x) = e^{-ax^2}, \quad a > 0, \quad \int_{-\infty}^{\infty} e^{-2ax^2} dx = \sqrt{\frac{\pi}{2a}}$$

$$g(x) = (2x^2 - 3x + 1)e^{-ax^2}$$

$$d(x) = \frac{1}{x^2 + 1}$$

$$h(x) = e^{ikx} e^{-ax^2}$$

Die Menge der quadratintegrierbaren Funktionen bildet einen **Vektorraum**.

Rekapitulation: Vektorräume

Beispiele:

$$\mathbb{R}^3 : \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix} \quad x_i \in \mathbb{R} \quad (2)$$

$$\mathbb{R}^n : \begin{pmatrix} x_1 \\ \vdots \\ x_n \end{pmatrix} \quad x_i \in \mathbb{R} \quad (3)$$

$$\mathbb{C}^n : \begin{pmatrix} x_1 \\ \vdots \\ x_n \end{pmatrix} \quad x_i \in \mathbb{C} \quad (4)$$

Addition von Vektoren:

$$\vec{v} + \vec{w} = \begin{pmatrix} v_1 + w_1 \\ \vdots \\ v_n + w_n \end{pmatrix} \quad (5)$$

Skalarmultiplikation:

$$\alpha \vec{v} = \begin{pmatrix} \alpha v_1 \\ \vdots \\ \alpha v_n \end{pmatrix} \quad (6)$$

VR1: Vektoraddition

Für die Elemente \vec{v} einer Menge \mathbf{V} gelte:

1. Existenz u. Eindeutigkeit: $\vec{v}, \vec{w} \in \mathbf{V} \Rightarrow \vec{v} + \vec{w} \in \mathbf{V}$
Addition kommutativ: $\vec{v} + \vec{w} = \vec{w} + \vec{v}$
2. Assoziatives Gesetz $\vec{u} + (\vec{v} + \vec{w}) = (\vec{u} + \vec{v}) + \vec{w}$
3. Nullvektor: $\vec{0} + \vec{v} = \vec{v}$
4. Inverses Element: $\vec{v} + (-\vec{v}) = \vec{0}$

VR2: Skalarmultiplikation $\alpha, \beta \in \mathbb{R}/\mathbb{C}$

1. Existenz u. Eindeutigkeit: $\alpha \vec{v} \in \mathbf{V}$
2. Assoziatives Gesetz $\alpha(\beta \vec{v}) = (\alpha\beta) \vec{v}$
3. Distributive Gesetze: $(\alpha + \beta) \vec{v} = \alpha \vec{v} + \beta \vec{v}$ und $\alpha(\vec{v} + \vec{w}) = \alpha \vec{v} + \alpha \vec{w}$
4. Einselement: $1 \vec{v} = \vec{v}$

Es folgt:

- $0 \vec{v} = \vec{0}$
- $-\vec{v} = (-1) \vec{v}$

Eine Menge \mathbf{V} für deren Elemente eine Addition und eine Skalarmultiplikation mit der Eigenschaften VR1 und VR2 erklärt sind, heißt **Vektorraum**.

Wie man jetzt leicht nachprüfen kann, ist die Menge der quadratintegrierbaren (QI) Funktionen,

$$\mathbb{H} = \left\{ f = f(x) \in \mathbb{C}; \quad -\infty < x < \infty \quad \text{mit} \quad \int_{-\infty}^{\infty} |f(x)|^2 dx < \infty \right\} \quad (7)$$

ein Vektorraum. Dieser Vektorraum wird **Hilbertraum** (\mathbb{H}) genannt.

