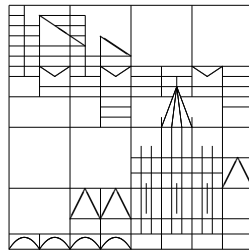


Skript zur Vorlesung
Mathematische Grundlagen
der Quantenmechanik

Wintersemester 2017/18

Robert Denk



Universität Konstanz
Fachbereich Mathematik und Statistik

Stand: 15.01.2018

Inhaltsverzeichnis

1	Postulate der Quantenmechanik, Observable	1
	a) Ein kurzer Ausflug in die klassische Mechanik	1
	b) Einige Begriffe aus der Operatortheorie	3
	c) Observable	6
	d) Der Spektralsatz und die stochastische Interpretation	9
2	Die zeitliche Entwicklung eines quantenmechanischen Systems	17
	a) Der Satz von Stone	17
	b) Hamilton-Operatoren und Schrödinger-Gleichung	23
3	Beispiele quantenmechanischer Systeme	28
	a) Der harmonische Oszillator	28
	b) Das freie Teilchen	32
	c) Das Wasserstoffatom ohne Spin	35
	d) Das Wasserstoffatom mit Spin	43
	e) Dirac-Operatoren	50
	Literatur	56
	Index	57

1. Postulate der Quantenmechanik, Observable

a) Ein kurzer Ausflug in die klassische Mechanik

Ein klassisches mechanisches System ist beschrieben durch generalisierte Koordinaten und die Lagrangefunktion. Generalisierte Koordinaten sind von der Form $q(t) = (q_1(t), \dots, q_S(t)) \in \mathbb{R}^S$, welche von der Zeit $t \in \mathbb{R}$ abhängen; Beispiele für generalisierte Koordinaten sind der Ort eines Teilchens $q(t) \in \mathbb{R}^3$. Die Lagrangefunktion ist von der Form $L(t, q(t), \dot{q}(t))$ (wobei $\dot{q}(t) := \frac{\partial}{\partial t}q(t)$ die Ableitung nach der Zeit bezeichnet). Das *Hamilton-Prinzip* besagt:

Ein mechanisches System mit der Lagrange-Funktion L bewegt sich so, dass $q(t)$ eine Extremalstelle des *Wirkungsfunktionals*

$$S(q) := \int_{t_1}^{t_2} L(t, q(t), \dot{q}(t)) dt$$

(mit gegebenen Randbedingungen $q(t_1) = q_{01}$, $q(t_2) = q_{02}$) ist.

Man definiert die *generalisierten Impulse* $p = (p_1, \dots, p_S)$ durch

$$p_i := \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} \quad (i = 1, \dots, S)$$

und die *Hamilton-Funktion*

$$H(t, q, p) := \sum_{i=1}^S p_i \dot{q}_i - L(t, q, \dot{q}).$$

Aus dem Hamilton-Prinzip folgen dann die *Hamiltonschen Bewegungsgleichungen*

$$\begin{aligned} \dot{q}_i(t) &= \frac{\partial H(t, q(t), p(t))}{\partial p_i} \quad (i = 1, \dots, S), \\ \dot{p}_i(t) &= -\frac{\partial H(t, q(t), p(t))}{\partial q_i} \quad (i = 1, \dots, S) \end{aligned} \tag{1-1}$$

sowie $\frac{\partial H}{\partial t} = -\frac{\partial L}{\partial t}$. Damit ist der Zustand des Systems durch die gewöhnliche Differentialgleichung (1-1) und gegebene Anfangsbedingungen $p(t_0), q(t_0)$ eindeutig bestimmt (bei entsprechender Voraussetzung an die Hamilton-Funktion, etwa die globale Lipschitz-Bedingung). Physikalisch entspricht die Hamilton-Funktion (unter gewissen Bedingungen) der Energie des Systems.

1.1 Beispiel (Harmonischer Oszillator). Der harmonische Oszillator beschreibt einen Körper an einer Feder, welche dem Hookeschen Gesetz $F = -kx$ mit der Federkonstanten k genügt (siehe Abbildung 1).

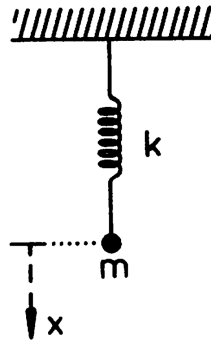


Abbildung 1: Der harmonische Oszillator (nach [No02-2])

Hier wählt man $S := 1$, $q := q_1 := x \in \mathbb{R}$. Die kinetische Energie ist gegeben durch $T = \frac{1}{2}m\dot{q}^2$, die potentielle Energie durch $V = \frac{1}{2}kq^2$. Die Lagrangefunktion für dieses mechanische System lautet

$$L(t, q(t), \dot{q}(t)) = \frac{1}{2}m\dot{q}^2 - \frac{1}{2}kq^2.$$

Der generalisierte Impuls ist gegeben durch

$$p := \frac{\partial L}{\partial \dot{q}} = m\dot{q},$$

damit ist die Lagrange-Funktion in den neuen Variablen gegeben durch $\tilde{L}(t, q, p) = \frac{p^2}{2m} - \frac{1}{2}kq^2$, und die Hamilton-Funktion ist

$$H(t, q, p) := p\dot{q} - \tilde{L}(t, q, p) = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}kq^2.$$

Die Hamiltonschen Bewegungsgleichungen lauten

$$\begin{aligned}\dot{q}(t) &= \frac{\partial H(t, q(t), p(t))}{\partial p} = \frac{p(t)}{m}, \\ \dot{p}(t) &= -\frac{\partial H(t, q(t), p(t))}{\partial q} = -kq(t).\end{aligned}$$

Damit folgt $\ddot{q}(t) = \frac{\dot{p}(t)}{m} = -\frac{k}{m}q(t)$. Diese gewöhnliche Differentialgleichung ist mit gegebenen Anfangswerten $q(t_0), \dot{q}(t_0)$ eindeutig für alle $t \in \mathbb{R}$ lösbar (als lineare Differentialgleichung mit konstanten Koeffizienten).

Wir fassen die obigen Begriffe nochmal kurz zusammen:

1.2 Definition. Ein klassisches mechanisches System ist gegeben durch generalisierte Koordinaten $q = q(t) \in \mathbb{R}^S$, generalisierte Impulse $p = p(t) \in \mathbb{R}^S$ und die Hamilton-Funktion $H: \mathbb{R} \times \mathbb{R}^S \times \mathbb{R}^S \rightarrow \mathbb{R}$, $(t, q, p) \mapsto H(t, q, p)$.

a) Ein Punkt $\psi = (q, p) \in \mathbb{R}^{2S}$ heißt Phase oder Phasenvektor. Die Menge $\mathbb{R}^{2S} = \{(q, p) : q, p \in \mathbb{R}^S\}$ heißt Phasenraum. Die Menge aller Punkte $(q(t), p(t)) \in \mathbb{R}^{2S}$, welche ein physikalisches System annehmen kann, heißt Menge aller Phasenbahnen oder Phasentrajektorien. Die Menge $\mathbb{R}^{2S+1} = \{(t, q, p) : t \in \mathbb{R}, q, p \in \mathbb{R}^S\}$ heißt Zustandsraum des Systems.

b) Die zeitliche Entwicklung eines Phasenvektors $\psi(t) = (q(t), p(t))$ ist gegeben durch die Hamiltonschen Bewegungsgleichungen

$$\dot{q}_j(t) = \frac{\partial H(t, q(t), p(t))}{\partial p_j}, \quad \dot{p}_j(t) = -\frac{\partial H(t, q(t), p(t))}{\partial q_j} \quad (j = 1, \dots, S).$$

b) Einige Begriffe aus der Operatortheorie

Wir wiederholen einige Begriffe aus der Operatortheorie, wie sie in der Funktionalanalysis behandelt werden. Im Folgenden werden immer komplexe Vektorräume betrachtet, insbesondere wird unter einem Hilbertraum immer ein \mathbb{C} -Hilbertraum verstanden.

1.3 Definition. a) Ein \mathbb{C} -Vektorraum \mathcal{H} , versehen mit einer Abbildung $\langle \cdot, \cdot \rangle : \mathcal{H} \times \mathcal{H} \rightarrow \mathbb{C}$, heißt ein Vektorraum mit Skalarprodukt oder ein Prähilbertraum, falls gilt:

- (i) Für alle $y \in \mathcal{H}$ ist die Abbildung $x \mapsto \langle x, y \rangle$ linear.
- (ii) Für alle $x, y \in \mathcal{H}$ gilt $\langle x, y \rangle = \overline{\langle y, x \rangle}$.
- (iii) Für alle $x \in \mathcal{H}$ gilt $\langle x, x \rangle \geq 0$. Es gilt $\langle x, x \rangle = 0$ genau dann, wenn $x = 0$.

b) Zwei Vektoren $x, y \in \mathcal{H}$ heißen orthogonal (in Zeichen $x \perp y$), falls $\langle x, y \rangle = 0$ gilt. Eine Familie $\{x_i\}_{i \in I}$ von Vektoren heißt orthonormal, falls gilt:

$$\langle x_i, x_j \rangle = \delta_{ij} := \begin{cases} 1 & \text{falls } i = j, \\ 0 & \text{sonst.} \end{cases}$$

c) In einem Prähilbertraum $(\mathcal{H}, \langle \cdot, \cdot \rangle)$ wird durch $\|x\| := \langle x, x \rangle^{1/2}$ die kanonische Norm definiert. Ein Prähilbertraum (oder allgemeiner ein normierter Raum) heißt vollständig, falls jede Cauchyfolge konvergent ist. Ein vollständiger Prähilbertraum heißt Hilbertraum.

d) Ein Hilbertraum \mathcal{H} heißt separabel, falls eine abzählbare Teilmenge $A \subset \mathcal{H}$ existiert, welche in \mathcal{H} dicht liegt, d. h. zu jedem $x \in \mathcal{H}$ und $\varepsilon > 0$ existiert ein $a \in A$ mit $\|x - a\| < \varepsilon$.

e) Eine Teilmenge $S \subset \mathcal{H}$ eines Hilbertraums \mathcal{H} heißt eine (Hilbertraum-)Basis, falls S eine maximale orthonormale Teilmenge ist, d. h. falls für jede orthonormale Teilmenge $\tilde{S} \supset S$ bereits $S = \tilde{S}$ gilt.

1.4 Bemerkung. Es gilt: Jeder Hilbertraum besitzt eine Basis. Ein Hilbertraum ist genau dann separabel, wenn er eine höchstens abzählbare Basis besitzt.

1.5 Definition (Linearer Operator). Sei \mathcal{H} ein \mathbb{C} -Hilbertraum.

a) Ein linearer Operator $T: \mathcal{H} \supset D(T) \rightarrow \mathcal{H}$ ist eine lineare Abbildung vom Definitionsbereich $D(T) \subset \mathcal{H}$ nach \mathcal{H} , wobei $D(T)$ ein linearer Unterraum von \mathcal{H} ist. Die Menge $G(T) := \{(x, Tx) : x \in D(T)\}$ heißt der Graph von T .

Wir setzen $R(T) := \{Tx : x \in D(T)\}$ (Wertebereich, englisch range) und $N(T) := \ker T := \{x \in D(T) : Tx = 0\}$ (Kern von T).

b) Der Operator T heißt abgeschlossen, wenn $G(T)$ eine abgeschlossene Teilmenge von $\mathcal{H} \oplus \mathcal{H}$ ist.

c) Der Operator T heißt abschließbar, wenn es einen abgeschlossenen linearen Operator \bar{T} gibt mit $G(\bar{T}) = \overline{G(T)}$. Der Operator \bar{T} heißt Abschließung oder der Abschluss von T .

d) Seien $T: \mathcal{H} \supset D(T) \rightarrow \mathcal{H}$ und $S: \mathcal{H} \supset D(S) \rightarrow \mathcal{H}$ zwei lineare Operatoren. Wir schreiben $S \subset T$, falls $D(S) \subset D(T)$ und $Sx = Tx$ ($x \in D(S)$) gilt. Die Gleichheit $S = T$ ist als Gleichheit der Definitionsbereiche und der Werte zu verstehen. Die Verknüpfung von S und T ist definiert durch

$$\begin{aligned} D(ST) &:= \{x \in D(T) : Tx \in D(S)\}, \\ (ST)x &:= S(Tx) \quad (x \in D(ST)). \end{aligned}$$

Eine spezielle Klasse von Operatoren sind die stetigen linearen Operatoren:

1.6 Lemma (Stetiger linearer Operator). a) Seien X, Y normierte Räume, und sei $T: X \rightarrow Y$ eine lineare Abbildung. Dann sind äquivalent:

(i) T ist stetig.

(ii) T ist stetig an der Stelle 0.

(iii) T ist beschränkt, d. h. es existiert eine Konstante $C > 0$ mit

$$\|Tx\|_Y \leq C\|x\|_X \quad (x \in X).$$

Der Raum aller stetigen linearen Operatoren wird mit $L(X, Y)$ bezeichnet. Wir schreiben $L(X) := L(X, X)$. Speziell für $Y = \mathbb{C}$ ist $X' := L(X, \mathbb{C})$ der topologische Dualraum von X .

b) Durch

$$\|T\| := \sup_{x \in X \setminus \{0\}} \frac{\|Tx\|_Y}{\|x\|_X} = \sup_{\|x\|_X=1} \|Tx\|_Y$$

wird eine Norm auf $L(X, Y)$ definiert. Falls Y vollständig ist, so ist auch $L(X, Y)$ vollständig und damit ein Banachraum. Speziell ist X' immer ein Banachraum.

1.7 Definition. Sei \mathcal{H} ein Hilbertraum und $T: \mathcal{H} \supset D(T) \rightarrow \mathcal{H}$ ein abgeschlossener linearer Operator.

- a) $\rho(T) := \{\lambda \in \mathbb{C} : T - \lambda: D(T) \rightarrow \mathcal{H} \text{ ist bijektiv}\}$ heißt die Resolventenmenge von T .
- b) $\sigma(T) := \mathbb{C} \setminus \rho(T)$ heißt das Spektrum von T .
- c) $\sigma_p(T) := \{\lambda \in \mathbb{C} : T - \lambda \text{ nicht injektiv}\}$ heißt das Punktspektrum von T (die Menge aller Eigenwerte von T).
- d) $\sigma_c(T) := \{\lambda \in \mathbb{C} : T - \lambda \text{ injektiv, } \overline{R(T - \lambda)} = \mathcal{H}, R(T - \lambda) \neq \mathcal{H}\}$ heißt das kontinuierliche Spektrum von T .
- e) $\sigma_r(T) := \{\lambda \in \mathbb{C} : T - \lambda \text{ injektiv, } \overline{R(T - \lambda)} \neq \mathcal{H}\}$ heißt das residuelle Spektrum (oder Restspektrum) von T .

1.8 Definition. Seien \mathcal{H} ein Hilbertraum und $T: \mathcal{H} \supset D(T) \rightarrow \mathcal{H}$ ein linearer dicht definierter Operator (d. h., es gelte $\overline{D(T)} = \mathcal{H}$). Definiere $D(T^*)$ als die Menge aller $y \in \mathcal{H}$, für welche ein $x^* \in \mathcal{H}$ existiert mit

$$\langle Tx, y \rangle = \langle x, x^* \rangle \quad (x \in D(T)).$$

Der adjungierte Operator T^* ist definiert auf dem Definitionsbereich $D(T^*)$ durch $T^*y := x^* \quad (y \in D(T^*))$.

1.9 Bemerkung. a) Da $D(T)$ dicht in \mathcal{H} liegt, ist das Element x^* eindeutig, und T^* ist wohldefiniert auf $D(T^*)$.

b) Der adjungierte Operator ist immer abgeschlossen. Falls T dicht definiert und abschließbar ist, ist auch T^* dicht definiert und $\overline{T} = T^{**}$.

c) Falls $T \in L(\mathcal{H})$, d. h., falls T stetiger linearer Operator ist, so gilt (nach der Cauchy-Schwarz-Ungleichung) $D(T^*) = \mathcal{H}$, und T^* ist durch die Bedingung

$$\langle Tx, y \rangle = \langle x, T^*y \rangle \quad (x, y \in \mathcal{H})$$

eindeutig festgelegt.

d) Sei T dicht definierter Operator. Man kann leicht zeigen, dass

$$\overline{R(T)} = (N(T^*))^\perp, \quad R(T)^\perp = N(T^*),$$

wobei für einen Unterraum $M \subset \mathcal{H}$ das orthogonale Komplement definiert ist durch $M^\perp := \{x \in \mathcal{H} : \langle m, x \rangle = 0 \text{ } (m \in M)\}$.

