

4 Hilbertraum

In der klassischen Mechanik wird ein Massenpunkt vollständig durch den Ort $\mathbf{r}$ und den Impuls $\mathbf{p}$ beschrieben. In der Quantenmechanik wird der Zustand eines Massenpunktes durch einen Vektor $|\psi\rangle$ in einem unendlich-dimensionalen komplexen Vektorraum $\mathcal{H}$ beschrieben. Dieser Vektorraum wird Hilbertraum genannt, und die Vektoren $|\psi\rangle$ können als Funktionen $\psi(\mathbf{r})$ dargestellt werden. Messbare Größen (Observablen) in der Quantenmechanik sind hermitesche Operatoren im Vektorraum $\mathcal{H}$ und die Eigenwerte dieser Operatoren sind die möglichen Ergebnisse einer Messung der Observable.

Da der Hilbertraum, lineare Operatoren auf dem Hilbertraum, und deren Eigenwerte eine so bedeutende Rolle in der Quantenmechanik spielen, werden wir nun zuerst die mathematischen Eigenschaften dieses Vektorraums besprechen. Eine ausführliche Beschreibung der Postulate der Quantenmechanik folgt in der nächsten Vorlesung.

4.1 Quadratintegrale Funktionen in einer Dimension

Der Hilbertraum $\mathcal{H} = \{\text{Funktionen } F(x) \text{ auf } \mathbb{R} \text{ mit } \int_{-\infty}^{\infty} dx |F(x)|^2 < \infty\}$ ist der komplexe Vektorraum der “quadratintegrale Funktionen” in einer Dimension. Auf $\mathcal{H}$ sind, wie für jeden Vektorraum, ein Skalarprodukt, Basis, lineare Operatoren, Eigenwerte, usw. definiert.

1. Die Definitionen des Skalarprodukts und der Norm sind die Verallgemeinerungen des Skalarprodukts und der Norm in einem endlich-dimensionalen Vektorraum,

$$(F, G) = \int_{-\infty}^{\infty} dx F^*(x)G(x), \quad ||F|| = \sqrt{(F, F)} = \int_{-\infty}^{\infty} dx |F(x)|^2.$$

2. Es gibt keine endlich-dimensionale Basis für $\mathcal{H}$. Stattdessen gibt es drei Sorten unendlich-dimensionaler Basen:

(a) Eine diskrete Basis $\{E_n\}$ wobei n eine ganze Zahl ist. Eine diskrete Basis kann orthonormal gewählt werden. In diesem Fall gilt:

- Normierung: $(E_n, E_{n'}) = \int_{-\infty}^{\infty} dx E_n^* E_{n'}(x) = \delta_{nn'}$
- Vollständigkeit: $F(x) = \sum_k (E_k, F) E_k(x)$ für beliebige Funktionen $F(x)$ in $\mathcal{H}$.

- (b) Eine kontinuierliche Basis $\{E_n\}$, wobei $n \in \mathbb{R}$ eine kontinuierliche Variable ist. In diesem Fall findet man, dass die Basisfunktionen E_n kein Teil des Hilbertraums sind, da sie nicht quadratintegrabel sind. Deshalb ist eine kontinuierliche Basis streng gesehen keine Basis vom Vektorraum $\mathcal{H}$. Aber es ist in vielen Anwendungen sehr hilfreich, eine kontinuierliche Basis zu verwenden.

Eine kontinuierliche Basis kann nicht orthonormal gewählt werden. Stattdessen gibt es eine “Delta-Funktion Normierung”, wobei

$$(E_n, E_{n'}) = \int_{-\infty}^{\infty} dx E_n^* E_{n'}(x) = \delta(n - n').$$

Für eine Delta-Funktion normierte Basis lautet die Vollständigkeitsrelation:

$$F(x) = \int dk (E_n, F) E_n(x).$$

- (c) Eine gemischte Basis $\{E_n\}$ mit n teils diskret, teils kontinuierlich. In diesem Fall sind die Basisfunktionen E_n im Hilbertraum $\mathcal{H}$ in dem Bereich, wo n diskret ist, und ausserhalb des Hilbertraums wenn n kontinuierlich ist. Mit der Notation

$$\mathbb{S}_n = \begin{cases} \sum_n & \text{wenn } n \text{ diskret} \\ \int dn & \text{wenn } n \text{ kontinuierlich} \end{cases}$$