Es soll nun wieder der allgemeine Vektorraum \mathbf{V} betrachtet werden: Die Linearkombination Vektoren aus \mathbf{V} ergeben wieder einen Vektor $\in \mathbf{V}$:

$$\sum_{j=1}^m \alpha_j \vec{v}_j = \vec{w}, \quad \alpha_j \in \mathbb{C} \quad (8)$$

Ein Satz von Vektoren $\{\vec{v}_1, \vec{v}_2, \dots, \vec{v}_m\}$ ist linear abhängig, falls eine nicht-triviale Linearkombination existiert, die den Nullvektor ergibt:

$$\sum_{i=1}^m \lambda_i \vec{v}_i = \vec{0} \quad \text{mit mindestens einem } \lambda_i \neq 0 \quad (9)$$

Ein Satz von Vektoren $\{\vec{v}_1, \dots, \vec{v}_m\}$ ist **linear unabhängig** wenn es nur die triviale Linearkombination des 0-Vektors gibt:

$$\sum_{i=1}^m \lambda_i \vec{v}_i = \vec{0} \Leftrightarrow \lambda_i = 0; i = 1, \dots, m \quad (10)$$

Die **Dimension** von **V** ist definiert als die maximale Anzahl linear unabhängiger Vektoren.

Ein Satz von Vektoren $\{\vec{v}_1, \dots, \vec{v}_n\}$ heißt **Basis** von **V**, falls die Vektoren linear unabhängig sind und jeder Vektor $\vec{v} \in V$ sich als Linearkombination der Basisvektoren darstellen lässt.

$$\vec{v} = \sum_{i=1}^n \alpha_i \vec{v}_i, \quad \alpha_i \in \mathbb{C} \quad (11)$$

Beispiel \mathbb{R}^n :

Offenbar sind die n Vektoren

$$\vec{e}_i = \begin{pmatrix} 0 \\ \vdots \\ 1 \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix} \leftarrow \text{Zeile } i, i = 1, \dots, n \quad (12)$$

linear unabhängig und jeder Vektor \vec{v} lässt sich gemäß

$$\vec{v} = \sum_{i=1}^n v_i \vec{e}_i \quad (13)$$

als Linearkombination der \vec{e}_i darstellen. Also bilden diese Vektoren eine Basis.

Beispiel Hilbertraum:

Die Funktionen

$$f(x) = e^{-x^2}, \quad g(x) = xe^{-x^2}$$

sind linear unabhängig. Es gibt nur die triviale Lösung der Gleichung.

$$\alpha e^{-x^2} + \beta x e^{-x^2} \equiv 0$$

Die Dimension des Hilbertraums ist aber offenbar nicht endlich, denn es gibt unendlich viele linear unabhängige Funktionen, z.B. die Funktionen

$$g_n(x) = x^n e^{-ax^2} \quad n = 0, 1, \dots$$

Skalarprodukt, Orthogonalität

Ein Skalarprodukt ist eine Abbildung von jeweils zwei Vektoren auf eine Zahl:

$$\vec{u}, \vec{v} \in \mathbf{V} \rightarrow (\vec{u}, \vec{v}) \in \mathbb{C}$$

mit folgenden Eigenschaften (SP1 -SP4):

1. $(\vec{u}, \vec{v}) = (\vec{v}, \vec{u})^*$
2. $(\vec{u}, \lambda \vec{v}) = \lambda (\vec{u}, \vec{v})$ bzw. $(\lambda \vec{u}, \vec{v}) = \lambda^* (\vec{u}, \vec{v})$
3. $(\vec{u}, \vec{v} + \vec{w}) = (\vec{u}, \vec{v}) + (\vec{u}, \vec{w})$
4. $(\vec{u}, \vec{u}) \geq 0$; $\vec{u}, \vec{u}) = 0 \Leftrightarrow \vec{u} = \vec{0}$

Ein Vektorraum mit Skalarprodukt heißt ein **euklidischer Vektorraum**.

Länge oder Norm eines Vektors: $\|\vec{v}\| = \sqrt{(\vec{v}, \vec{v})}$

Wichtige Ungleichungen:

- $|(\vec{u}, \vec{v})| \leq \|\vec{u}\| \cdot \|\vec{v}\|$ Schwarzsche Ungleichung
- $\|\vec{u} + \vec{v}\| \leq \|\vec{u}\| + \|\vec{v}\|$ Dreiecksungleichung