1.10 Definition. Sei \mathcal{H} ein Hilbertraum und $T: \mathcal{H} \supset D(T) \rightarrow \mathcal{H}$ ein linearer dicht definierter Operator. Dann heißt T

- (i) normal, falls $TT^* = T^*T$,
- (ii) unitär, falls $T \in L(\mathcal{H})$ und $TT^* = T^*T = \text{id}_{\mathcal{H}}$,
- (iii) selbstadjungiert, falls $T = T^*$,
- (iv) wesentlich selbstadjungiert, falls T abschließbar ist und \overline{T} selbstadjungiert ist,
- (v) symmetrisch, falls $T \subset T^*$ gilt.

1.11 Bemerkung. a) Direkt nach Definition gilt: Ein linearer dicht definierter Operator ist genau dann symmetrisch, falls

$$\langle Tx, y \rangle = \langle x, Ty \rangle \quad (x, y \in D(T)).$$

b) Ein stetiger linearer Operator ist genau dann selbstadjungiert, wenn er symmetrisch ist. Das folgt sofort aus $D(T^*) = D(T) = \mathcal{H}$.

c) Man kann leicht zeigen: Falls T selbstadjungiert ist, so gilt $\sigma(T) \subset \mathbb{R}$ und $\sigma_r(T) = \emptyset$. Dabei folgt die letzte Aussage sofort aus der Gleichheit $R(T - \lambda) = (N(T - \lambda))^\perp$ für $\lambda \in \mathbb{R}$ nach Bemerkung 1.9 c).

c) Observable

Ein quantenmechanisches System wird unter Verwendung der Operatortheorie beschrieben.

1.12 Definition. Ein quantenmechanisches System ist beschrieben durch einen separablen \mathbb{C} -Hilbertraum \mathcal{H} , zugehörige reine Zustände und Observablen. Dabei ist ein reiner Zustand ψ definiert als eindimensionaler Unterraum von \mathcal{H} . Eine Observable A (Messapparatur für eine physikalische Größe) ist definiert als selbstadjungierter Operator in \mathcal{H} .

Die Wahl des Hilbertraums sowie der Observablen hängt vom betrachteten System und der Modellierung ab.

1.13 Bemerkung. Ein eindimensionaler Unterraum von \mathcal{H} hat die Form $\{\lambda\psi : \lambda \in \mathbb{C}\}$ mit $\psi \in \mathcal{H}$, $\|\psi\| = 1$. Äquivalent kann man daher auch reine Zustände als normierte Vektoren in \mathcal{H} definieren, d. h. den Phasenraum $\{\psi \in \mathcal{H} : \|\psi\| = 1\}$ betrachten. Allerdings beschreibt ψ und $e^{i\theta}\psi$ mit $\theta \in \mathbb{R}$ nach Definition denselben Zustand.

1.14 Beispiel (Ortsobservable). Die eindimensionale Ortsobservable (Ortsoperator) Q ist im Hilbertraum $\mathcal{H} = L^2(\mathbb{R})$ definiert durch

$$\begin{aligned} D(Q) &:= \{f \in L^2(\mathbb{R}) : (x \mapsto x \cdot f(x)) \in L^2(\mathbb{R})\}, \\ (Qf)(x) &:= xf(x) \quad (f \in D(Q)). \end{aligned}$$

Man spricht vom Multiplikationsoperator mit der Funktion $\text{id}_{\mathbb{R}} : x \mapsto x$.

Um die Selbstadjungiertheit von Q zu zeigen, ist der folgende Satz nützlich:

1.15 Satz. Sei \mathcal{H} ein Hilbertraum und $T: \mathcal{H} \supset D(T) \rightarrow \mathcal{H}$ symmetrisch. Falls $R(T+i) = R(T-i) = \mathcal{H}$, so ist T selbstadjungiert.

Beweis. Nach Voraussetzung gilt $T \subset T^*$, es ist also nur $D(T^*) \subset D(T)$ zu zeigen. Sei $x \in D(T^*)$. Da $R(T-i) = \mathcal{H}$, existiert ein $y \in D(T)$ mit $(T-i)y = (T^*-i)x$. Wegen $T \subset T^*$ folgt $x-y \in N(T^*-i) = R(T+i)^\perp = \mathcal{H}^\perp = \{0\}$, d. h. $x = y \in D(T)$. Hier wurde Bemerkung 1.9 c) verwendet. \square

1.16 Satz. Die Ortsobservable Q ist selbstadjungiert.

Beweis. Für $f, g \in D(Q)$ gilt

$$\langle Qf, g \rangle = \int_{\mathbb{R}} xf(x)\overline{g(x)}dx = \int_{\mathbb{R}} f(x)\overline{xg(x)}dx = \langle f, Qg \rangle.$$

Dabei existieren die Integrale nach der Hölderschen Ungleichung

$$\|(Qf)g\|_{L^1(\mathbb{R})} \leq \|Qf\|_{L^2(\mathbb{R})}\|g\|_{L^2(\mathbb{R})} < \infty.$$

Also ist Q symmetrisch. Sei nun $g \in L^2(\mathbb{R})$ gegeben. Wir definieren $f_{\pm}(x) := \frac{g(x)}{x \pm i}$ ($x \in \mathbb{R}$). Wegen $|x \pm i| \geq 1$ ($x \in \mathbb{R}$) gilt $f \in L^2(\mathbb{R})$ mit $\|f\|_{L^2(\mathbb{R})} \leq \|g\|_{L^2(\mathbb{R})}$. Analog gilt

$$\left| \frac{x}{x \pm i} \right| \leq 1$$

und damit $(x \mapsto xf(x)) \in L^2(\mathbb{R})$. Also gilt $f \in D(Q) = D(Q \pm i)$. Nach Definition von f gilt $[(Q \pm i)f](x) = (x \pm i)f(x) = g(x)$ ($x \in \mathbb{R}$). Also ist $R(Q \pm i) = L^2(\mathbb{R})$, und nach Satz 1.15 ist Q selbstadjungiert. \square

1.17 Beispiel (Impulsobservable). Die Impulsobservable (Impulsoperator) P ist definiert im Hilbertraum $\mathcal{H} := L^2(\mathbb{R})$ durch

$$\begin{aligned} D(P) &:= H^1(\mathbb{R}), \\ Pf &:= -i\hbar f' \quad (f \in D(P)). \end{aligned}$$

Dabei ist $\hbar = \frac{h}{2\pi} \approx 6,582 \cdot 10^{-16}$ eVs eine physikalische Konstante, das reduzierte Plancksche Wirkungsquantum. Der Definitionsbereich von P ist der sogenannte L^2 -Sobolevraum erster Ordnung auf \mathbb{R} , der auf verschiedene Weisen definiert werden kann, z. B. durch

$$H^1(\mathbb{R}) := \{f \in L^2(\mathbb{R}) : f' \in L^2(\mathbb{R})\}.$$

Dabei ist die Ableitung einer L^2 -Funktion f im distributionellen Sinn zu verstehen. Eine Definition von f' , welche ohne den Begriff der Distribution auskommt, ist durch die schwache Ableitung gegeben. Für eine Funktion $f \in L^2(\mathbb{R})$ gilt $f' \in L^2(\mathbb{R})$ genau dann, wenn eine Funktion $g \in L^2(\mathbb{R})$ existiert mit

$$\int_{\mathbb{R}} f(x)\varphi'(x)dx = - \int_{\mathbb{R}} g(x)\varphi(x)dx \quad (\varphi \in C_0^\infty(\mathbb{R})).$$

In diesem Fall ist $f' = g$. Hier ist $C_0^\infty(\mathbb{R}) := \{\varphi \in C^\infty(\mathbb{R}) : \text{supp } \varphi \subset \mathbb{R} \text{ kompakt}\}$.

Für die Analyse des Impulsoperators ist die Fouriertransformation nützlich. Hier werden nur einige Eigenschaften zusammengefasst.

1.18 Definition und Satz. a) Für $f \in L^1(\mathbb{R}^n)$ heißt

$$(\mathcal{F}f)(\xi) := \frac{1}{(2\pi)^{n/2}} \int_{\mathbb{R}^n} f(x)e^{-ix\xi}dx$$

die Fourier-Transformierte von f .

b) Die Fourier-Transformation \mathcal{F} lässt sich von $L^1(\mathbb{R}^n) \cap L^2(\mathbb{R}^n)$ eindeutig fortsetzen zu einer unitären Abbildung $\mathcal{F} \in L(L^2(\mathbb{R}^n))$. Insbesondere ist \mathcal{F} bijektiv und isometrisch, d. h. es gilt $\|\mathcal{F}f\|_{L^2(\mathbb{R}^n)} = \|f\|_{L^2(\mathbb{R}^n)}$ ($f \in L^2(\mathbb{R}^n)$).

Für $g \in L^1(\mathbb{R}^n) \cap L^2(\mathbb{R}^n)$ ist die inverse Fouriertransformation gegeben durch

$$(\mathcal{F}^{-1}g)(x) = (\mathcal{F}^*g)(x) = \frac{1}{(2\pi)^{n/2}} \int_{\mathbb{R}^n} g(\xi)e^{ix\xi}d\xi.$$

c) Für $f \in L^2(\mathbb{R}^n)$ und $j = 1, \dots, n$ mit $\partial_{x_j}f \in L^2(\mathbb{R}^n)$ gilt

$$(\mathcal{F}\partial_{x_j}f)(\xi) = i\xi_j(\mathcal{F}f)(\xi) \quad (\xi \in \mathbb{R}^n).$$

Für $f \in L^2(\mathbb{R}^n)$ mit $x_jf \in L^2(\mathbb{R}^n)$ (dabei sei x_jf die Kurzbezeichnung für die Funktion $x \mapsto x_jf(x)$) gilt $\partial_{\xi_j}\mathcal{F}f \in L^2(\mathbb{R}^n)$ und

$$(\mathcal{F}(x_jf))(\xi) = -i\partial_{\xi_j}(\mathcal{F}f)(\xi) \quad (\xi \in \mathbb{R}^n).$$

1.19 Satz. Die Impulsobservable P ist selbstadjungiert.

Beweis. Nach Satz 1.18 c) gilt $P = \hbar \mathcal{F} Q \mathcal{F}^{-1}$ (mit Gleichheit der Definitionsbereiche). P ist dicht definiert wegen $C_0^\infty(\mathbb{R}) \subset D(P)$ und symmetrisch wegen

$$\begin{aligned} \langle Pf, g \rangle &= \hbar \langle \mathcal{F} Q \mathcal{F}^{-1} f, g \rangle = \hbar \langle Q \mathcal{F}^{-1} f, \mathcal{F}^{-1} g \rangle = \hbar \langle \mathcal{F}^{-1} f, Q \mathcal{F}^{-1} g \rangle \\ &= \hbar \langle f, \mathcal{F} Q \mathcal{F}^{-1} g \rangle = \langle f, Pg \rangle \end{aligned}$$

für alle $f, g \in D(P)$. Schließlich ist $P \pm i = \mathcal{F}^{-1}(Q \pm i)\mathcal{F}$ surjektiv, da $Q \pm i$ surjektiv ist und \mathcal{F} und \mathcal{F}^{-1} Isomorphismen von $L^2(\mathbb{R})$ sind. Nach Satz 1.15 ist P selbstadjungiert. \square

1.20 Satz. Für die Ortsobservable Q und die Impulsobservable P gilt

$$\sigma(Q) = \sigma_c(Q) = \mathbb{R}, \quad \sigma(P) = \sigma_c(P) = \mathbb{R}.$$

Beweis. (i) Wir betrachten zunächst Q . Nach Bemerkung 1.11 c) gilt $\sigma(Q) = \sigma_p(Q) \cup \sigma_c(Q) \subset \mathbb{R}$. Angenommen, $\lambda \in \mathbb{R}$ ist ein Eigenwert von Q . Dann existiert ein $f \in D(Q) \setminus \{0\}$ mit $Qf = \lambda f$, d. h. $(x - \lambda)f(x) = 0$ fast überall. Es folgt $f(x) = 0$ fast überall, d. h. $f = 0$ in $L^2(\mathbb{R})$, Widerspruch. Somit ist $\sigma_p(Q) = \emptyset$.

Für festes $\lambda \in \mathbb{R}$ sei

$$g(x) := \chi_{[\lambda-1, \lambda+1]}(x) := \begin{cases} 1, & x \in [\lambda - 1, \lambda + 1], \\ 0, & \text{sonst} \end{cases}$$

(charakteristische Funktion von $[\lambda - 1, \lambda + 1]$). Dann ist $g \in L^2(\mathbb{R})$. Falls ein f existiert mit $(Q - \lambda)f = g$, folgt $f(x) = \frac{1}{x - \lambda}$ für fast alle $x \in [\lambda - 1, \lambda + 1]$ und damit $f \notin L^2(\mathbb{R})$. Also ist $Q - \lambda$ für kein $\lambda \in \mathbb{R}$ surjektiv. Insgesamt erhalten wir $\sigma(Q) = \sigma_c(Q) = \mathbb{R}$.

(ii) Wegen $P = \hbar \mathcal{F} Q \mathcal{F}^{-1}$ folgt $\rho(P) = \hbar \rho(Q) := \{\hbar \lambda : \lambda \in \rho(Q)\}$. Falls f ein Eigenvektor zu Q zum Eigenwert λ ist, so ist $\mathcal{F}f$ ein Eigenvektor zu P zum Eigenwert $\hbar \lambda$. Somit folgt aus (i) $\sigma(P) = \sigma_c(P) = \mathbb{R}$. \square

d) Der Spektralsatz und die stochastische Interpretation

Um die stochastische Interpretation einer quantenmechanischen Messapparatur formulieren zu können, brauchen wir den Spektralsatz und den Begriff eines Spektralmaßes.

1.21 Definition. Sei \mathcal{H} ein Hilbertraum.

a) Ein stetiger linearer Operator $P \in L(\mathcal{H})$ heißt eine orthogonale Projektion, falls $P = P^2 = P^*$ gilt.

b) Sei $\Omega \subset \mathbb{R}$ abgeschlossen und $\mathcal{B}(\Omega)$ die Borel- σ -Algebra. Eine Abbildung $E: \mathcal{B}(\Omega) \rightarrow L(\mathcal{H})$ heißt ein Spektralmaß (oder ein projektorwertiges Maß, PV-Maß), falls gilt:

(i) $E(A)$ ist orthogonale Projektion ($A \in \mathcal{B}(\Omega)$).

(ii) Sei $(A_n)_{n \in \mathbb{N}} \subset \mathcal{B}(\Omega)$ eine Familie paarweise disjunkter Mengen. Dann gilt

$$\left[E\left(\bigcup_{n \in \mathbb{N}} A_n\right) \right] x = \sum_{n \in \mathbb{N}} E(A_n)x \quad (x \in \mathcal{H}).$$

(iii) Es gilt $E(\Omega) = \text{id}_{\mathcal{H}}$.

1.22 Bemerkung. Sei $x \in \mathcal{H}$. Dann ist $E_x: \mathcal{B}(\Omega) \rightarrow [0, \infty)$ mit

$$E_x(A) := \langle E(A)x, x \rangle = \|E(A)x\|^2 \quad (A \in \mathcal{B}(\Omega))$$

ein endliches Maß mit $E_x(\Omega) = \|x\|^2$.

1.23 Definition. Sei $E: \mathcal{B}(\Omega) \rightarrow L(\mathcal{H})$ ein Spektralmaß. Sei $f: X \rightarrow \mathbb{C}$ eine Stufenfunktion, d. h. es existiert eine Darstellung der Form $f = \sum_{i=1}^n f_i \chi_{A_i}$ mit $f_i \in \mathbb{C}$ und $A_i \in \mathcal{B}(\Omega)$ disjunkt. Dann heißt

$$\int f dE := \sum_{i=1}^n f_i E(A_i) \in L(\mathcal{H})$$

das Integral von f bzgl. E .