und

$$\mathbb{D}_{nn'} = \begin{cases} \delta_{n,n'} & \text{wenn } n, n' \text{ diskret} \\ \delta(n - n') & \text{wenn } n, n' \text{ kontinuierlich} \end{cases}$$

können die Normierung und Vollständigkeitsrelationen beider Bereiche in einer Gleichung dargestellt werden,

$$(E_n, E_{n'}) = \mathbb{D}_{nn'}, \quad F(x) = \mathbb{S}_n (E_n, F) E_n(x).$$

Beispiele einer kontinuierlichen Basis für $\mathcal{H}$:

- Die Funktionen $E_{x'}(x) = \delta(x - x')$. Die Delta-Funktion-Normierung dieser Basis und die Vollständigkeit folgen direkt aus den Eigenschaften der Dirac Delta Funktion,

$$\begin{aligned} (E_{x'}, E_{x''}) &= \int dx \delta(x - x') \delta(x - x'') \\ &= \delta(x' - x'') \\ F(x) &= \int dx' F(x') \delta(x - x') \\ &= \int dx' (E_{x'}, F) E_{x'}(x) \end{aligned}$$

für beliebige Funktionen $F(x)$.

- Die Funktionen $E_k(x) = (1/\sqrt{2\pi})e^{ikx}$. Die Delta-Funktion-Normierung dieser Basis ergibt sich aus der Fourier Darstellung der Dirac Delta Funktion

$$\begin{aligned}(E_k, E_{k'}) &= \int dx \frac{1}{2\pi} e^{-i(k-k')x} \\ &= \delta(k - k')\end{aligned}$$

während die Vollständigkeit aus der Fourier-Analyse folgt,

$$F(x) = \int dk G(k) E_k(x),$$

wobei

$$\begin{aligned}G(k) &= (E_k, F) \\ &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int dx e^{-ikx} F(x).\end{aligned}$$

3. Die wichtigsten Beispiele linearer Operatoren auf $\mathcal{H}$ sind:

- Der “Nulloperator” $\hat{0}$, definiert durch

$$\hat{0}F(x) = 0$$

für beliebige quadratintegrale Funktionen $F(x)$.

- Der “Einheitsoperator” $\hat{1}$, definiert durch

$$\hat{1}F(x) = F(x)$$

für beliebige quadratintegrale Funktionen $F(x)$.

- Der Operator $\hat{x}$, definiert durch

$$\hat{x}F(x) = xF(x)$$

- Der Operator $\hat{k}$, definiert durch

$$\hat{k}F(x) = -i \frac{dF}{dx}$$

4. Genau wie bei endlich dimensionalen Vektorräumen sind Linearkombinationen und Produkte linearer Operatoren wieder lineare Operatoren. Operatoren müssen nicht vertauschbar sein!

Beispiele:

- Die Operatoren $\hat{0}$ und $\hat{1}$ sind vertauschbar,

$$\begin{aligned}\hat{0}\hat{1} &= \hat{1}\hat{0} \\ &= \hat{0},\end{aligned}$$

so dass $[\hat{0}, \hat{1}] = \hat{0}$.

- Die Operatoren $\hat{x}$ und $\hat{k}$ sind nicht vertauschbar: Einerseits gilt

$$\hat{x}\hat{k}F(x) = -ix\frac{dF(x)}{dx},$$

während andererseits

$$\begin{aligned}\hat{k}\hat{x}F(x) &= -i\frac{d}{dx}xF(x) \\ &= -ix\frac{dF(x)}{dx} - iF(x).\end{aligned}$$

Hieraus folgt, dass

$$[\hat{x}, \hat{k}] = i\hat{1}$$

5. Wie in endlich dimensionalen Vektorräumen wird der hermitesch konjugierte Operator $\hat{A}^\dagger$ durch $(\hat{A}^\dagger F, G) = (F, \hat{A}G)$, mit beliebigen Funktionen F und G , festgelegt. Ein linearer Operator $\hat{A}$ ist hermitesch, wenn $\hat{A}^\dagger = \hat{A}$.