Analog zum \mathbb{R}^3 kann man einen Winkel zwischen zwei Vektoren \vec{v}, \vec{w} definieren:

$$\cos \phi = \frac{(\vec{v}, \vec{w})}{\|\vec{v}\| \|\vec{w}\|}$$

Die Skalarprodukte für Basisvektoren $\{\vec{v}_1 \dots \vec{v}_n\}$ seien durch

$$(\vec{v}_i, \vec{v}_j) = \alpha_{ij} \in \mathbb{C}, \quad i, j = 1, \dots, n \quad (14)$$

gegeben. Dann läßt sich das Skalarprodukt der Vektoren

$$\vec{v} = \sum_{i=1}^n x_i \vec{v}_i, \quad \vec{w} = \sum_{i=1}^n y_i \vec{v}_i$$

wie folgt berechnen:

$$\Rightarrow (\vec{v}, \vec{w}) = \sum_{i,j=1}^n x_i^* y_j (\vec{v}_i, \vec{v}_j) = \sum_{i,j=1}^n x_i^* \alpha_{ij} y_j \quad (15)$$

Eine Basis $\{\vec{v}_1, \dots, \vec{v}_n\}$ heißt **Orthonormalbasis** (ONB), falls

$$(\vec{v}_i, \vec{v}_j) = \delta_{ij} = \begin{cases} 1, & i = j \\ 0, & i \neq j \end{cases} \quad (16)$$

Sei $\vec{v} = \sum_{i=1}^n x_i \vec{v}_i$ ein beliebiger Vektor. Dann gilt für das Skalarprodukt mit einem Basisvektor:

$$(\vec{v}_k, \vec{v}) = \sum_{i=1}^n x_i (\vec{v}_k, \vec{v}_i) = x_k \quad (17)$$

Entsprechend berechnet sich das Skalarprodukt von zwei Vektoren \vec{v}, \vec{w}

$$(\vec{v}, \vec{w}) = \sum_{i=1}^n x_i^* y_i \quad (18)$$

Beispiel \mathbb{R}^n :

$$(\vec{u}, \vec{v}) = \sum_{i=1}^n x_i y_i \quad (19)$$

Das Skalarprodukt ist reell.

Beispiel \mathbb{H} :

Ein Skalarproduktes im Hilbertraum kann wie folgt definiert werden:

$$(f, g) = \int_{-\infty}^{\infty} f(x)^* g(x) dx \in \mathbb{C} \quad (20)$$

wobei $f = f(x)$ und $g = g(x)$ beliebige Funktionen des Hilbertraums sind. Die Eigenschaften des Skalarprodukts lassen sich leicht nachprüfen.

Für die Norm ("Länge") von f gilt:

$$\|f\| = (f, f)^{\frac{1}{2}} = \left(\int_{-\infty}^{+\infty} |f(x)|^2 dx \right)^{\frac{1}{2}} \quad (21)$$

$f(x)$ und $g(x)$ sind **orthogonal**, falls $(f, g) = 0$ gilt.

Die linear unabhängigen Funktionen

$$f_k(x) = x^k e^{-x^2}, \quad k = 0, 1, 2, \dots$$

lassen sich sukzessive durch Gram-Schmidt-Orthogonalisierung orthonormieren. Es ergeben sich die orthonormierten Funktionen $h_0(x), h_1(x), \dots$ mit

$$(h_i, h_j) = \int_{-\infty}^{+\infty} h_i(x)^* h_j(x) dx = \delta_{ij} \quad (22)$$

Frage: Lässt sich jede Funktion $f = f(x) \in \mathbb{H}$ als unendliche Linearkombination

$$f(x) = \sum_{i=0}^{\infty} c_i h_i(x), \quad c_i \in \mathbb{C} \quad (23)$$

der Funktionen $h_i(x)$ darstellen?

Das ist eine ganz nicht-triviale mathematische Fragestellung.

(Zu zeigen ist $\|f - \sum_{i=0}^n c_i h_i(x)\| \rightarrow 0$ für $n \rightarrow \infty$.)

Ergebnis:

\mathbb{H} ist **separabel**, d.h. es gibt eine Folge orthonormierter Funktionen $\{h_0(x), h_1(x), \dots\}$, sodass jede Funktion $f(x) \in \mathbb{H}$ sich in der Form (23) schreiben lässt.