1.24 Definition und Satz (Integral über PV-Maß für messbare Funktionen). Sei $E: \mathcal{B}(\Omega) \rightarrow L(\mathcal{H})$ ein Spektralmaß, und sei $f: \Omega \rightarrow \mathbb{C}$ messbar.

Definiere

$$D\left(\int f(\lambda) dE(\lambda)\right) := \left\{ x \in \mathcal{H} : \int |f(\lambda)|^2 dE_x(\lambda) < \infty \right\}.$$

Dann existiert für alle $x \in D\left(\int f(\lambda) dE(\lambda)\right)$ eine Folge von Stufenfunktionen $f_n: \Omega \rightarrow \mathbb{C}$ mit $f_n \rightarrow f$ punktweise und $\int |f_n - f|^2 dE_x \rightarrow 0$ ($n \rightarrow \infty$), und der Operator

$$\begin{aligned} \int f(\lambda) dE(\lambda): \mathcal{H} \supset D\left(\int f dE\right) &\rightarrow \mathcal{H}, \\ x \mapsto \left(\int f(\lambda) dE(\lambda)\right)x &:= \lim_{n \rightarrow \infty} \left(\int f_n(\lambda) dE(\lambda)\right)x \end{aligned}$$

ist wohldefiniert.

Der Operator $\int f(\lambda)dE(\lambda)$ ist abgeschlossen, dicht definiert und normal. Falls f reellwertig ist, ist $\int f(\lambda)dE(\lambda)$ selbstadjungiert. Es gilt

$$\left\| \int f(\lambda)dE(\lambda)x \right\|^2 = \int |f(\lambda)|^2 dE_x(\lambda) = \int |f(\lambda)|^2 d\|E(\lambda)x\|^2 \quad (x \in \mathcal{H}).$$

Nach dem obigen Satz ist $\int f dE$ für jedes Spektralmaß E und jede messbare Funktion $f: \Omega \rightarrow \mathbb{R}$ ein selbstadjungierter Operator. Insbesondere gilt dies für $\int \lambda dE(\lambda)$. Der Spektralsatz besagt, dass umgekehrt zu jedem selbstadjungierten Operator T ein Spektralmaß existiert mit $T = \int \lambda dE(\lambda)$. Dies ermöglicht es unter anderem, Funktionen von Operatoren zu definieren.

1.25 Satz (Spektralsatz). Sei \mathcal{H} ein \mathbb{C} -Hilbertraum und $T: \mathcal{H} \supset D(T) \rightarrow \mathcal{H}$ ein selbstadjungierter Operator. Dann existiert genau ein Spektralmaß $E: \mathcal{B}(\sigma(T)) \rightarrow L(\mathcal{H})$ mit

$$T = \int_{\sigma(T)} \lambda dE(\lambda).$$

Für jede messbare Funktion $f: \sigma(T) \rightarrow \mathbb{C}$ wird durch

$$f(T) := \int_{\sigma(T)} f(\lambda)dE(\lambda)$$

$$D(f(T)) := \left\{ x \in \mathcal{H} : \int_{\sigma(T)} |f(\lambda)|^2 dE_x(\lambda) < \infty \right\}$$

ein normaler Operator definiert. Falls f ein Polynom ist, stimmt $f(T)$ mit der üblichen Definition (siehe Definition 1.5 d)) überein.

Falls $f, g: \sigma(T) \rightarrow \mathbb{C}$ messbare Funktionen sind, so gilt folgender Funktionalkalkül:

$$(f(T))^* = \bar{f}(T),$$

$$f(T) + g(T) \subset (f + g)(T),$$

$$f(T)g(T) \subset (fg)(T).$$

1.26 Bemerkung. a) Man sagt, zwei Operatoren S und T vertauschen, falls $ST = TS$ gilt (mit Gleichheit der zugehörigen Definitionsbereiche). Falls $T = T^*$ und E das Spektralmaß zu T ist, so vertauscht ein Operator $S \in L(\mathcal{H})$ mit T genau dann, wenn S mit allen Projektionen $E(A)$, $A \in \mathcal{B}(\sigma(T))$, vertauscht. In diesem Fall vertauscht S auch mit allen Funktionen $f(T)$ von T . (Ohne Beweis, siehe dazu auch Definition 3.9 für den Begriff der Vertauschbarkeit zweier unbeschränkter Operatoren.)

b) Wählt man $f(\lambda) := 1$ ($\lambda \in \sigma(T)$), so erhält man (Integral über Stufenfunktion)

$$\int 1 dE(\lambda) = f(T) = E(\sigma(T)) = \text{id}_{\mathcal{H}}.$$

Daher heißt ein Spektralmaß auch eine Resolution der Identität.

1.27 Bemerkung. Man kann zeigen, dass eine reelle Zahl λ genau dann Eigenwert von T ist, falls $E(\{\lambda\}) \neq 0$ gilt. In diesem Fall ist $R(E(\{\lambda\}))$ der Eigenraum zum Eigenwert λ , und für $\psi \in R(E(\{\lambda\}))$ gilt $E_\psi(\{\lambda\}) = 1$.

1.28 Satz. Sei T ein selbstadjungierter Operator mit $\sigma_c(T) = \emptyset$. Dann ist $\sigma(T) = \sigma_p(T)$ höchstens abzählbar, und es existiert eine Orthonormalbasis $\{\psi_j\}_{j \in \mathbb{N}}$ von \mathcal{H} aus Eigenfunktionen von T . Es gilt

$$\begin{aligned}\psi &= \int 1 dE(\lambda)\psi = \sum_{j=1}^{\infty} \langle \psi, \psi_j \rangle \psi_j \quad (\psi \in \mathcal{H}), \\ T\psi &= \int \lambda dE(\lambda)\psi = \sum_{j=1}^{\infty} \lambda_j \langle \psi, \psi_j \rangle \psi_j \quad (\psi \in D(T)), \\ f(T)\psi &= \int f(\lambda) dE(\lambda)\psi = \sum_{j=1}^{\infty} f(\lambda_j) \langle \psi, \psi_j \rangle \psi_j \quad (\psi \in D(f(T)))\end{aligned}$$

für jede Funktion $f: \sigma_p(T) \rightarrow \mathbb{C}$, wobei $T\psi_j = \lambda_j\psi_j$.

Beweis. Seien μ_1, μ_2 zwei verschiedene Eigenwerte von T mit Eigenfunktionen φ_1, φ_2 . Dann gilt $\langle \varphi_1, \varphi_2 \rangle = 0$.

Sei λ ein Eigenwert von T . Da $T - \lambda$ ein abgeschlossener Operator ist, ist der Eigenraum $N(T - \lambda)$ ein abgeschlossener Unterraum von \mathcal{H} und damit selbst ein Hilbertraum. Daher existiert eine Orthonormalbasis $\{\varphi_{\lambda,j} : j < N_\lambda\}$ von $N(T - \lambda)$ mit $N_\lambda \in \mathbb{N} \cup \{\infty\}$. Die Vereinigung all dieser Orthonormalbasen $S := \bigcup_{\lambda \in \sigma_p(T)} \{\varphi_{\lambda,j} : j < N_\lambda\}$ ist ein Orthonormalsystem in \mathcal{H} und damit höchstens abzählbar (\mathcal{H} ist separabel). Schreibe daher $S = \{\psi_j : j < N\}$ mit $N \in \mathbb{N} \cup \{\infty\}$. Insbesondere ist $\sigma(T) = \sigma_p(T)$ höchstens abzählbar. Wir definieren λ_j durch $T\psi_j = \lambda_j\psi_j$ (Eigenwerte inklusive Vielfachheit).

Für $\lambda \in \sigma_p(T)$ ist $E(\{\lambda\})$ die orthogonale Projektion auf den Eigenraum $N(T - \lambda)$. Mit den Bezeichnungen von oben gilt daher

$$E(\{\lambda\})\psi = \sum_{j < N_\lambda} \langle \psi, \varphi_{\lambda,j} \rangle \varphi_{\lambda,j}$$

(beachte, dass die orthogonale Projektion auf den eindimensionalen linearen Unterraum $\{\alpha\psi_j : \alpha \in \mathbb{C}\}$ gegeben durch $\psi \mapsto \langle \psi, \psi_j \rangle \psi_j$). Damit gilt für jede Funktion $f: \sigma_p(T) \rightarrow \mathbb{C}$ und alle $\psi \in D(f(T))$:

$$\begin{aligned}f(T)\psi &= \int_{\sigma_p(T)} f(\mu) dE(\mu)\psi = \sum_{\lambda \in \sigma_p(T)} \int_{\{\lambda\}} f(\mu) dE(\mu)\psi \\ &= \sum_{\lambda \in \sigma_p(T)} f(\lambda) E(\{\lambda\})\psi\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&= \sum_{\lambda \in \sigma_p(T)} f(\lambda) \sum_{j < N_\lambda} \langle \psi, \varphi_{\lambda,j} \rangle \varphi_{\lambda,j} \\
&= \sum_{j < N} f(\lambda_j) \langle \psi, \psi_j \rangle \psi_j.
\end{aligned}$$

Speziell für $f(\lambda) = 1$ ($\lambda \in \sigma_p(T)$) erhält man

$$\psi = \sum_{j < N} \langle \psi, \psi_j \rangle \psi_j \quad (\psi \in \mathcal{H}).$$

Damit ist $\{\psi_j\}_{j < N}$ eine Orthonormalbasis von \mathcal{H} und es gilt $N = \infty$ (\mathcal{H} ist unendlich-dimensional). Die Darstellung für $T\psi$ folgt mit $f = \text{id}_{\sigma_p(T)}$. \square

1.29 Definition. Sei T eine Observable im quantenmechanischen System \mathcal{H} , und sei $\psi \in D(T)$ ein reiner Zustand. Eine Messung der Observablen T , falls sich das System im Zustand ψ befindet, entspricht der Anwendung von T auf ψ .

Sei E das zur Observablen T gehörige Spektralmaß auf $\mathcal{B}(\sigma(T))$. Dann ist für jede Menge $A \in \mathcal{B}(\sigma(T))$ die Wahrscheinlichkeit dafür, dass der gemessene Wert in A liegt, gegeben durch

$$\langle E(A)\psi, \psi \rangle = \|E(A)\psi\|^2 = E_\psi(A).$$

Man spricht von der stochastischen Interpretation eines quantenmechanischen Systems.

1.30 Bemerkung. a) Nach Bemerkung 1.22 gilt $E_\psi(A) \leq \|\psi\|^2 = 1$ und $E_\psi(\sigma(T)) = 1$, d. h. E_ψ ist tatsächlich ein Wahrscheinlichkeitsmaß.

b) Es gilt $E_\psi(\{\lambda\}) > 0$ genau dann, wenn λ ein Eigenwert von T ist und ψ ein zugehöriger Eigenvektor.

1.31 Definition. Seien $T: \mathcal{H} \supset D(T) \rightarrow \mathcal{H}$ eine Observable mit Spektralmaß E und $\psi \in D(T)$ ein reiner Zustand. Dann heißt

$$\langle T \rangle_\psi := \langle \psi, T\psi \rangle = \int \lambda dE_\psi(\lambda)$$

der Erwartungswert von T im Zustand ψ . Für $\psi \in D(T^2) \subset D(T)$ ist die Varianz von T im Zustand ψ definiert als

$$\text{var}_\psi T := \left\langle \psi, (T - \langle T \rangle_\psi \text{id}_{\mathcal{H}})^2 \psi \right\rangle = \int (\lambda - \langle T \rangle_\psi)^2 dE_\psi(\lambda).$$

Die Größe $(\Delta T)_\psi := \sqrt{\text{var}_\psi T}$ heißt die Standardabweichung oder Unschärfe von T im Zustand ψ .

Da E_ψ ein Wahrscheinlichkeitsmaß ist, entsprechen die obigen Definitionen den üblichen Definitionen von Erwartungswert und Varianz aus der Stochastik.

1.32 Lemma. *In der Situation von Definition 1.31 gilt $(\Delta T)_\psi = 0$ genau dann, wenn ψ ein Eigenvektor von T zum Eigenwert $\lambda_0 := \langle T \rangle_\psi$ ist.*

Beweis. Die folgenden Bedingungen sind alle äquivalent:

$$\begin{aligned} (\Delta T)_\psi &= 0, \\ \int (\lambda - \lambda_0)^2 dE_\psi(\lambda) &= 0, \\ T &= \lambda_0 \text{ } E_\psi\text{-fast überall,} \\ E_\psi(\{\lambda_0\}) &= 1, \\ \psi &\in R(E(\{\lambda_0\})), \\ \psi &\in N(T - \lambda_0). \end{aligned}$$

□

1.33 Satz (Heisenbergsche Unschärferelation). *Seien S, T Observable und sei $\psi \in D(S^2) \cap D(ST) \cap D(TS) \cap D(T^2)$. Dann gilt*

$$(\Delta S)_\psi (\Delta T)_\psi \geq \frac{1}{2} \langle C \rangle_\psi \quad \text{mit } C := -i(ST - TS).$$

Beweis. Sei $a := \langle S \rangle_\psi$, $b := \langle T \rangle_\psi$, $S_0 := S - a$ und $T_0 := T - b$. Dann ist

$$S_0 T_0 - S_0 T_0 = ST - TS = iC$$

und

$$\|S_0 \psi\| = \langle \psi, S_0^2 \psi \rangle^{1/2} = (\Delta S)_\psi.$$

Analog gilt $\|T_0 \psi\| = (\Delta T)_\psi$. Wir haben

$$2i \operatorname{Im} \langle S_0 \psi, T_0 \psi \rangle = \langle S_0 \psi, T_0 \psi \rangle - \langle T_0 \psi, S_0 \psi \rangle = \langle \psi, (S_0 T_0 - T_0 S_0) \psi \rangle = -i \langle \psi, C \psi \rangle.$$

Daraus folgt

$$\begin{aligned} (\Delta S)_\psi (\Delta T)_\psi &= \|S_0 \psi\| \cdot \|T_0 \psi\| \geq |\langle S_0 \psi, T_0 \psi \rangle| \\ &\geq |\operatorname{Im} \langle S_0 \psi, T_0 \psi \rangle| = \frac{1}{2} |\langle \psi, C \psi \rangle| = \frac{1}{2} \langle C \rangle_\psi. \end{aligned}$$

□

1.34 Satz (Kanonische Vertauschungsrelation nach Heisenberg). Für die Ortsvariable Q und die Impulsvariable P gilt

$$QP - PQ \subset i\hbar \operatorname{id}_{L^2(\mathbb{R})}.$$

Beweis. Für $\psi \in C_0^\infty(\mathbb{R})$ gilt

$$[(QP - PQ)\psi](x) = -i\hbar x\psi'(x) + i\hbar\psi(x) + i\hbar x\psi'(x) = i\hbar\psi(x).$$

Damit gilt

$$QP - PQ|_{C_0^\infty(\mathbb{R})} = i\hbar \operatorname{id}_{C_0^\infty(\mathbb{R})}.$$

Sei $C := \frac{1}{i\hbar}(QP - PQ)$. Dann ist C symmetrisch, d. h. es gilt $C \subset C^*$, und $\operatorname{id}_{C_0^\infty(\mathbb{R})} = C|_{C_0^\infty(\mathbb{R})} \subset C \subset C^*$. Damit erhalten wir

$$C \subset \bar{C} = C^{**} \subset \left(\operatorname{id}_{C_0^\infty(\mathbb{R})}\right)^* = \left(\overline{\operatorname{id}_{C_0^\infty(\mathbb{R})}}\right)^* = (\operatorname{id}_{L^2(\mathbb{R})})^* = \operatorname{id}_{L^2(\mathbb{R})}.$$

□

1.35 Korollar (Orts-Impuls-Unschärferelation). Für die Orts- und Impulsobservablen gilt die Unschärferelation

$$(\Delta Q)_\psi (\Delta P)_\psi \geq \frac{\hbar}{2} \quad (\psi \in D(Q^2) \cap D(P^2), \|\psi\| = 1).$$

1.36 Satz. Das zur Ortsobservable Q gehörige Spektralmaß ist gegeben durch $E(A)\psi = \chi_A \psi$ ($A \in \mathcal{B}(\mathbb{R})$, $\psi \in L^2(\mathbb{R})$), wobei χ_A die charakteristische Funktion von A ist. Damit gilt $\|E(A)\psi\|^2 = \int_A |\psi(x)|^2 dx$, d.h. $|\psi(\cdot)|^2$ ist die Wahrscheinlichkeitsdichte für den Aufenthaltsort.