Beispiele: $\hat{0}$, $\hat{1}$, $\hat{x}$ und $\hat{k}$ sind hermitesch. Letzteres ergibt sich aus der partiellen Integration,

$$\begin{aligned}(F, \hat{k}G) &= \int dx F^*(x)(-i)\frac{dG(x)}{dx} \\ &= i \int dx \frac{dF^*(x)}{dx} G(x) \\ &= \int dx (\hat{k}F(x))^* G(x) \\ &= (\hat{k}F, G).\end{aligned}$$

6. Eine Funktion $F_a(x)$ mit der Eigenschaft $\hat{A}F_a = aF_a$, wobei a eine komplexe Zahl ist, wird eine Eigenfunktion des Operators $\hat{A}$ genannt. Die komplexe Zahl a ist der zugehörige Eigenwert. Die Eigenwerte eines hermiteschen Operators sind reell. Die Menge aller Eigenwerte eines Operators wird das "Spektrum" genannt. Spektra hermitescher Operatoren können diskret sein, oder kontinuierlich, oder gemischt. In dem letzten Fall gibt es diskrete und kontinuierliche Bereiche im Spektrum.

Für einen diskreten Eigenwert gilt, dass die Eigenfunktion F_a quadratintegrabel ist. Für einen kontinuierlichen Eigenwert gilt, dass die Eigenfunktion F_a nicht quadratintegrabel ist. In diesem Fall können die Eigenfunktionen aber Delta-Funktion normiert werden.

Für jeden hermiteschen Operator $\hat{A}$ gibt es eine Basis für $\mathcal{H}$ aus Eigenfunktionen des Operators $\hat{A}$. Diese Basisfunktionen sind orthonormal wenn das Spektrum diskret ist, und Delta Funktion normiert wenn das Spektrum kontinuierlich ist.

Die Eigenfunktionen eines hermiteschen Operators $\hat{A}$ zum Eigenwert a bilden einen Vektorraum, $\mathcal{H}_a$. Die Dimension dieses Vektorraumes wird die Entartung des Eigenwertes genannt. Eine Basis für $\mathcal{H}_a$ wird dann mit $\{E_{a\lambda}\}$ bezeichnet, wobei λ ein weiterer Index ist. Die Entartung kann im Prinzip auch unendlich sein. Der Parameter λ kann diskret sein oder kontinuierlich.

Normierung der Eigenzustände: $(E_{a\lambda}, E_{a'\lambda'}) = \mathbb{D}_{aa'} \mathbb{D}_{\lambda\lambda'}$. Dies bedeutet:

$(E_{a\lambda}, E_{a'\lambda'})$	a diskret	a kont.
λ diskret	$\delta_{aa'} \delta_{\lambda\lambda'}$	$\delta(a - a') \delta_{\lambda\lambda'}$
λ kont.	$\delta_{aa'} \delta(\lambda - \lambda')$	$\delta(a - a') \delta(\lambda - \lambda')$

Der Operator $\hat{P}_a$ ist die Projektion auf $\mathcal{H}_a$,

$$\hat{P}_a F(x) = \mathbb{S}_\lambda(E_{a\lambda}, F) E_{a\lambda}(x).$$

Beispiele:

- Die Eigenwertgleichung für den Operator $\hat{x}$ (mit dem Eigenwert x') lautet

$$\hat{x} E_{x'}(x) = x E_{x'}(x) = x' E_{x'}(x).$$

Die Lösung der Eigenwertgleichung wird durch die Dirac Delta Funktionen gegeben,

$$E_{x'}(x) = \delta(x - x').$$

Da alle reellen Zahlen x' als Eigenwert des Operators $\hat{x}$ auftreten, ist das Spektrum des Operators $\hat{x}$ die Menge $\mathbb{R}$ der reellen Zahlen. Die Eigenfunktionen haben eine Delta-Funktion-Normierung und bilden eine Basis für $\mathcal{H}$.

- Die Eigenwertgleichung für den Operator $\hat{k}$ (mit dem Eigenwert k) lautet

$$\hat{k} E_k(x) = -i \frac{dE_k(x)}{dx} = k E_k(x).$$

Die Lösung der Eigenwertgleichung ist:

$$E_k(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{ikx}.$$

Das Spektrum des Operators $\hat{k}$ ist damit $\mathbb{R}$. Die Eigenfunktionen $E_k(x)$ haben eine Delta-Funktion-Normierung und bilden eine Basis für $\mathcal{H}$.