Entsprechend den abzählbar unendlich vielen Basisfunktionen $\{h_i(x)\}$ ist die Dimension von \mathbb{H} abzählbar unendlich.

Die Funktionen $h_i(x)$, $i = 0, 1, \dots$ bilden eine **Orthonormalbasis**(ONB) oder, wie man auch sagt, ein **vollständiges Orthonormalsystem**(VONS) des Hilbertraums.

Ohne mathematische Strenge kann man wie folgt "rechnen":

Skalarprodukt mit einer Basisfunktion:

$$(h_k, f) = (h_k, \sum_{i=0}^{\infty} c_i h_i(x)) = \sum_{i=0}^{\infty} c_i (h_k, h_i) = c_k \quad (24)$$

Skalarprodukt von zwei Funktionen $f(x) = \sum_{i=0}^{\infty} c_i h_i(x)$, $g(x) = \sum_{j=0}^{\infty} d_j h_j(x)$:

$$(f, g) = (\sum_{i=0}^{\infty} c_i h_i(x), \sum_{j=0}^{\infty} d_j h_j(x)) = \sum_{i=1}^{\infty} \sum_{j=1}^{\infty} c_i^* d_j (h_i, h_j) = \sum_{i=1}^{\infty} c_i^* d_i \quad (25)$$

Speziell für Norm der Funktion $f(x)$ ergibt sich:

$$\|f\| = \sqrt{\sum_{i=0}^{\infty} |c_i|^2} \quad (26)$$

Die Koeffizienten c_k heißen auch Entwicklungskoeffizienten bezüglich der gegebenen ONB $\{h_k(x), k = 0, 1, \dots\}$. Offenbar enthalten sie (in neuer Gestalt) die gesamte Information der zugrundeliegenden Funktion $f(x)$:

$$f(x) \Leftrightarrow (c_0, c_1, \dots)$$

2.2 Operatoren

Wir betrachten im folgenden Operatoren für Funktionen des Hilbertraums. Ein Operator \hat{O} ist ein auf \mathbb{H} definierte Abbildung

$$\hat{O} : f(x) \rightarrow g(x) = \hat{O}f(x) \quad (27)$$

Einfache Beispiele:

$$\hat{x}f(x) = xf(x) \quad \text{Multiplikation mit } x$$

$$\hat{D}f(x) = \frac{d}{dx}f(x) \quad \text{Ableitung}$$

$$\hat{Q}f(x) = f(x)^2 \quad \text{Quadrierung}$$

Im folgenden betrachten wir **lineare** Operatoren. Ein Operator \hat{O} ist linear, wenn gilt:

$$- \hat{O}(f(x) + g(x)) = \hat{O}f(x) + \hat{O}g(x) \quad (28)$$

$$- \hat{O}(\lambda f(x)) = \lambda \hat{O}f(x), \lambda \in \mathbb{C} \quad (29)$$

Offenbar sind die Operatoren \hat{x} und \hat{D} linear, \hat{Q} dagegen nicht.

Operatoren kann man addieren und multiplizieren.

Summe von zwei Operatoren \hat{A}, \hat{B} :

$$(\hat{A} + \hat{B})f(x) = \hat{A}f(x) + \hat{B}f(x) \quad (30)$$

Produkt von zwei Operatoren \hat{A}, \hat{B} :

$$(\hat{A}\hat{B})f(x) = \hat{A}(\hat{B}f(x)) \quad \text{d.h. hintereinander ausführen} \quad (31)$$

Im allgemeinen ist $\hat{A}\hat{B} \neq \hat{B}\hat{A}$, d.h. die Reihenfolge der Operatoren ist wichtig.
Beispiel:

$$(\hat{x}\hat{D})f(x) = x\frac{d}{dx}f(x) \neq (\hat{D}\hat{x})f(x) = f(x) + x\frac{d}{dx}f(x)$$

Hermitisch adjungierter Operator:

Zu jedem linearen Operator \hat{O} gibt es einen hermitisch adjungierten Operator \hat{O}^\dagger mit der Eigenschaft

$$(f, \hat{O}^\dagger g) = (\hat{O}f, g) \quad \text{für beliebige Funktionen } f(x), g(x) \in \mathbb{H} \quad (32)$$

Hermitischer Operator:

Ein Operator \hat{O} heißt hermitisch, wenn

$$\hat{O}^\dagger = \hat{O}, \quad \text{d.h. } (f, \hat{O}g) = (\hat{O}f, g) \quad (33)$$

gilt.