Beweis. Wir definieren $E(A)\psi := \chi_A \psi$ für $A \in \mathcal{B}(\mathbb{R})$ und $\psi \in L^2(\mathbb{R})$. Man rechnet leicht direkt nach, dass $E: \mathcal{B}(\mathbb{R}) \rightarrow L(L^2(\mathbb{R}))$ ein Spektralmaß ist. Setze $\tilde{Q} := \int_{\mathbb{R}} \lambda dE(\lambda)$. Dann ist \tilde{Q} ein selbstadjungierter Operator. Sei

$$\psi \in D(\tilde{Q}) = \left\{ \psi \in L^2(\mathbb{R}) : \int |\lambda|^2 d\|E(\lambda)\psi\|_{L^2(\mathbb{R})}^2 < \infty \right\}.$$

Wir wählen eine Folge $(f_n)_{n \in \mathbb{N}}$ von Stufenfunktionen auf \mathbb{R} , welche monoton und punktweise gegen die Funktion $x \mapsto x^2$ konvergiert, $f_n = \sum_{k=1}^{K_n} c_{kn} \chi_{A_{kn}}$. Dann gilt jeweils nach der Definition des Integrals

$$\int_{\mathbb{R}} x^2 |\psi(x)|^2 dx = \lim_{n \rightarrow \infty} \int f_n(x) |\psi(x)|^2 dx$$

$$\begin{aligned}
&= \lim_{n \rightarrow \infty} \sum_{k=1}^{K_n} c_{kn} \int_{\mathbb{R}} |\psi(x)|^2 \chi_{A_{kn}}(x) dx \\
&= \lim_{n \rightarrow \infty} \sum_{k=1}^{K_n} c_{kn} \|E(A_{kn})\psi\|_{L^2(\mathbb{R})}^2 \\
&= \lim_{n \rightarrow \infty} \int f_n(\lambda) d\|E(\lambda)\psi\|_{L^2(\mathbb{R})}^2 \\
&= \int \lambda^2 d\|E(\lambda)\psi\|_{L^2(\mathbb{R})}^2.
\end{aligned}$$

Damit gilt $\psi \in D(\tilde{Q})$ genau dann, wenn $\psi \in D(Q)$. Analog zeigt man für $\psi \in D(\tilde{Q})$ und $\varphi \in L^2(\mathbb{R})$ die Gleichheit

$$\int_{\mathbb{R}} x\psi(x)\overline{\varphi(x)}dx = \int_{\mathbb{R}} \lambda d\langle E(\lambda)\psi, \varphi \rangle.$$

Damit gilt $\langle Q\psi, \varphi \rangle = \langle \tilde{Q}\psi, \varphi \rangle$ ($\varphi \in L^2(\mathbb{R})$) und daher $Q\psi = \tilde{Q}\psi$. Insgesamt folgt $\tilde{Q} = Q$, d.h. E ist das Spektralmaß zu Q . Insbesondere gilt $\|E(A)\psi\| = \|\chi_A\psi\|^2 = \int_A |\psi(x)|^2 dx$. \square

2. Die zeitliche Entwicklung eines quantenmechanischen Systems

a) Der Satz von Stone

Im folgenden sei \mathcal{H} ein separabler \mathbb{C} -Hilbertraum.

2.1 Definition. Eine Abbildung $U: \mathbb{R} \rightarrow L(\mathcal{H})$ heißt eine starkstetige unitäre Gruppe, falls gilt:

- (i) $U(t)$ ist unitär, und es gilt $U(t+t') = U(t)U(t')$ ($t, t' \in \mathbb{R}$).
- (ii) Die Abbildung $t \mapsto U(t)x$, $\mathbb{R} \rightarrow \mathcal{H}$, ist stetig für jedes $x \in \mathcal{H}$, d. h. die Familie $(U(t))_{t \in \mathbb{R}}$ ist starkstetig.

2.2 Satz. Sei $T: \mathcal{H} \supset D(T) \rightarrow \mathcal{H}$ ein selbstadjungierter Operator. Definiere $U(t) := e^{itT}$ ($t \in \mathbb{R}$) durch den Funktionalkalkül. Dann gilt:

- a) $(U(t))_{t \in \mathbb{R}}$ ist eine starkstetige unitäre Gruppe.
- b) Für $x \in D(T)$ existiert $U'(0)x := \lim_{t \rightarrow 0} \frac{1}{t}(U(t)x - x)$, und es gilt $U'(0)x = iTx$.
- c) Für $x \in \mathcal{H}$, für welches $U'(0)x$ existiert, gilt $x \in D(T)$.
- d) Für $x \in D(T)$ gilt

$$\frac{1}{t}(U(s+t) - U(s))x = \frac{1}{t}(U(t) - \text{id}_{\mathcal{H}})U(s)x \xrightarrow{t \rightarrow 0} U(s)iTx = iTU(s)x.$$

Insbesondere ist $U(s)x \in D(T)$ ($s \in \mathbb{R}$).

Dieser Satz hat folgende Bedeutung für die Lösung von Gleichungen, etwa Differentialgleichungen. In der obigen Situation definiere $y: \mathbb{R} \rightarrow D(T) \subset \mathcal{H}$ durch $y(t) := U(t)x$. Dann ist y eine Lösung der Gleichung

$$\begin{aligned} -i \frac{d}{dt} y(t) &= Ty(t) \quad (t \in \mathbb{R}), \\ y(0) &= x. \end{aligned}$$

Beweis. a) Die Gruppeneigenschaft folgt direkt aus dem Funktionalkalkül.

Es gilt mit majorisierter Konvergenz

$$\|(U(t) - \text{id}_{\mathcal{H}})x\|^2 = \int |e^{its} - 1|^2 dE_x(s) \longrightarrow 0 \quad (t \rightarrow 0).$$

Damit folgt

$$\|U(t)x - U(t_0)x\| \leq \|U(t_0)\| \cdot \|(U(t - t_0) - \text{id}_{\mathcal{H}})x\| \longrightarrow 0 \quad (t \rightarrow t_0).$$

b) Sei $x \in D(T)$. Dann ist

$$\left\| \frac{1}{t}(U(t)x - x) - iTx \right\|^2 = \int \left| \frac{1}{t}(e^{its} - 1) - is \right|^2 dE_x(s).$$

Es gilt $|\frac{1}{t}(e^{its} - 1)| \leq s$, denn z. B. gilt $i \int_0^s e^{it\lambda} d\lambda = \frac{1}{t}(e^{its} - 1)$. Damit

$$\int \left| \left(\frac{1}{t}e^{its} - 1 \right) - is \right|^2 dE_x(s) \leq \int 4s^2 dE_x(s) < \infty,$$

da $x \in D(T)$, d.h. $\text{id}_{\sigma(T)} \in L^2(E_x)$. Wegen $\frac{1}{t}(e^{its} - 1) - is \rightarrow 0 \quad (t \rightarrow 0)$ folgt mit majorisierter Konvergenz

$$\left\| \frac{1}{t}(U(t) - \text{id}_{\mathcal{H}})x - iTx \right\|^2 = \int \left| \left(\frac{1}{t}e^{its} - 1 \right) - is \right|^2 dE_x(s) \rightarrow 0 \quad (t \rightarrow 0).$$

c) Definiere den Operator S durch

$$D(S) := \left\{ x \in \mathcal{H} : U'(0)x = \lim_{t \rightarrow 0} \frac{U(t)x - x}{t} \text{ existiert} \right\},$$

$$Sx := -iU'(0)x \quad (x \in D(S)).$$

Dann ist S linear, und wegen $D(S) \supset D(T)$ ist $D(S)$ dicht in \mathcal{H} . Für $x, y \in D(S)$ gilt

$$\begin{aligned} \langle Sx, y \rangle &= \left\langle -i \lim_{t \rightarrow 0} \frac{U(t) - \text{id}_{\mathcal{H}}}{t} x, y \right\rangle \\ &= \lim_{t \rightarrow 0} \left\langle -i \frac{U(t) - \text{id}_{\mathcal{H}}}{t} x, y \right\rangle \\ &= \left\langle x, i \lim_{t \rightarrow 0} \frac{U(-t) - \text{id}_{\mathcal{H}}}{t} y \right\rangle \\ &= \left\langle x, -i \lim_{t \rightarrow 0} \frac{U(t) - \text{id}_{\mathcal{H}}}{t} y \right\rangle \\ &= \langle x, Sy \rangle. \end{aligned}$$

Also ist S symmetrisch, d. h. es gilt $S \subset S^*$. Andererseits ist $S \supset T$ und damit $S^* \subset T^* = T \subset S$. Wir erhalten $S = T$, was c) zeigt.

d) folgt aus a) und b). Beachte dazu

$$\begin{aligned} y'(t_0) &= \frac{d}{dt} U(t)x|_{t=t_0} = \frac{d}{ds} U(t_0 + s)x|_{s=0} \\ &= U(t_0) \frac{d}{ds} U(s)|_{s=0} x = U(t_0)U'(0)x = iTU(t_0)x \\ &= iTy(t_0). \end{aligned}$$

□

Der Satz von Stone besagt, dass alle starkstetigen unitären Gruppen die Form e^{itT} mit einem selbstadjungierten Operator T haben. Für den Beweis brauchen wir noch eine Aussage über wesentlich selbstadjungierte Operatoren, welche im folgenden Satz enthalten sind, der nützliche Eigenschaften symmetrischer Operatoren aufzählt.

2.3 Satz. Sei $T: \mathcal{H} \supset D(T) \rightarrow \mathcal{H}$ ein symmetrischer Operator. Dann gilt:

- (i) T ist abschließbar, und $\bar{T} = T^{**}$.
- (ii) \bar{T} ist symmetrisch, und $\bar{T}^* = T^*$.
- (iii) Für alle $\lambda \in \mathbb{C} \setminus \mathbb{R}$ existiert eine Konstante $C = C_\lambda > 0$ mit

$$\|(T + \lambda)x\| \geq C\|x\| \quad (x \in D(T)).$$

- (iv) T ist genau dann abgeschlossen, wenn $R(T \pm i)$ beide abgeschlossen sind.
- (v) T ist genau dann selbstadjungiert, wenn $R(T \pm i) = \mathcal{H}$.
- (vi) T ist genau dann wesentlich selbstadjungiert, wenn $\overline{R(T \pm i)} = \mathcal{H}$.

Beweis. Hier werden nur exemplarisch einige Aussagen bewiesen, der Rest ist dem Leser als Übung überlassen.

(i) Da T^* abgeschlossen und eine Fortsetzung von T ist, ist T abschließbar. Die zweite Aussage ist Übung.

(ii) Wegen $T \subset \bar{T}$ ist $T^* \supset \bar{T}^*$, zu zeigen ist noch „ \subset “. Sei $(x, \bar{T}x) \in G(\bar{T})$. Dann existiert eine Folge $(x_n, Tx_n)_{n \in \mathbb{N}} \subset G(T)$ mit $x_n \rightarrow x$ und $Tx_n \rightarrow \bar{T}x$. Für alle $(y, z) \in G(T^*)$ gilt nach Definition von T^*

$$\langle Tx_n, y \rangle = \langle x_n, z \rangle \quad (n \in \mathbb{N}).$$

Mit $n \rightarrow \infty$ folgt $\langle \bar{T}x, y \rangle = \langle x, z \rangle$. Da dies für alle $x \in D(\bar{T})$ gilt, folgt $(y, z) \in G(\bar{T}^*)$, und wir erhalten $\bar{T}^* = T^*$.

Aus $T \subset T^*$ folgt $\bar{T}^* = T^* \supset T^{**} = \bar{T}$, also ist \bar{T} wieder symmetrisch.

(iii) folgt sofort durch Betrachten von $\text{Im}(\langle (T + \lambda)x, x \rangle)$.

(iv) Sei T abgeschlossen und $((T \pm i)x_n)_{n \in \mathbb{N}} \subset R(T \pm i)$ mit $(T \pm i)x_n \rightarrow y \in \mathcal{H}$. Da $((T \pm i)x_n)_n$ eine Cauchyfolge ist, gilt dies nach (iii) auch für $(x_n)_n$ selbst, d.h. $x_n \rightarrow x \in \mathcal{H}$. Da T abgeschlossen ist, folgt $x \in D(T \pm i)$ und $(T \pm i)x = y$. Also ist $y \in R(T \pm i)$, d.h. $R(T \pm i)$ ist abgeschlossen. Die andere Richtung folgt analog.

(v) ist Satz 1.15.

(vi) folgt durch Anwendung von (iv) und (v) auf \bar{T} . □

2.4 Satz (von Stone). Sei \mathcal{H} ein \mathbb{C} -Hilbertraum und $U: \mathbb{R} \rightarrow L(\mathcal{H})$ eine stark-stetige unitäre Gruppe. Dann existiert ein selbstadjungierter Operator $T: \mathcal{H} \supset D(T) \rightarrow \mathcal{H}$ mit $U(t) = e^{itT}$. Der Operator T heißt der infinitesimale Erzeuger von U . Es gilt

$$D(T) = \left\{ x \in \mathcal{H} : U'(0)x = \lim_{t \rightarrow 0} \frac{1}{t}(U(t)x - x) \in \mathcal{H} \text{ existiert} \right\}$$

und

$$Tx = -iU'(0)x \quad (x \in D(T)).$$

Beweis. (i) Sei $f \in C_0^\infty(\mathbb{R})$ und $x \in \mathcal{H}$. Dann ist die Funktion $g: \mathbb{R} \rightarrow \mathcal{H}$, $t \mapsto f(t)U(t)x$ stetig mit kompaktem Träger. Wegen $\|g(t)\| = |f(t)| \cdot \|x\|$ ist g integrierbar bezüglich des Lebesgue-Maßes, d. h.

$$x_f := \int_{\mathbb{R}} g(t)dt = \int_{\mathbb{R}} f(t)U(t)xdt \in \mathcal{H}$$

existiert. Sei $D := \text{span}\{x_f : f \in C_0^\infty(\mathbb{R}), x \in \mathcal{H}\}$.

(ii) Es gilt $\overline{D} = \mathcal{H}$. Dazu wählen wir $\psi \in C_0^\infty$ mit $\psi \geq 0$, $\text{supp } \psi \in [-1, 1]$ und $\int \psi(t)dt = 1$. Für $\varepsilon > 0$ sei $\psi_\varepsilon(t) := \frac{1}{\varepsilon}\psi(\frac{t}{\varepsilon})$. Dann ist $\text{supp } \psi_\varepsilon \subset [-\varepsilon, \varepsilon]$ und $\int \psi_\varepsilon(t)dt = 1$.

Für $x \in \mathcal{H}$ gilt

$$\|x_{\psi_\varepsilon} - x\| = \left\| \int \psi_\varepsilon(t)(U(t)x - x)dt \right\| \leq \sup_{|t| \leq \varepsilon} \|U(t)x - x\| \cdot \int \psi_\varepsilon(t)dt \rightarrow 0 \quad (\varepsilon \rightarrow 0).$$

(iii) (Definition des Operators S) Es gilt

$$U(s)x_f = U(s) \int f(t)U(t)xdt = \int f(t)U(t+s)xdt = \int f(t-s)U(t)xdt,$$

wobei die Transformation $t \rightarrow t - s$ verwendet wurde. Es gilt

$$\left| \frac{1}{s}(f(t-s) - f(t)) \right| = \left| -\frac{1}{s} \int_0^s f'(t-\tau)d\tau \right| \leq \left| \frac{1}{s} s \right| \sup_{\tau \in \mathbb{R}} |f'(\tau)|.$$

Nach dem Satz über majorisierte Konvergenz ist

$$\frac{1}{s}(U(s) - \text{id}_{\mathcal{H}})x_f = \int \frac{f(t-s) - f(t)}{s} U(t)xdt \xrightarrow{s \rightarrow 0} \int (-f')(t)U(t)xdt.$$

Definiere nun den linearen Operator S durch $D(S) := D$ und

$$Sx_f := \lim_{s \rightarrow 0} \frac{1}{is}(U(s) - \text{id}_{\mathcal{H}})x_f = \frac{1}{i} x_{-f'}.$$

(iv) (Eigenschaften von S) Es gilt $\overline{D(S)} = \mathcal{H}$, $U(t)D(S) \subset D(S)$ ($t \in \mathbb{R}$), $S(D(S)) \subset D(S)$ und $U(t)Sx = SU(t)x$ für $t \in \mathbb{R}$, $x \in D(S)$. Alles dies gilt nach Konstruktion von S .