- Nun folgt ein Beispiel eines Operators mit einem diskreten Spektrum: Das Spektrum des Operators

$$\hat{n} = \frac{1}{2}(\hat{x} - i\hat{k})(\hat{x} + i\hat{k})$$

besteht aus den natürlichen Zahlen $n = 0, 1, 2, \dots$, und die Eigenwerte sind nicht entartet. Die Eigenfunktionen sind

$$E_n(x) = \pi^{-\frac{1}{4}} \frac{1}{\sqrt{2^n n!}} \left(x - \frac{d}{dx}\right)^n e^{-\frac{1}{2}x^2}.$$

Diese Funktionen bilden eine diskrete (aber unendlich-dimensionale) orthonormale Basis für $\mathcal{H}$. Die Lösung der Eigenwertgleichung für den Operator $\hat{n}$ folgt später in dieser Vorlesung.

7. Seien $\hat{A}, \hat{B}$ hermitesche Operatoren auf $\mathcal{H}$. Eine Eigenfunktion $E_{a,b}(x)$ wird eine gemeinsame Eigenfunktion zur Eigenwert-Kombination (a, b) genannt, wenn $\hat{A}E_{a,b}(x) = aE_{a,b}(x)$ und $\hat{B}E_{a,b}(x) = bE_{a,b}(x)$. Genau wie bei endlich-dimensionalen Vektorräumen gilt, dass es eine Basis von solchen gemeinsamen Eigenfunktionen $E_{a,b}(x)$ gibt, dann und nur dann wenn die Operatoren $\hat{A}$ und $\hat{B}$ vertauschbar sind. Ein Satz hermitescher Operatoren $\hat{A}, \hat{B}, \hat{C}, \dots$ ist komplett, wenn das Spektrum der Eigenwert-Kombinationen $(a, b, c, \dots)$ nicht entartet ist. In diesem Fall gibt es nur *eine* Basis von gemeinsamen Eigenfunktionen (bis auf Multiplikation mit einer komplexen Zahl).

4.2 Quadratintegrale Funktionen in drei Dimensionen

Der komplexe Vektorraum der quadratintegralen Funktionen $F(\mathbf{r})$ auf $\mathbf{R}^3$ wird mit $\mathcal{H}$ bezeichnet und auch Hilbertraum genannt. Das Skalarprodukt auf $\mathcal{H}$ ist als

$$(F, G) = \int d\mathbf{r} F^*(\mathbf{r})G(\mathbf{r})$$

definiert.

Die wichtigsten Operatoren sind

$$\begin{aligned}\hat{\mathbf{r}} &= \begin{pmatrix} \hat{x} \\ \hat{y} \\ \hat{z} \end{pmatrix} \\ \hat{\mathbf{k}} &= \begin{pmatrix} \hat{k}_x \\ \hat{k}_y \\ \hat{k}_z \end{pmatrix}\end{aligned}$$

wobei

$$\hat{x}F(\mathbf{r}) = xF(\mathbf{r}), \quad \hat{k}_x F(\mathbf{r}) = -i \frac{\partial F(\mathbf{r})}{\partial x}, \quad \text{usw.}$$

Nicht alle Komponenten der Operatoren $\hat{\mathbf{r}}$ und $\hat{\mathbf{k}}$ sind vertauschbar,

$$[\hat{x}, \hat{k}_x] = i\hat{1}, \quad [\hat{x}, \hat{k}_y] = [\hat{x}, \hat{k}_z] = 0, \quad \text{usw.}$$

Beispiele kompletter Sätze von Operatoren in drei Dimensionen sind:

- $\hat{x}, \hat{y}, \hat{z}$; Basis $E_{\mathbf{r}'}(\mathbf{r}) = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$.
- $\hat{k}_x, \hat{k}_y, \hat{k}_z$; Basis $E_{\mathbf{k}'}(\mathbf{r}) = (2\pi)^{-3/2} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}}$.