Eigenfunktion, Eigenwert

Falls für einen Operator \hat{O} und eine Funktion $f(x) \in \mathbb{H}$ die Beziehung

$$\hat{O}f(x) = \lambda f(x), \lambda \in \mathbb{C} \quad (34)$$

gilt, so heißt $f(x)$ Eigenfunktion (Eigenvektor) von \hat{O} mit dem Eigenwert λ .

Beachte: nicht jeder Operator hat Eigenfunktionen. Die Operatoren \hat{x} und \hat{D} haben keine Eigenfunktionen in \mathbb{H} .

Für die Anwendung in der Quantenmechanik ist der folgende Satz grundlegend.

Satz: Für einen hermiteschen Operator sind

1. Eigenwerte reell
2. Eigenfunktionen zu verschiedenen Eigenwerten orthogonal

Beweis zu 1: Es sei $f(x)$ Eigenfunktion des hermiteschen Operators \hat{A} mit Eigenwert λ

$$\hat{A}f(x) = \lambda f(x)$$

Betrachte

$$(f, \hat{A}f) = (f, \lambda f) = \lambda(f, f)$$

Wegen der Hermitizität von \hat{A} gilt andererseits

$$(f, \hat{A}f) = (\hat{A}f, f) = (\lambda f, f) = \lambda^*(f, f)$$

Es folgt also $\lambda(f, f) = \lambda^*(f, f)$ und wegen $(f, f) > 0$ weiter $\lambda^* = \lambda$, d.h. $\lambda \in \mathbb{R}$.

Beweis zu 2:

Es seien $f(x)$ und $g(x)$ Eigenfunktionen von \hat{A} zu verschiedenen Eigenwerten, d.h.

$$\hat{A}f(x) = \lambda f(x), \hat{A}g(x) = \mu g(x) \quad \text{mit } \lambda \neq \mu$$

Betrachte

$$\begin{aligned} (f, \hat{A}g) &= (f, \mu g) = \mu(f, g) \\ &= (\hat{A}f, g) = (\lambda f, g) = \lambda(f, g) \end{aligned}$$

Die zweiten Zeile folgt wegen der Hermitizität von \hat{A} ; beachte, dass λ reell ist. Da $\lambda \neq \mu$ folgt $(f, g) = 0$.

Lineare Operatoren auf n-dimensionalem VR

Zum Vergleich wollen wir noch Operatoren auf endlich-dimensionalen Vektorräumen betrachten. Ein Operator \hat{O} auf einem n-dimensionalen Vektorraum V_n ist eine Abbildung

$$\hat{O} : \vec{v} \rightarrow \vec{w} = \hat{O}\vec{v} \quad (35)$$

Beispiel \mathbb{C}^n ,

Multiplikation mit n-dimensionaler Matrix $\mathbf{O} = (O_{ij}), O_{ij} \in \mathbb{C}$:

$$\mathbf{O} \vec{v} = \begin{pmatrix} O_{11} & \dots & O_{1n} \\ \vdots & & \vdots \\ O_{n1} & \dots & O_{nn} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} v_1 \\ \vdots \\ v_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \sum_j^n O_{1j} v_j \\ \vdots \\ \sum_j^n O_{nj} v_j \end{pmatrix} \quad (36)$$

Offenbar ist dieser Operator linear (siehe Gl.28,29), d.h.

$$\hat{O}(\vec{v} + \vec{w}) = \hat{O}\vec{v} + \hat{O}\vec{w}, \quad \hat{O}(\lambda\vec{v}) = \lambda\hat{O}\vec{v}, \quad \lambda \in \mathbb{C}$$