S ist symmetrisch: Seien $x, y \in D(S)$. Dann gilt

$$\begin{aligned} \langle x, Sy \rangle &= \lim_{s \rightarrow 0} \left\langle x, \frac{1}{is} (U(s) - \text{id}_{\mathcal{H}}) y \right\rangle = \lim_{s \rightarrow 0} \left\langle -\frac{1}{is} (U(-s) - \text{id}_{\mathcal{H}}) x, y \right\rangle \\ &= \lim_{s \rightarrow 0} \left\langle \frac{1}{is} (U(s) - \text{id}_{\mathcal{H}}) x, y \right\rangle = \langle Sx, y \rangle. \end{aligned}$$

S ist wesentlich selbstadjungiert: Sei $y \in \ker(S^* - i)$. Dann gilt für $x \in D(S)$

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \langle U(t)x, y \rangle &= \lim_{s \rightarrow 0} \frac{1}{s} (\langle U(t+s)x, y \rangle - \langle U(t)x, y \rangle) \\ &= \lim_{s \rightarrow 0} \left\langle \frac{U(s) - \text{id}_{\mathcal{H}}}{s} U(t)x, y \right\rangle = \langle iSU(t)x, y \rangle \\ &= \langle iU(t)x, S^*y \rangle \stackrel{(*)}{=} \langle iU(t)x, iy \rangle = \langle U(t)x, y \rangle. \end{aligned}$$

An der Stelle (*) wurde verwendet, dass $y \in \ker(S^* - i)$ war. Damit erfüllt die Funktion $f(t) := \langle U(t)x, y \rangle$ die Differentialgleichung $f' = f$, d.h. $f(t) = f(0)e^t$. Wegen

$$|f(t)| \leq \|U(t)x\| \cdot \|y\| = \|x\| \cdot \|y\|$$

ist f beschränkt und damit $f = 0$.

Also haben wir $\langle x, U(t)^*y \rangle = \langle U(t)x, y \rangle = 0$ für alle $x \in D(S)$, d.h. $\|y\| = \|U(t)^*y\| = 0$. Wir haben gezeigt, dass $\ker(S^* - i) = \{0\}$. Genauso sieht man $\ker(S^* + i) = \{0\}$. Somit gilt $\overline{R(S \pm i)} = (\ker(S^* \mp i))^\perp = \mathcal{H}$, und nach Satz 2.3 ist S wesentlich selbstadjungiert.

(v) (Definition von T) Sei $T := \overline{S}$. Dann ist T nach (iv) selbstadjungiert. Setze $V := e^{iT}$. Zu zeigen ist noch $U(t) = V(t)$ ($t \in \mathbb{R}$).

Falls $x \in D(S) \subset D(T)$, so gilt $V'(t)x = iTV(t)x$ nach Satz 2.2 und $U'(t)x = iSU(t)x$ nach (iv). Für $w(t) := U(t)x - V(t)x$ erhalten wir

$$w'(t) = iSU(t)x - iTV(t)x = iTw(t)$$

und damit

$$\frac{d}{dt} \|w(t)\|^2 = \langle w'(t), w(t) \rangle + \langle w(t), w'(t) \rangle = i \left[\langle Tw(t), w(t) \rangle - \langle w(t), Tw(t) \rangle \right] = 0.$$

(Hier wurde verwendet, dass $T = \overline{S}$ wieder symmetrisch ist). Wegen $w(0) = (U(0) - V(0))x = 0$ folgt daraus $w = 0$, d.h. $U(t)x = V(t)x$ für alle $x \in D(S)$ und $t \in \mathbb{R}$. Da $D(S)$ dicht in \mathcal{H} ist, folgt $U(t) = V(t)$ für alle $t \in \mathbb{R}$. \square

2.5 Beispiele. a) Die zum Ortsoperator Q zugeordnete unitäre starkstetige Gruppe $(e^{itQ})_{t \in \mathbb{R}} \subset L(L^2(\mathbb{R}))$ ist gegeben durch

$$(e^{itQ}\psi)(x) = e^{itx}\psi(x) \quad (\psi \in L^2(\mathbb{R})).$$

Dies folgt direkt aus dem Spektralsatz, da die Darstellung

$$\langle Q\psi, \varphi \rangle = \int_{\mathbb{R}} x\psi(x)\overline{\varphi(x)}dx$$

bereits die Spektralzerlegung des Operators ist (siehe oben).

b) Die zum Impulsoperator P zugeordnete unitäre starkstetige Gruppe $(e^{-it/\hbar P})_{t \in \mathbb{R}} \subset L(L^2(\mathbb{R}))$ ist gegeben durch

$$(e^{-it/\hbar P}\psi)(x) = \psi(x - t)$$

(die Normierung ist hier Konvention). Denn für glatte $\psi \in C_0^\infty(\mathbb{R})$ gilt für $U(t)\psi := \psi(\cdot - t)$ die Gleichheit

$$U'(0)\psi = \lim_{t \rightarrow 0} \frac{\psi(x - t) - \psi(x)}{t} = -\psi'(x).$$

Man rechnet direkt nach, dass $(U(t))_{t \in \mathbb{R}}$ eine starkstetige unitäre Gruppe ist. Der Erzeuger dieser Gruppe ist gegeben durch $\tilde{P}\psi = -iU'(0)\psi = i\psi'(x)$, d.h. es gilt $-\hbar\tilde{P}\psi = P\psi$ für alle $\psi \in C_0^\infty(\mathbb{R})$. Man rechnet nach, dass die Definitionsbereiche ebenfalls gleich sind und erhält $-\hbar\tilde{P} = P$.

2.6 Satz (Kanonische Vertauschungsrelation nach Weyl). Für den Orts- und Impulsoperator gilt

$$e^{itQ}e^{-is/\hbar P} = e^{ist}e^{-is/\hbar P}e^{itQ}.$$

Beweis. Für glatte Funktionen $\psi \in C_0^\infty(\mathbb{R})$ gilt nach Beispiel 2.5

$$(e^{itQ}e^{-is/\hbar P}\psi)(x) = e^{itx}\psi(x - s)$$

und

$$(e^{-is/\hbar P}e^{itQ}\psi)(x) = e^{it(x-s)}\psi(x - s).$$

□

b) Hamilton-Operatoren und Schrödinger-Gleichung

2.7 Definition. Zu jedem quantenmechanischen System gehört ein eindeutig bestimmter selbstadjungierter Operator H , der Hamiltonoperator des Systems. Befindet sich das System zum Zeitpunkt $t = 0$ im Zustand $\psi_0 \in \mathcal{H}$, $\|\psi_0\| = 1$, so ist es zum Zeitpunkt $t > 0$ im Zustand $\psi(t) := e^{-it/\hbar H}\psi_0$.

2.8 Bemerkung. Der unitäre Operator $e^{-it/\hbar H}$ ist durch den Spektralsatz bzw. den Funktionalkalkül definiert. Nach Satz 2.2 ist für $\psi_0 \in D(H)$ die Funktion $\psi(t)$ eine Lösung des Anfangswertproblems

$$\begin{aligned} i\hbar\psi'(t) &= H\psi(t), \\ \psi(0) &= \psi_0. \end{aligned} \tag{2-1}$$

Die Gleichung (2-1) heißt auch (abstrakte) Schrödingergleichung. Die Schrödingergleichung ist für $\psi_0 \in D(H)$ äquivalent zur Gleichung $\psi(t) = e^{-it/\hbar H}\psi_0$. Die Definition über die unitäre Gruppe ist allgemeiner, da hier alle $\psi_0 \in \mathcal{H}$ zugelassen sind.

2.9 Definition. In einem quantenmechanischen System mit Hamilton-Operator H heißt ein Zustand ψ stationär, falls er sich im Lauf der Zeit nicht ändert, d.h. falls für $\psi(t) := e^{-it/\hbar H}\psi$ gilt: Es existiert eine reelle Funktion $\rho: [0, \infty) \rightarrow \mathbb{R}$ mit $\psi(t) = e^{i\rho(t)}\psi$.

2.10 Satz. Ein Zustand $\psi \in \mathcal{H}$, $\|\psi\| = 1$, ist genau dann stationär, falls ψ ein Eigenvektor des Hamilton-Operators H ist.

Beweis. (i) Sei $H\psi = \lambda_0\psi$, $\lambda_0 \in \mathbb{R}$. Nach Lemma 1.32 gilt dann $E(\{\lambda_0\})\psi = \psi$. Somit ist

$$e^{-it/\hbar H}\psi = \int_{\sigma(H)} e^{-it/\hbar\lambda} dE(\lambda)\psi = e^{-it/\hbar\lambda_0} E(\{\lambda_0\})\psi = e^{-it/\hbar\lambda_0}\psi.$$

Also ist ψ ein stationärer Zustand.

(ii) Sei nun ψ ein stationärer Zustand, d.h. es gilt $\psi(t) = \sigma(t)\psi$ mit $\sigma(t) \in \mathbb{C}$, $|\sigma(t)| = 1$. Für $s, t \geq 0$ gilt

$$\begin{aligned} \sigma(s+t)\psi &= \psi(s+t) = e^{-i(s+t)/\hbar H}\psi = e^{-is/\hbar H}(e^{-it/\hbar H}\psi) \\ &= e^{-is/\hbar H}(\sigma(s)\psi) = \sigma(t)\sigma(s)\psi. \end{aligned}$$

Somit erhalten wir $\sigma(s+t) = \sigma(s)\sigma(t)$. Für $t, t+h \geq 0$ gilt

$$|\sigma(t+h) - \sigma(t)|^2 = |\sigma(t+h) - \sigma(t)|^2 \|\psi\|^2 = \|(e^{-i(t+h)/\hbar H} - e^{-it/\hbar H})\psi\|^2$$

$$\begin{aligned}
&= \int_{\sigma(H)} |e^{-i(t+h)/\hbar\lambda} - e^{it/\hbar\lambda}|^2 dE_\psi(\lambda) \\
&= \int_{\sigma(H)} |e^{-ih/\hbar\lambda} - 1|^2 dE_\psi(\lambda) \\
&\rightarrow 0 \quad (h \rightarrow 0)
\end{aligned}$$

nach dem Satz über majorisierte Konvergenz. Also ist σ stetig.

Die Funktion $\sigma: [0, \infty) \rightarrow \mathbb{C}$ ist also eine stetige Lösung der Funktionalgleichung $\sigma(s+t) = \sigma(s)\sigma(t)$ und damit existiert ein $a \in \mathbb{C}$ mit $\sigma(t) = e^{at}$. Wegen $|\sigma(t)| = 1$ ist a rein imaginär, d.h. es gilt $a = -i/\hbar\lambda_0$ mit einem $\lambda_0 \in \mathbb{R}$. Wir erhalten $\psi(t) = e^{-it/\hbar\lambda_0}\psi$.

Wir zeigen, dass ψ ein Eigenvektor zum Eigenwert λ_0 ist. Es gilt

$$0 = \|e^{-it/\hbar H}\psi - e^{-it/\hbar\lambda_0}\psi\|^2 = \int_{\sigma(H)} |e^{-it/\hbar\lambda} - e^{-it/\hbar\lambda_0}|^2 dE_\psi(\lambda).$$

Daher ist

$$e^{-it/\hbar\lambda} = e^{-it/\hbar\lambda_0} \quad \text{für } E_\psi\text{-fast alle } \lambda \in \sigma(H) \text{ und alle } t \geq 0. \quad (2-2)$$

Sei nun $\mu \in \sigma(H)$, $\mu \neq \lambda_0$. Dann können wir $t \geq 0$ wählen mit $e^{-it/\hbar\mu} \neq e^{-it/\hbar\lambda_0}$, d.h. es existiert ein $\varepsilon > 0$ und eine Konstante $C > 0$ mit

$$|e^{-it/\hbar\lambda} - e^{-it/\hbar\lambda_0}| \geq C \quad (\lambda \in \sigma(H), |\lambda - \mu| < \varepsilon).$$

Mit (2-2) folgt $E_\psi(\sigma(H) \cap (\mu - \varepsilon, \mu + \varepsilon)) = 0$. Insgesamt erhalten wir $E_\psi(\sigma(H) \setminus \{\lambda_0\}) = 0$, d.h. es gilt $\lambda = \lambda_0$ E_ψ -fast überall. Nach Lemma 1.32 ist ψ ein Eigenvektor von H zum Eigenwert λ_0 . \square

2.11 Bemerkung. Wir haben insbesondere gesehen: Jeder stationäre Zustand liegt im Definitionsbereich des Hamilton-Operators.

2.12 Bemerkung. Der Hamilton-Operator wird zur Beschreibung des quantenmechanischen Systems benötigt und ist Teil der Modellierung des Systems, nicht der Mathematik. Es gibt jedoch einen „Übersetzungsmechanismus“, der es erlaubt, klassische Hamilton-Funktionen in quantenmechanische Hamilton-Operatoren zu übersetzen:

Quantisierungsregel: Gegeben sei ein System von Teilchen, dass im Rahmen der klassischen Mechanik und Elektrodynamik durch die generalisierten Koordinaten $q = q(t) \in \mathbb{R}^S$ und die generalisierten Impulse $p = p(t) \in \mathbb{R}^S$ sowie durch die Hamilton-Funktion $H: \mathbb{R} \times \mathbb{R}^S \times \mathbb{R}^S \rightarrow \mathbb{R}$ beschrieben wird. Dann wird der quantenmechanische Hamilton-Operator dieses Systems gebildet durch die Ersetzung von

q_i durch $Q_i: L^2(\mathbb{R}^S) \subset D(Q_i) \rightarrow L^2(\mathbb{R}^S)$ und durch die Ersetzung von p_i durch $P_i: L^2(\mathbb{R}^S) \subset D(P_i) \rightarrow L^2(\mathbb{R}^S)$. Hierbei wirkt Q_i bzw. P_i jeweils auf die i -te Koordinate, d.h. $Q_i\psi(x) := x_i\psi(x)$ und $P_i\psi(x) := -i\hbar\partial_{x_i}\psi(x)$. Den somit erhaltenen Differentialausdruck $H(t, P, Q)$ verwendet man zur Konstruktion des quantenmechanischen Hamilton-Operators des Systems.

Diese Regel ist allerdings nicht als formale Definition verwendbar, da zum einen nichts über den Definitionsbereich des Hamilton-Operators ausgesagt wird, andererseits die Operatoren P_i und Q_i nicht kommutieren, so dass der gebildete formale Operator gar nicht eindeutig definiert ist.

2.13 Beispiel. Die klassische Hamilton-Funktion des harmonischen Oszillators war gegeben durch

$$H(t, q, p) = \frac{p^2}{2m} + \frac{k}{2}q^2.$$

Mit der Quantisierungsregel ergibt sich der formale Differentialausdruck in $L^2(\mathbb{R})$

$$(H\psi)(x) = -\frac{1}{2m}\hbar^2\psi''(x) + \frac{k}{2}x^2\psi(x).$$

Jetzt muss noch der Definitionsbereich spezifiziert werden, so dass H ein selbstadjungierter Operator ist. Eine Möglichkeit dazu ist, zunächst $H\psi$ nur für $\psi \in C_0^\infty(\mathbb{R})$ zu definieren und zu zeigen, dass der entstehende Operator wesentlich selbstadjungiert ist.

Mit der zeitlichen Entwicklung ist eine (erste) Axiomatik der Quantenmechanik abgeschlossen, die wir noch einmal zusammenfassen.