4.3 Dirac Notation

Eine Funktion $F(\mathbf{r})$ wird mit dem “ket” $|F\rangle$ angedeutet. Informell ist $|F\rangle$ als einen ∞ -dimensionalen Spaltenvektor zu betrachten,

$$|F\rangle \text{ “=” } \begin{pmatrix} F(\mathbf{r}_1) \\ F(\mathbf{r}_2) \\ \vdots \end{pmatrix}.$$

Es gibt auch den “dualen” Hilbertraum mit “bra” Elementen $\langle F|$, die man informell als ein ∞ -dimensionaler Zeilenvektor betrachten kann,

$$\langle F| \text{ “=” } (F(\mathbf{r}_1)^*, F(\mathbf{r}_2)^*, \dots).$$

Wie bei endlich-dimensionalen Vektorräumen schreibt man $|\hat{A}F\rangle = \hat{A}|F\rangle$ und $\langle \hat{A}F| = \langle F|\hat{A}^\dagger$. Das Skalarprodukt (F, G) wird dann als $\langle F|G\rangle$ geschrieben. Damit gilt dann auch, dass

$$\langle F|\hat{A}G\rangle = \langle F|\hat{A}|G\rangle = \langle \hat{A}^\dagger F|G\rangle.$$

Die Dirac-Notation erlaubt eine sehr wirtschaftliche Darstellung von wichtigen Elementen der Theorie:

- Eigenvektoren/Eigenfunktionen eines hermiteschen Operators $\hat{A}$ zum Eigenwert a werden als $|a\lambda\rangle$ geschrieben, wobei der Parameter λ eine Basis für den Hilbertraum $\mathcal{H}_a$ parametrisiert. Die Normierungs- und Vollständigkeitsrelationen sind dann

$$\langle a'\lambda'|a\lambda\rangle = \mathbb{D}_{aa'}\mathbb{D}_{\lambda\lambda'}, \quad \mathbb{S}_{a,\lambda}|a\lambda\rangle\langle a\lambda| = \hat{1}.$$

Um die letzte Gleichung zu begründen entwickelt man eine beliebige Funktion F nach Eigenfunktionen $E_{a\lambda}(x)$ des Operators $\hat{A}$,

$$F(x) = \mathbb{S}_{a,\lambda}(E_{a\lambda}, F)E_{a\lambda}(x).$$

In der Dirac Notation sieht diese Gleichung so aus:

$$|F\rangle = \mathbb{S}_{a\lambda}|a\lambda\rangle\langle a\lambda|F\rangle.$$

Da dies für beliebige kets $|F\rangle$ gilt, findet man so die Operator-Gleichung

$$\mathbb{S}_{a,\lambda}|a\lambda\rangle\langle a\lambda| = \hat{1}.$$

Beispiele: Die “Ortsbasis” (mit den Eigenfunktionen $E_{\mathbf{r}'}(\mathbf{r}) = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$) als Basisfunktionen wird in der Dirac Notation als $|\mathbf{r}'\rangle$ angedeutet. Die “Fourierbasis” wird in der Dirac Notation mit den kets $|\mathbf{k}\rangle$ angedeutet. Die Vollständigkeit dieser Basis wird dann durch die Gleichungen

$$\int d\mathbf{r}|\mathbf{r}\rangle\langle\mathbf{r}| = \int d\mathbf{k}|\mathbf{k}\rangle\langle\mathbf{k}| = \hat{1}$$

gegeben.

- Die Projektion auf den Vektorraum $\mathcal{H}_a$ der Eigenfunktionen zum Eigenwert a ist, in der Dirac Notation,

$$\hat{P}_a = \mathbb{S}_{\lambda}|a\lambda\rangle\langle a\lambda|.$$

Dies ergibt sich aus der Gleichung

$$\hat{P}_a F(x) = \mathbb{S}_{\lambda}(E_{a\lambda}, F)E_{a\lambda}(x),$$

woraus folgt, dass

$$\hat{P}_a|F\rangle = \mathbb{S}_{\lambda}|a\lambda\rangle\langle a\lambda|F\rangle,$$

für beliebige $|F\rangle$.

- Seien $\hat{A}, \hat{B}, \hat{C}, \dots$ ein kompletter Satz hermitescher Operatoren, dann

$$\begin{aligned} \langle a'b'c' \dots | abc \dots \rangle &= \mathbb{D}_{aa'}\mathbb{D}_{bb'}\mathbb{D}_{cc'} \dots \quad \text{usw.} \\ \mathbb{S}_{a,b,c,\dots} | abc \dots \rangle \langle abc \dots | &= \hat{1}. \end{aligned}$$