Ganz allgemein gilt, dass die Wirkung eines linearen Operators \hat{O} in der Form einer Matrixmultiplikation dargestellt werden kann. Für eine Orthonormalbasis (ONB) $\{\vec{v}_1, \dots, \vec{v}_n\}$ bilden wir die Matrix \mathbf{O} mit den Elementen

$$O_{kl} = (\vec{v}_k, \hat{O}\vec{v}_l) \quad (37)$$

Für die Wirkung von \hat{O} auf einen Vektor $\vec{v} = \sum_{j=1}^n x_j \vec{v}_j$ gilt

$$\vec{w} = \hat{O}\vec{v} = \sum_{j=1}^n x_j \hat{O}\vec{v}_j$$

Der Ergebnisvektor lässt sich ebenfalls nach den Basisvektoren entwickeln:

$$\vec{w} = \sum_{i=1}^n \tilde{x}_i \vec{v}_i$$

wobei für die Entwicklungskoeffizienten

$$\tilde{x}_i = (\vec{v}_i, \vec{w}) = (\vec{v}_i, \hat{O}\vec{v}) = \sum_{j=1}^n (\vec{v}_i, \hat{O}\vec{v}_j) x_j$$

gilt. Also berechnen sich die Entwicklungskoeffizienten \tilde{x}_i des Ergebnisvektors in der Form

$$\tilde{x}_i = \sum_{j=1}^n O_{ij} x_j$$

aus den Entwicklungskoeffizienten des Ausgangsvektors. In Matrixschreibweise:

$$\begin{pmatrix} \tilde{x}_1 \\ \vdots \\ \tilde{x}_n \end{pmatrix} = \mathbf{O} \begin{pmatrix} x_1 \\ \vdots \\ x_n \end{pmatrix}$$

Zu jedem linearen Operator \hat{O} gibt es einen **hermitisch adjungierten** Operator \hat{O}^\dagger mit der Eigenschaft, dass für beliebige Vektoren \vec{v}, \vec{w}

$$(\vec{v}, \hat{O}^\dagger \vec{w}) = (\hat{O} \vec{v}, \vec{w}) \quad (38)$$

gilt. Da jeder lineare Operator durch seine Matrixelemente bezüglich einer ONB (eindeutig) bestimmt ist, genügt es die entsprechenden Matrixelemente von \hat{O}^\dagger wie folgt zu definieren:

$$(\hat{O}^\dagger)_{ij} = (\vec{v}_i, \hat{O}^\dagger \vec{v}_j) := (\hat{O} \vec{v}_i, \vec{v}_j) = (\vec{v}_j, \hat{O} \vec{v}_i)^* \quad (39)$$

Es gilt also $(\hat{O}^\dagger)_{ij} = O_{ji}^*$, d.h. die den Operatoren \hat{O} und \hat{O}^\dagger zugehörigen Matrizen sind zueinander hermitisch adjungiert, $\mathbf{O} \leftrightarrow \mathbf{O}^\dagger$. Wir bemerken noch, dass

$$(\hat{O}^\dagger)^\dagger = \hat{O} \quad (40)$$

gilt, d.h. der zu \hat{O}^\dagger hermitisch adjungierte Operator ist \hat{O} .
Ein Operator \hat{O} ist **hermitisch**, falls $\hat{O}^\dagger = \hat{O}$ bzw. $\mathbf{O}^\dagger = \mathbf{O}$ gilt.

Die Darstellung von linearen Operatoren durch Matrizen und die Definition eines hermitisch adjungierten Operators lässt sich unmittelbar auf die Funktionen des Hilbertraums übertragen, wobei wiederum zu beachten ist, dass eine ONB im Hilbertraum abzählbar unendlich viele Basisfunktionen hat.

Die Begriffe *Summe* und *Produkt* von Operatoren, sowie *Eigenvektor* (Eigenfunktion) und *Eigenwert* lassen sich direkt aus den entsprechenden Definitionen für Operatoren des Hilbertraums übernehmen. Ebenso der Satz über die Eigenwerte und Eigenfunktionen eines hermiteschen Operators.