- Axiom (I).** Die Gesamtheit der reinen Zustände eines quantenmechanischen Systems ist gegeben durch die Menge der eindimensionalen Unterräume eines separablen \mathbb{C} -Hilbertraums \mathcal{H} .
- Axiom (II).** Jede beobachtbare Größe (Observable) eines quantenmechanischen Systems ist beschrieben durch einen selbstadjungierten Operator in \mathcal{H} .
- Axiom (III).** Sei $\psi \in \mathcal{H}$ ein reiner Zustand und $T: \mathcal{H} \supset D(T) \rightarrow \mathcal{H}$ eine Observable. Dann ist die Wahrscheinlichkeit dafür, dass der Messwert der beobachtbaren Größe T in der Menge $A \in \mathcal{B}(\sigma(T))$ liegt, gegeben durch $\|E(A)\psi\|^2$, wobei $E: \mathcal{B}(\sigma(T)) \rightarrow L(\mathcal{H})$ das Spektralmaß des Operators T ist.
- Axiom (IV).** Die zeitliche Entwicklung eines quantenmechanischen Systems ist gegeben durch einen selbstadjungierten Operator H , den Hamilton-Operator des Systems. Befindet sich das System zur Zeit $t = 0$ im

Zustand $\psi_0 \in \mathcal{H}$, $\|\psi_0\| = 1$, so ist es zum Zeitpunkt $t > 0$ im Zustand $\psi(t) := e^{-it/\hbar H} \psi_0$.

An die Axiomatik schließen sich zwei Interpretationsregeln an, welche die Eigenwerte des Hamilton-Operators interpretieren.

- (1) Ein zeitlich unveränderliches quantenmechanisches System befindet sich stets in einem stationären Zustand, welcher durch einen Eigenvektor des zugehörigen Hamilton-Operators gegeben ist. Der entsprechende Eigenwert ist die Energie des Systems. Der Normalzustand ist der stationäre Zustand kleinster Energie.
- (2) Geht ein quantenmechanisches System, das sich in einem stationären Zustand mit der Energie E_1 befindet, in einen stationären Zustand mit niedrigerer Energie E_2 über, so entsteht eine elektromagnetische Strahlung mit der Frequenz $\nu = \frac{1}{\hbar}(E_1 - E_2)$.

In dieser Form sind die Interpretationsregeln nicht allgemein anwendbar, da hier vorausgesetzt wird, dass die Operatoren Eigenwerte besitzen und nach unten halbbeschränkt sind. Obwohl dies für die meisten Hamilton-Operatoren gilt, gibt es auch Ausnahmen. Die meisten Operatoren besitzen allerdings zumindest ein halbbeschränktes Punktspektrum.

Bei der Modellierung des Hamilton-Operators ist die Bestimmung des Definitionsbereiches ein wichtiger Punkt. Hier kann man z.B. versuchen, einen passenden Definitionsbereich so zu wählen (etwa die Menge der Testfunktionen $C_0^\infty(\mathbb{R})$), dass der entstehende Operator im besten Fall wesentlich selbstadjungiert wird. Eine andere Möglichkeit wird durch die Friedrichs-Erweiterung gegeben, die bei halbbeschränkten Operatoren konstruierbar ist.

2.14 Definition. Sei $T: \mathcal{H} \supset D(T) \rightarrow \mathcal{H}$ ein symmetrischer Operator. Dann heißt T von unten halbbeschränkt, falls ein $C \in \mathbb{R}$ existiert mit

$$\langle Tx, x \rangle \geq C\|x\|^2 \quad (x \in D(T)).$$

Falls diese Abschätzung mit $C = 0$ gilt, heißt T positiv.

2.15 Lemma. Seien \mathcal{H}, \mathcal{K} zwei Hilberträume und $J \in L(\mathcal{K}, \mathcal{H})$ injektiv mit $\overline{R(J)} = \mathcal{H}$. Dann ist $JJ^* \in L(\mathcal{H})$ injektiv, $\overline{R(JJ^*)} = \mathcal{H}$, und $S := (JJ^*)^{-1}: \mathcal{H} \supset R(JJ^*) \rightarrow \mathcal{H}$ ist selbstadjungiert.

Beweis. Wegen $\ker J^* = (R(J))^\perp = \{0\}$ ist auch J^* injektiv. Damit ist der beschränkte und selbstadjungierte Operator JJ^* ebenfalls injektiv. Wegen $R(JJ^*)^\perp = \ker(JJ^*) = \{0\}$ ist S dicht definiert. Offensichtlich ist S symmetrisch.

Sei $y \in \mathcal{H}$. Dann gilt $(S \pm i)x = y$ genau dann, wenn $(1 \pm iJJ^*)x = JJ^*y$. Wegen $\pm i \in \rho(JJ^*)$ besitzt diese Gleichung eine eindeutige Lösung x , und $x = JJ^*(y \mp ix)$ zeigt $x \in R(JJ^*) = D(S)$. Also ist $S \pm i$ surjektiv und damit ist S selbstadjungiert. \square

2.16 Satz (Friedrichs-Erweiterung). *Sei $T: \mathcal{H} \supset D(T) \rightarrow \mathcal{H}$ symmetrisch und halbbeschränkt. Dann existiert eine selbstadjungierte Fortsetzung von T , die Friedrichs-Erweiterung. Diese ist wieder halbbeschränkt mit der gleichen Konstanten C .*

Beweis. Wegen

$$\langle (T + \lambda)x, x \rangle = \langle Tx, x \rangle + \lambda \|x\|^2 \geq (C + \lambda) \|x\|^2 \quad (x \in D(T))$$

für $\lambda \in \mathbb{R}$ sei ohne Einschränkung $C = 1$. Setze

$$[x, y] := \langle Tx, y \rangle \quad (x, y \in D(T)).$$

Dann ist $\mathcal{K}_0 := (D(T), [\cdot, \cdot])$ ein Prähilbertraum (dabei folgt die positive Definitheit des Skalarprodukts aus $[x, x] \geq \|x\|^2$). Die zugehörige Norm ist definiert durch $\|x\| := [x, x]^{1/2}$. Sei \mathcal{K} die Vervollständigung von \mathcal{K}_0 bzgl. $\|\cdot\|$.

Wegen $[x, x] \geq \|x\|^2$ ist die Identität $\text{id} \in L(\mathcal{K}_0, \mathcal{K})$ eine Kontraktion. Damit existiert eine stetige lineare Fortsetzung $J \in L(\mathcal{K}, \mathcal{H})$. Nach Definition von J gilt

$$[x, y] = \langle Tx, y \rangle = \langle Tx, Jy \rangle \quad (x, y \in D(T))$$

und damit auch für $x \in D(T), y \in \mathcal{K}$.

Der Operator J ist injektiv: Sei $y \in \mathcal{K}$ mit $Jy = 0$. Dann ist $[x, y] = 0$ ($x \in D(T)$) und damit $[x, y] = 0$ ($x \in \mathcal{K}$), d.h. $y = 0$. Wegen $R(J) \supset D(T)$ ist $\overline{R(J)} = \mathcal{H}$, und nach Lemma 2.15 ist der Operator $S := (JJ^*)^{-1}: \mathcal{H} \supset R(JJ^*) \rightarrow \mathcal{H}$ selbstadjungiert.

Sei $x \in D(T)$. Dann gilt

$$[x, y] = \langle Tx, Jy \rangle = [J^*Tx, y] \quad (y \in \mathcal{K})$$

(nach Definition des adjungierten Operators J^*). Es folgt $x = J^*Tx$ und wegen $J|_{D(T)} = \text{id}_{D(T)}$ auch $x = Jx = JJ^*Tx$, d.h. $x \in R(JJ^*) = D(S)$. Da nach Definition von S aber auch $x = JJ^*Sx$ gilt und JJ^* injektiv ist, folgt $Tx = Sx$. Insgesamt erhalten wir $T \subset S$, d.h. S ist eine selbstadjungierte Fortsetzung von T . \square

3. Beispiele quantenmechanischer Systeme

a) Der harmonische Oszillator

Formal ist der Hamilton-Operator des harmonischen Oszillators gegeben durch

$$(H\psi)(x) = -\frac{\hbar^2}{2m}\psi''(x) + \frac{k}{2}x^2\psi(x).$$

Statt im Raum $C_0^\infty(\mathbb{R})$ werden wir jetzt einen etwas größeren Raum von Testfunktionen betrachten.

3.1 Definition. Sei $n \in \mathbb{N}$. Der Schwartz-Raum $\mathcal{S}(\mathbb{R}^n)$ (Raum der schnell fallenden Funktionen) ist definiert als die Menge aller Funktionen $f \in C^\infty(\mathbb{R}^n)$, für welche

$$p_{\alpha,\beta}(f) := \sup_{x \in \mathbb{R}^n} |x^\beta \partial^\alpha f(x)| < \infty \quad (\alpha, \beta \in \mathbb{N}_0^n).$$

Durch die Familie $\{p_{\alpha,\beta} : \alpha, \beta \in \mathbb{N}_0^n\}$ von Seminormen wird eine lokalkonvexe Topologie auf $\mathcal{S}(\mathbb{R}^n)$ definiert.

Es gilt: Mit der oben beschriebenen Topologie wird $\mathcal{S}(\mathbb{R}^n)$ zu einem Fréchetraum.

3.2 Lemma. a) Definiere die Operatoren P_0 und Q_0 mit Definitionsbereich $D(P_0) := D(Q_0) := \mathcal{S}(\mathbb{R}) \subset L^2(\mathbb{R})$ durch $(P_0\psi)(x) := -i\psi'(x)$ und $(Q_0\psi)(x) := x\psi(x)$ für $\psi \in \mathcal{S}(\mathbb{R}^n)$. Dann gilt $[P_0, Q_0] := P_0Q_0 - Q_0P_0 = -i \text{id}_{\mathcal{S}(\mathbb{R})}$.

b) Definiere den Operator H_0 durch

$$D(H_0) := \mathcal{S}(\mathbb{R}), \quad H_0 := \frac{1}{2}(P_0^2 + Q_0^2).$$

Dann ist H_0 symmetrisch und positiv. Es gilt sogar

$$\langle H_0\psi, \psi \rangle > 0 \quad (\psi \in D(H_0) \setminus \{0\})$$

(strikte Positivität).

c) Definiere jeweils mit Definitionsbereich $\mathcal{S}(\mathbb{R})$ die folgenden Operatoren:

$$\begin{aligned} a &:= \frac{1}{\sqrt{2}}(Q_0 + iP_0) \quad (\text{Vernichtungsoperator}), \\ a^* &:= \frac{1}{\sqrt{2}}(Q_0 - iP_0) \quad (\text{Erzeugungsoperator}), \\ N &:= a^*a \quad (\text{Teilchenzahloperator, Besetzungszahloperator}). \end{aligned}$$

Dann gilt $[a, a^*] = \text{id}_{\mathcal{S}(\mathbb{R})}$, $H_0 = N + \frac{1}{2}$, $Na = a(N - 1)$ und $Na^* = a^*(N + 1)$ (Gleichheit auf $\mathcal{S}(\mathbb{R})$).

Beweis. a) Beachte $R(Q_0), R(P_0) \subset \mathcal{S}(\mathbb{R})$, d.h. alle Operatoren sind auf $\mathcal{S}(\mathbb{R})$ definiert. Die Gleichheit für den Kommutator $[P_0, Q_0]$ folgt sofort durch direktes Nachrechnen.

b) Es gilt $(H_0\psi)(x) = -\frac{1}{2}\psi''(x) + \frac{1}{2}x^2\psi(x)$ für $\psi \in \mathcal{S}(\mathbb{R})$. Mit partieller Integration folgt

$$\langle H_0\psi, \varphi \rangle = \frac{1}{2}\langle -\psi'', \varphi \rangle + \frac{1}{2}\langle x^2\psi, \varphi \rangle = \frac{1}{2}\langle \psi', \varphi' \rangle + \frac{1}{2}\langle x\psi, x\varphi \rangle = \langle \psi, H_0\varphi \rangle$$

für $\psi, \varphi \in \mathcal{S}(\mathbb{R})$, d.h. H_0 ist symmetrisch. Wegen $\langle H_0\psi, \psi \rangle = \|\psi'\|_2^2 + \|x\psi\|_2^2 \geq 0$ ist H_0 positiv. Falls $\langle H_0\psi, \psi \rangle = 0$, so ist $\|\psi'\|_2 = 0$ und damit ψ eine konstante Funktion (beachte $\psi \in C^\infty(\mathbb{R})$). Mit $\|x\psi\|_2 = 0$ folgt $\psi = 0$.

c) Direktes Nachrechnen zeigt

$$\begin{aligned} a^*a &= \frac{1}{2}(Q_0^2 + P_0^2 - 1), \\ aa^* &= \frac{1}{2}(Q_0^2 + P_0^2 + 1), \end{aligned}$$

und damit $H_0 = \frac{1}{2}(a^*a + aa^*) = a^*a + \frac{1}{2} = N + \frac{1}{2}$. Genauso folgen

$$Na = a^*a^2 = (aa^* - 1)a = aa^*a - a = a(N - 1)$$

und $Na^* = a^*(N + 1)$ als Gleichheit auf $\mathcal{S}(\mathbb{R})$. □

3.3 Lemma. a) Sei $\psi_0(x) := c_0 e^{-x^2/2}$ ($x \in \mathbb{R}$) mit $c_0 := \pi^{-1/4}$. Dann gilt $\psi_0 \in \mathcal{S}(\mathbb{R})$, $\|\psi_0\|_2 = 1$ und $a\psi_0 = 0$.

b) Für $n \in \mathbb{N}_0$ definiere $\psi_n := \frac{1}{\sqrt{n!}}(a^*)^n \psi_0$. Dann gilt $\psi_n \in \mathcal{S}(\mathbb{R})$, $\|\psi_n\|_2 = 1$ und $N\psi_n = n\psi_n$ ($n \in \mathbb{N}_0$) (und damit $H_0\psi_n = (n + \frac{1}{2})\psi_n$). Es gilt

$$\psi_n(x) = c_n \left(x - \frac{d}{dx}\right)^n e^{-x^2/2} \quad (n \in \mathbb{N}_0) \quad \text{mit } c_n := (\sqrt{\pi}n!2^n)^{-1/2}.$$

Beweis. a) Die gewöhnliche Differentialgleichung $a\psi_0 = 0$, d.h. $\psi_0'(x) + x\psi_0(x) = 0$, hat die Lösung $\psi_0(x) = ce^{-x^2/2}$ mit $c \in \mathbb{C}$. Es gilt

$$\|\psi_0\|^2 = |c|^2 \int_{\mathbb{R}} e^{-x^2} dx = |c|^2 \sqrt{\pi}$$

und damit $\|\psi_0\| = 1$ für $c = c_0 := \pi^{-1/4}$.

b) Für $\psi_1 := a^*\psi_0$ gilt nach Satz 3.2 und wegen $N\psi_0 = 0$ nach a)

$$N\psi_1 = Na^*\psi_0 = a^*(N + 1)\psi_0 = a^*\psi_0 = \psi_1$$

und

$$\|a^*\psi_0\|^2 = \langle aa^*\psi_0, \psi_0 \rangle = \langle (1 + a^*a)\psi_0, \psi_0 \rangle = \|\psi_0\|^2.$$

Analog folgen für $\psi_n := \frac{1}{\sqrt{n!}}(a^*)^n\psi_0$ die Gleichheiten $N\psi_n = n\psi_n$ und $\|\psi_n\| = 1$. Die explizite Darstellung von ψ_n ist klar wegen $a^*\psi = (x - \frac{d}{dx})\psi(x)$. \square

3.4 Satz (Hermite-Polynome). *Definiere $h_n(x) := e^{x^2/2}(x - \frac{d}{dx})^n e^{-x^2/2}$ ($n \in \mathbb{N}_0$) (d.h. es gilt $\psi_n(x) = c_n h_n(x) e^{-x^2/2}$). Dann ist h_n ein Polynom vom Grad n und heißt Hermite-Polynom vom Grad n .*

a) Es gilt $h_{n+1}(x) = 2xh_n(x) - h'_n(x)$ ($n \in \mathbb{N}_0$).

b) Es gilt $h_n(x) = (-1)^n e^{x^2} (\frac{d}{dx})^n e^{-x^2}$.

c) Das System $\{\psi_n : n \in \mathbb{N}_0\}$ ist ein vollständiges Orthonormalsystem in $L^2(\mathbb{R})$.

Beweis. a) Nach Definition ist $h_0(x) = 1$. Weiter folgt

$$\begin{aligned} h_{n+1}(x)e^{-x^2/2} &= (x - \frac{d}{dx})^{n+1} e^{-x^2/2} \\ &= (x - \frac{d}{dx})[h_n(x)e^{-x^2/2}] \\ &= (xh_n(x) - h'_n(x) + xh_n(x))e^{-x^2/2} \\ &= (2xh_n(x) + h'_n(x))e^{-x^2/2}. \end{aligned}$$

b) wird dem Leser als Übung überlassen.

c) Sei $\rho(x) := e^{-x^2}$ ($x \in \mathbb{R}$). Nach b) gilt dann $h_n(x) = (-1)^n e^{x^2} \rho^{(n)}(x)$. Es folgt für $n > m$ mit partieller Integration

$$\begin{aligned} \langle \psi_n, \psi_m \rangle &= c_n c_m \int_{\mathbb{R}} h_n(x) h_m(x) e^{-x^2} dx \\ &= (-1)^n c_n c_m \int_{\mathbb{R}} \rho^{(n)}(x) h_m(x) dx \\ &= c_n c_m \int_{\mathbb{R}} \rho(x) h_m^{(n)}(x) dx = 0, \end{aligned}$$

da h_m ein Polynom vom Grad $m < n$ ist. Nach Lemma 3.3 gilt $\|\psi_n\|_2 = 1$, d.h. $\{\psi_n : n \in \mathbb{N}_0\}$ ist ein Orthonormalsystem in $L^2(\mathbb{R})$.

Um die Vollständigkeit zu zeigen, sei $f \in L^2(\mathbb{R})$ mit $\langle f, \psi_n \rangle = 0$ ($n \in \mathbb{N}_0$). Zu zeigen ist $f = 0$. Dazu sei $g(x) := e^{-x^2/2} f(x)$ ($x \in \mathbb{R}$). Es gilt

$$\int_{\mathbb{R}} g(x) h_n(x) dx = \int_{\mathbb{R}} f(x) h_n(x) e^{-x^2/2} dx = \frac{1}{c_n} \int_{\mathbb{R}} f(x) \psi_n(x) dx = 0 \quad (n \in \mathbb{N}_0).$$

Da sich jedes Polynom als Linearkombination der h_n schreiben lässt, folgt $\langle g, p \rangle = 0$ für alle Polynome p . Speziell gilt $\langle g, s_n(\cdot, \xi) \rangle = 0$ für

$$s_n(x, \xi) := \sum_{k=0}^n \frac{(-ix\xi)^k}{k!} \quad (x \in \mathbb{R})$$

mit einem festen Parameter $\xi \in \mathbb{R}$. Wegen

$$|g(x)s_n(x, \xi)| \leq \sum_{k=0}^n \frac{|x\xi|^k}{k!} |g(x)| \leq e^{|x\xi|} e^{-x^2/4} |f(x)| e^{-x^2/4} \leq C |f(x)| e^{-x^2/4}$$

und $s_n(x, \xi) \rightarrow e^{ix\xi}$ ($n \rightarrow \infty$) folgt mit majorisierter Konvergenz

$$(\mathcal{F}g)(\xi) = (2\pi)^{-1/2} \int_{\mathbb{R}} g(x) e^{-ix\xi} dx = 0 \quad (\xi \in \mathbb{R}).$$

Also ist $\mathcal{F}g = 0$, und da \mathcal{F} (z.B. in $L^2(\mathbb{R})$) injektiv ist, folgt $g = 0$ und damit $f = 0$ in $L^2(\mathbb{R})$. Damit ist $\{\psi_n : n \in \mathbb{N}_0\}$ vollständig. \square

3.5 Satz. Der Hamilton-Operator $H: L^2(\mathbb{R}) \supset D(H) \rightarrow L^2(\mathbb{R})$ sei definiert als Friedrichserweiterung des Operators $H^{(0)}: L^2(\mathbb{R}) \supset \mathcal{S}(\mathbb{R}) \rightarrow L^2(\mathbb{R})$, gegeben durch

$$(H^{(0)}\psi)(x) := -\frac{1}{2m} \hbar^2 \psi''(x) + \frac{k}{2} x^2 \psi(x) \quad (\psi \in \mathcal{S}(\mathbb{R})).$$

Dann gilt $\sigma_c(H) = \emptyset$ und $\sigma_p(H) = \{\lambda_n : n \in \mathbb{N}_0\}$ mit $\lambda_n := \hbar \sqrt{\frac{k}{m}} (n + \frac{1}{2})$ ($n \in \mathbb{N}_0$). Jeder Eigenwert ist einfach, die zugehörigen Eigenfunktionen sind gegeben durch

$$\psi_n(x) = d_n h_n(cx) e^{-cx^2/2} \quad (n \in \mathbb{N}_0) \quad \text{mit } c := \left(\frac{km}{\hbar^2}\right)^{1/4}. \quad (3-1)$$

Dabei ist $d_n \in \mathbb{R}$ so gewählt, dass $\|\psi_n\|_{L^2} = 1$, und h_n sind die Hermite-Polynome aus Satz 3.4.

Beweis. Betrachte die Koordinaten-Transformation $x \mapsto cx$. Für $\tilde{\psi}(x) := \psi(cx)$ folgt

$$\begin{aligned} (H\tilde{\psi})(x) &= -\frac{\hbar^2}{2m} c^2 \psi''(cx) + \frac{k}{2} \frac{1}{c^2} (cx)^2 \psi(cx) \\ &= \frac{1}{2} \hbar \sqrt{\frac{k}{m}} (-\psi''(cx) + (cx)^2 \psi(cx)) \\ &= \hbar \sqrt{\frac{k}{m}} (H_0\psi)(cx) \end{aligned}$$

mit H_0 aus Lemma 3.2. Somit ist $\tilde{\psi}$ genau dann Eigenfunktion von H , falls ψ Eigenfunktion von H_0 ist. Nach Lemma 3.3 hat H_0 die Eigenfunktion $h_n(x)e^{-x^2/2}$ zum Eigenwert $n + \frac{1}{2}$ für $(n \in \mathbb{N}_0)$. Damit ist ψ_n aus (3-1) eine Eigenfunktion zu H zum Eigenwert $\lambda_n := \hbar\sqrt{\frac{k}{m}}(n + \frac{1}{2})$.

Wählt man d_n so, dass $\|\psi_n\|_{L^2} = 1$, so ist $\{\psi_n : n \in \mathbb{N}_0\}$ ein Orthonormalsystem in $L^2(\mathbb{R})$. Nach Satz 3.4 ist dieses Orthonormalsystem vollständig. Damit gilt

$$x = \sum_{n \in \mathbb{N}_0} \langle x, \psi_n \rangle \psi_n = \int_{\{\lambda_n : n \in \mathbb{N}_0\}} 1 dE(\lambda)x = E(\{\lambda_n : n \in \mathbb{N}_0\})x$$

für alle $x \in L^2(\mathbb{R})$. Also ist $R(E(\{\lambda_n : n \in \mathbb{N}_0\})) = L^2(\mathbb{R})$, und es folgt $\sigma_p(H) = \{\lambda_n : n \in \mathbb{N}_0\}$ und $\sigma_c(H) = \emptyset$. Insbesondere existieren keine stationären Zustände \square .

b) Das freie Teilchen

Ein Teilchen der Masse m , das sich frei auf der reellen Achse bewegt, wird formal beschrieben durch den Hamilton-Operator $H^{(0)} : L^2(\mathbb{R}) \supset D(H^{(0)}) \rightarrow L^2(\mathbb{R})$ mit $D(H^{(0)}) := C_0^\infty(\mathbb{R})$ und

$$H^{(0)}\psi := -\frac{\hbar^2}{2m}\psi'' \quad (\psi \in C_0^\infty(\mathbb{R})). \quad (3-2)$$

3.6 Lemma. Sei $n \in \mathbb{N}$. Auf dem Sobolevraum $H^2(\mathbb{R}^n) := \{u \in L^2(\mathbb{R}^n) : \partial^\alpha u \in L^2(\mathbb{R}^n) (|\alpha| \leq 2)\}$ sei die kanonische Norm definiert durch

$$\|u\|_{H^2(\mathbb{R}^n)} := \left(\sum_{|\alpha| \leq 2} \|\partial^\alpha u\|_{L^2(\mathbb{R}^n)}^2 \right)^{1/2}.$$

Dann gibt es $C_1, C_2 > 0$ mit

$$C_1 \|u\|_{H^2(\mathbb{R}^n)} \leq \left(\|u\|_{L^2(\mathbb{R}^n)}^2 + \|\Delta u\|_{L^2(\mathbb{R}^n)}^2 \right)^{1/2} \leq C_2 \|u\|_{H^2(\mathbb{R}^n)},$$

d.h. $(\|u\|_{L^2(\mathbb{R}^n)}^2 + \|\Delta u\|_{L^2(\mathbb{R}^n)}^2)^{1/2}$ ist eine äquivalente Norm auf $H^2(\mathbb{R}^n)$.

Wir schreiben im Folgenden $\|u\|_1 \approx \|u\|_2$, falls die Normen $\|\cdot\|_1$ und $\|\cdot\|_2$ äquivalent sind.

Beweis. Da die Fourier-Transformation eine Isometrie ist, kann man die Norm der Fourier-Transformierten betrachten. Die Behauptung folgt dann sofort aus

$$(\mathcal{F}\partial^\alpha u)(\xi) = i^{|\alpha|}\xi^\alpha(\mathcal{F}u)(\xi),$$

$$(\mathcal{F}\Delta u)(\xi) = -|\xi|^2(\mathcal{F}u)(\xi)$$

und

$$C_1 \sum_{|\alpha| \leq 2} |\xi^\alpha|^2 \leq (1 + |\xi|^2)^2 \leq C_2 \sum_{|\alpha| \leq 2} |\xi^\alpha|^2$$

für $\xi \in \mathbb{R}^n$ und passende $C_1, C_2 > 0$. □

3.7 Lemma. a) Definiere den Operator T in $L^2(\mathbb{R})$ durch $D(T) := H^2(\mathbb{R})$ und $T\psi := \psi''$. Dann ist T selbstadjungiert, und $\sigma(T) = \sigma_c(T) = (-\infty, 0]$.

b) Sei T_0 definiert durch $D(T_0) := C_0^\infty(\mathbb{R})$ und $T_0\psi := \psi''$ ($\psi \in D(T_0)$). Dann ist T_0 wesentlich selbstadjungiert und $\overline{T_0} = T$.

Beweis. a) Das kann man unter Verwendung der Fourier-Transformation zeigen (Übung).

b) Die Graphennorm auf $D(T)$ ist gegeben durch

$$\begin{aligned} \|\psi\|_T &:= \left(\|\psi\|_{L^2}^2 + \|T\psi\|_{L^2}^2 \right)^{1/2} \\ &= \left(\|\psi\|_{L^2}^2 + \|\psi''\|_{L^2}^2 \right)^{1/2} \\ &\approx \|\psi\|_{H^2(\mathbb{R})}, \end{aligned}$$

wobei Lemma 3.6 verwendet wurde. Da $C_0^\infty(\mathbb{R})$ dicht in $H^2(\mathbb{R})$ liegt (bzgl. der $\|\cdot\|_{H^2}$ -Norm), ist $T = \overline{T|_{C_0^\infty(\mathbb{R})}} = \overline{T_0}$. Damit ist T_0 insbesondere wesentlich selbstadjungiert. □

3.8 Korollar. Der Operator $H^{(0)}$ aus (3-2) ist wesentlich selbstadjungiert. Der Hamilton-Operator H des freien Teilchens ist definiert als $H := \overline{H^{(0)}}$. Es gilt $D(H) = H^2(\mathbb{R})$, $\sigma_p(H) = \emptyset$ und $\sigma_c(H) = [0, \infty)$.

Beweis. Bis auf die Normierung des Operators ist das die Aussage von Lemma 3.7. □

Bisher haben wir das eindimensionale Teilchen betrachtet. Im \mathbb{R}^3 hat man die entsprechenden Orts- und Impulsobservablen Q_i bzw. P_i , $i = 1, 2, 3$, welche in x_i -Richtung wirken. Dabei sind die drei Ortsobservablen Q_1, Q_2, Q_3 gleichzeitig beobachtbar im Sinn der folgenden Definition.

3.9 Definition. Zwei Observable S und T mit den zugehörigen Spektralmaßen E bzw. F in einem Hilbertraum \mathcal{H} heißen vertauschbar, falls ihre Spektralmaße vertauschen, d.h. falls gilt

$$[E(A), F(B)] := E(A)F(B) - F(B)E(A) = 0 \quad (A \in \mathcal{B}(\sigma(S)), B \in \mathcal{B}(\sigma(T))).$$

In diesem Fall heißen S und T auch kompatibel oder gleichzeitig beobachtbar. Eine Menge von Observablen heißt kompatibel, falls je zwei Observablen aus dieser Menge kompatibel sind.

3.10 Bemerkung. Für unbeschränkte Operatoren ist der Begriff der Vertauschbarkeit nicht kanonisch, da die Definitionsbereiche beachtet werden müssen. In obiger Definition wurde die Vertauschbarkeit mit Hilfe der Spektralmaße definiert. Wir werden später zeigen, dass dazu die Vertauschbarkeit der Resolventen äquivalent ist. Aber man muss bei diesem Begriff vorsichtig sein, so sind die beiden folgenden naheliegenden Aussagen falsch(!):

(i) Sei $D \subset \mathcal{H}$ dicht, $D \subset D(S)$, $D \subset D(T)$, $S(D) \subset D$, $T(D) \subset D$ und es gelte $ST\psi = TS\psi$ ($\psi \in D$). Dann sind S, T kompatibel (falsch).

(ii) Sei $D \subset \mathcal{H}$ dicht, und seien $S|_D$ und $T|_D$ wesentlich selbstadjungiert. Sei $ST\psi = TS\psi$ ($\psi \in D$). Dann sind S, T kompatibel (falsch).

Der folgende Satz zeigt nützliche Kriterien für die Kompatibilität zweier Observablen. Er wird nicht bewiesen.

3.11 Satz (Kriterien für Kompatibilität). Seien S, T Observable in einem Hilbertraum \mathcal{H} . Dann sind äquivalent:

(i) S und T sind kompatibel.

(ii) Für alle $\lambda \in \rho(S)$ und $\mu \in \rho(T)$ gilt $[(S - \lambda)^{-1}, (T - \mu)^{-1}] = 0$.

(iii) Es existiert ein $\lambda_0 \in \rho(S)$ und ein $\mu_0 \in \rho(T)$ mit $[(S - \lambda_0)^{-1}, (T - \mu_0)^{-1}] = 0$.

(iv) Für alle $s, t \in \mathbb{R}$ gilt $[e^{isS}, e^{itT}] = 0$.

Einfache Beispiele für kompatible Operatoren im \mathbb{R}^3 sind etwa die Ortsobservablen Q_1, Q_2, Q_3 , wobei $Q_k: L^2(\mathbb{R}^3) \supset D(Q_k) \rightarrow L^2(\mathbb{R}^3)$ definiert ist durch

$$\begin{aligned} D(Q_k) &:= \{\psi \in L^2(\mathbb{R}^3) : (x \mapsto x_k \psi(x)) \in L^2(\mathbb{R}^3)\}, \\ (Q_k \psi)(x) &:= x_k \psi(x) \quad (\psi \in D(Q_k)). \end{aligned}$$

Analog sind die Impulsobservablen P_1, P_2, P_3 kompatibel, wobei $D(P_k) := \{\psi \in L^2(\mathbb{R}^3) : \partial_{x_k} \psi \in L^2(\mathbb{R}^3)\}$ und $P_k \psi := -i\hbar \partial_{x_k} \psi$. Nicht kompatibel sind etwa P_1 und Q_1 , wie die Unschärferelation zeigt.

3.12 Beispiel. Der Hamilton-Operator eines freien Teilchens der Masse m im \mathbb{R}^3 ist gegeben durch $H: L^2(\mathbb{R}^3) \supset D(H) \rightarrow L^2(\mathbb{R}^3)$ mit $D(H) := H^2(\mathbb{R}^3)$ und $H\psi := -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta\psi$ ($\psi \in H^2(\mathbb{R}^3)$).

Dieselbe Rechnung wie für das eindimensionale freie Teilchen (Korollar 3.8) zeigt, dass $\sigma_p(H) = \emptyset$ und $\sigma_c(H) = [0, \infty)$. Es gilt weiter: $H^{(0)} := H|_{C_0^\infty(\mathbb{R}^3)}$ ist wesentlich selbstadjungiert und $H^{(0)}$ (und damit auch H) ist positiv.

c) Das Wasserstoffatom ohne Spin

Der folgende Satz ist ein typisches Beispiel eines Störungssatzes.

3.13 Satz (Kriterium von Kato). Sei $T: \mathcal{H} \supset D(T) \rightarrow \mathcal{H}$ selbstadjungiert und $S: \mathcal{H} \supset D(S) \rightarrow \mathcal{H}$ symmetrisch mit $D(S) \supset D(T)$. Falls $\delta \in [0, 1)$ und $c \geq 0$ existieren mit

$$\|Sx\| \leq \delta\|Tx\| + c\|x\| \quad (x \in D(T)), \quad (3-3)$$

so ist $T + S$ mit $D(T + S) = D(T)$ selbstadjungiert.

Beweis. Für $\lambda \in \mathbb{R} \setminus \{0\}$ ist $i\lambda \in \rho(T)$, und es gilt

$$\|(T - i\lambda)x\|^2 = \|Tx\|^2 + |\lambda|^2\|x\|^2 \quad (x \in D(T))$$

(Ausmultiplizieren des Skalarprodukts). Für $z \in \mathcal{H}$ und $x := (T - i\lambda)^{-1}z$ folgt

$$\begin{aligned} \|z\| &\geq |\lambda| \|x\| = |\lambda| \|(T - i\lambda)^{-1}z\|, \\ \|z\| &\geq \|Tx\| = \|T(T - i\lambda)^{-1}z\|. \end{aligned}$$

Wir zeigen $R(T + S - i\lambda) = \mathcal{H}$ für großes $|\lambda|$. Dazu betrachten wir die Gleichung

$$z + S(T - i\lambda)^{-1}z = y \quad (3-4)$$

mit $y \in \mathcal{H}$ beliebig. Nach Voraussetzung gilt

$$\|S(T - i\lambda)^{-1}z\| \leq \delta\|T(T - i\lambda)^{-1}z\| + c\|(T - i\lambda)^{-1}z\| \leq \left(\delta + \frac{1}{|\lambda|}\right)\|z\|.$$

Für $|\lambda| \geq \lambda_0$ ist also $\|S(T - i\lambda)^{-1}\| < 1$ und damit (3-5) eindeutig lösbar mit Lösung z . Setze $x := (T - i\lambda)^{-1}z$ und erhalte

$$(T + S - i\lambda)x = (T - i\lambda)x + Sx = z + S(T - i\lambda)^{-1}z = y.$$

Also ist $R(T + S - i\lambda) = \mathcal{H}$ für großes $\lambda \in \mathbb{R}$, und $T + S$ ist selbstadjungiert. \square

Der Hamilton-Operator des Wasserstoffatoms wird in obigem Sinn als Störung des freien Teilchens betrachtet werden, wobei der Störterm die Form $(S\psi)(x) = \frac{\psi(x)}{|x|}$ besitzen wird. Dazu verwenden wir folgendes Lemma über Sobolevräume:

3.14 Lemma (3. Poincaré-Ungleichung). a) Für $\psi \in H^1(\mathbb{R}^3)$ ist $(x \mapsto \frac{\psi(x)}{|x|}) \in L^2(\mathbb{R}^3)$, und es gilt

$$\left\| \left(x \mapsto \frac{\psi(x)}{|x|} \right) \right\|_{L^2(\mathbb{R}^3)} \leq 2 \|\nabla \psi\|_{L^2(\mathbb{R}^3)}.$$

b) Zu $\varepsilon > 0$ existiert $C_\varepsilon > 0$ mit

$$\left\| \left(x \mapsto \frac{\psi(x)}{|x|} \right) \right\|_{L^2(\mathbb{R}^3)}^2 \leq \varepsilon \|\psi\|_{H^2(\mathbb{R}^3)}^2 + C_\varepsilon \|\psi\|_{L^2(\mathbb{R}^3)}^2 \quad (\psi \in H^2(\mathbb{R}^3)).$$

Beweis. a) Da $C_0^\infty(\mathbb{R}^3)$ dicht in $H^1(\mathbb{R}^3)$ liegt, sei o.E. $\psi \in C_0^\infty(\mathbb{R}^3)$. Wir verwenden die Identität

$$\int_{\mathbb{R}^3} f(x) dx = \int_0^\infty \int_{|x|=r} f(x) dS(x) dr = \int_0^\infty (Mf)(r) r^2 dr \quad (f \in L^1(\mathbb{R}^3)),$$

wobei

$$(Mf)(r) := \int_{|y|=1} f(ry) dS(y)$$

gesetzt wurde (sphärisches Mittel von f). Angewendet auf die Funktion $x \mapsto \frac{|\psi(x)|^2}{|x|^2}$ erhält man

$$\int_{\mathbb{R}^3} \frac{|\psi(x)|^2}{|x|^2} dx = \int_0^\infty [M(|\psi|^2)](r) dr.$$

Sei zunächst ψ reellwertig. Dann schätzen wir für festes y mit $|y| = 1$ die Funktion $g(r) := \psi(ry)$ folgendermaßen ab:

$$\begin{aligned} \int_0^\infty g(r)^2 dr &= - \int_0^\infty \int_r^\infty \frac{d}{ds} [g(s)]^2 ds dr \\ &= -2 \int_0^\infty \int_r^\infty g(s) g'(s) ds dr \\ &= -2 \int_0^\infty \int_0^s g(s) g'(s) dr ds \\ &= -2 \int_0^\infty g(s) s g'(s) ds \\ &\leq 2 \left(\int_0^\infty g(s)^2 ds \right)^{1/2} \left(\int_0^\infty s^2 g'(s)^2 ds \right)^{1/2}. \end{aligned}$$

Damit erhalten wir

$$\int_0^\infty g(r)^2 dr \leq 4 \int_0^\infty s^2 g'(s)^2 ds.$$

Andererseits ist

$$|g'(s)| = |\langle \nabla \psi(sy), y \rangle| \leq |\nabla \psi(sy)| |y| = |\nabla \psi(sy)|.$$

Eingesetzt erhalten wir

$$\begin{aligned} \int_{\mathbb{R}^3} \frac{|\psi(x)|^2}{|x|^2} dx &= \int_0^\infty \int_{|y|=1} \psi(ry)^2 dS(y) dr \\ &= \int_{|y|=1} \int_0^\infty \psi(ry)^2 dr dS(y) \\ &\leq 4 \int_{|y|=1} \int_0^\infty s^2 |\nabla \psi(sy)|^2 ds dS(y) \\ &= 4 \int_0^\infty s^2 \int_{|y|=1} |\nabla \psi(sy)|^2 dS(y) ds \\ &= 4 \sum_{j=1}^3 \int_0^\infty s^2 \int_{|y|=1} [(\partial_j \psi)(sy)]^2 dS(y) ds \\ &= 4 \sum_{j=1}^3 \int_0^\infty s^2 [M(\partial_j \psi)^2](s) ds \\ &= 4 \sum_{j=1}^3 \int_{\mathbb{R}^3} [(\partial_j \psi)(x)]^2 dx \\ &= 4 \|\nabla \psi\|_{L^2(\mathbb{R}^3)}^2. \end{aligned}$$

Falls ψ komplexwertig ist, wendet man dies auf Real- und Imaginärteil an und erhält dieselbe Abschätzung.

b) Dies folgt sofort aus a) und folgender Interpolationsungleichung für Sobolevräume: Zu jedem $\varepsilon > 0$ existiert ein $C_\varepsilon > 0$ mit

$$\|\psi\|_{H^1(\mathbb{R}^3)} \leq \varepsilon \|\psi\|_{H^2(\mathbb{R}^3)} + C_\varepsilon \|\psi\|_{L^2(\mathbb{R}^3)} \quad (u \in H^2(\mathbb{R}^3)).$$

□

3.15 Definition und Satz. *Das Wasserstoffatom wird durch den Operator*

$$(H_0 \psi)(x) := -\frac{\hbar^2}{2m} (\Delta \psi)(x) - \frac{e^2}{r} \psi(x) \quad (\psi \in D(H_0))$$

mit $D(H_0) := C_0^\infty(\mathbb{R}^3)$ beschrieben. Dabei ist $r := |x|$, m die Masse des Elektrons und e die Ladung des Elektrons. Der Operator H_0 ist wesentlich selbstadjungiert. Der Hamilton-Operator des Wasserstoffatoms wird definiert durch $H := \overline{H_0}$. Es gilt $D(H) = H^2(\mathbb{R}^3)$.

Beweis. Definiere den Operator $S: L^2(\mathbb{R}^3) \supset D(S) \rightarrow L^2(\mathbb{R}^3)$ durch $D(S) := H^2(\mathbb{R}^3)$ und $S\psi := -\frac{e^2}{r}\psi$ ($\psi \in D(S)$). Dann ist S offensichtlich symmetrisch, und nach Lemma 3.14 existiert zu jedem $\varepsilon > 0$ eine Konstante $C_\varepsilon > 0$ mit

$$\|S\psi\|_{L^2(\mathbb{R}^3)} \leq \varepsilon\|\psi\|_{H^2(\mathbb{R}^3)} + C_\varepsilon\|\psi\|_{L^2(\mathbb{R}^3)} \quad (\psi \in H^2(\mathbb{R}^3)).$$

Nach Beispiel 3.12 ist $H^2(\mathbb{R}^3)$ der Definitionsbereich des Hamiltonoperators T des freien Teilchens, $T\psi = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\psi$ ($\psi \in H^2(\mathbb{R}^3)$). Da $\|\psi\|_{H^2(\mathbb{R}^3)} \approx \|T\psi\|_{L^2(\mathbb{R}^3)} + \|\psi\|_{L^2(\mathbb{R}^3)}$ (Lemma 3.6), ist S eine Kato-Störung von T . Also ist $T + S$ mit Definitionsbereich $D(T + S) = D(T) = H^2(\mathbb{R}^3)$ selbstadjungiert.

Für die Graphennorm von $T + S$ gilt

$$\|\psi\|_{T+S} \approx \|(T + S)\psi\|_{L^2} + \|\psi\|_{L^2} \approx (\|T\psi\|_{L^2} + \|\psi\|_{L^2}) \approx \|\psi\|_{H^2(\mathbb{R}^3)}.$$

Da $C_0^\infty(\mathbb{R}^3) \subset H^2(\mathbb{R}^3)$ dicht liegt, folgt $D(\overline{H_0}) = H^2(\mathbb{R}^3)$, d.h. es gilt $H = \overline{H_0} = T + S$. \square

3.16 Lemma (Approximative Eigenfunktionen). Seien $T: \mathcal{H} \supset D(T) \rightarrow \mathcal{H}$ eine Observable und $\lambda \in \mathbb{R}$. Dann sind äquivalent:

- (i) $\lambda \in \sigma_c(T)$,
- (ii) $T - \lambda$ ist injektiv, und es existiert eine Folge $(\psi_n)_{n \in \mathbb{N}} \subset D(T)$ mit $\|\psi_n\| = 1$ und $(T - \lambda)\psi_n \rightarrow 0$ ($n \rightarrow \infty$) (approximative Eigenfunktionen).

Falls $(\psi_n)_n$ eine Folge approximativer Eigenfunktionen zu $\lambda \in \sigma_c(T)$ ist, so besitzt $(\psi_n)_n$ keine konvergente Teilfolge, und es gilt $\psi_n \rightarrow 0$, d.h. $\langle \psi_n, \varphi \rangle \rightarrow 0$ ($\varphi \in \mathcal{H}$) („ ψ_n konvergiert schwach gegen 0“).

Beweis. (i) \Rightarrow (ii). Es existiert keine Konstante $C > 0$ mit

$$\|(T - \lambda)\psi\| \geq C\|\psi\| \quad (\psi \in D(T)).$$

Denn sonst wäre $T - \lambda: (D(T), \|\cdot\|_T) \rightarrow (R(T - \lambda), \|\cdot\|)$ ein Isomorphismus und damit $R(T - \lambda)$ abgeschlossen im Widerspruch zu $\lambda \in \sigma_c(T)$.

Somit existiert eine Folge $(\psi_n)_n \subset D(T)$ mit $\|\psi_n\| = 1$ und $\|(T - \lambda)\psi_n\| \rightarrow 0$.

(ii) \Rightarrow (i). Nach Voraussetzung ist $\lambda \notin \sigma_p(T)$. Wäre $\lambda \in \rho(T)$, so wäre $(T - \lambda)^{-1}$ stetig, d.h. $\|\psi_n\| \leq C\|(T - \lambda)\psi_n\|$ im Widerspruch zu (ii).

Sei nun $(\psi_n)_n$ eine Folge approximativer Eigenfunktionen zu $\lambda \in \sigma_c(T)$. Angenommen es existiert eine konvergente Teilfolge, die wieder mit $(\psi_n)_n$ bezeichnet werde, d.h. $\psi_n \rightarrow \psi \in \mathcal{H}$. Dann gilt $\|\psi\| = 1$ und

$$T\psi_n = (T - \lambda)\psi_n + \lambda\psi_n \rightarrow \lambda\psi \quad (n \rightarrow \infty).$$

Da T abgeschlossen ist, folgt $\psi \in D(T)$ und $T\psi = \lim_{n \rightarrow \infty} T\psi_n = \lambda\psi$. Also ist ψ ein Eigenvektor im Widerspruch zu $\lambda \notin \sigma_p(T)$.

Sei $\varphi \in R(T - \lambda)$, $\varphi = (T - \lambda)\psi$ mit $\psi \in D(T)$. Dann gilt

$$\langle \psi_n, \varphi \rangle = \langle \psi_n, (T - \lambda)\psi \rangle = \langle (T - \lambda)\psi_n, \psi \rangle \rightarrow 0 \quad (n \rightarrow \infty).$$

Da $R(T - \lambda)$ dicht in \mathcal{H} ist, folgt $\langle \psi_n, \varphi \rangle \rightarrow 0$ für alle $\varphi \in \mathcal{H}$, d.h. $\psi_n \rightharpoonup 0$. \square

3.17 Definition. Seien T eine Observable und $\lambda \in \mathbb{R}$. Eine Folge $(\psi_n)_n$ mit $\|\psi_n\| = 1$ und $(T - \lambda)\psi_n \rightarrow 0$, welche keine konvergente Teilfolge besitzt, heißt auch Weylsche Folge für λ . Die Menge

$$\sigma_{\text{ess}}(T) := \{\lambda \in \mathbb{R} : \text{Es existiert eine Weylsche Folge für } \lambda\}$$

heißt das essentielle Spektrum von T .

Mit Lemma 3.16 sieht man sofort, dass $\lambda \in \sigma_{\text{ess}}(T)$ genau dann gilt, falls $\lambda \in \sigma_c(T)$ oder falls λ ein Eigenwert mit unendlicher Vielfachheit ist (d.h. $\lambda \in \sigma_p(T)$ mit $\dim \ker(T - \lambda) = \infty$). Die Menge $\sigma(T) \setminus \sigma_{\text{ess}}(T)$ heißt auch diskretes Spektrum von T .

3.18 Satz. Für den Hamilton-Operator H des Wasserstoffatoms gilt $\sigma_{\text{ess}}(H) = [0, \infty)$.

Beweis. Wie im Beweis von Satz 3.15 sei wieder T der Hamilton-Operator des freien Teilchens. Nach Beispiel 3.12 gilt $\sigma_{\text{ess}}(T) = \sigma_c(T) = [0, \infty)$. Zu zeigen ist also $\sigma_{\text{ess}}(T) = \sigma_{\text{ess}}(H)$.

Sei $\lambda \in \sigma_{\text{ess}}(T)$ und $(\psi_n)_n$ eine Weylsche Folge für λ bzgl. T mit $\psi_n \rightharpoonup 0$ in $L^2(\mathbb{R}^3)$. Für $R > 0$ sei $B_R := \{x \in \mathbb{R}^3 : |x| < R\}$. Dann gilt

$$\begin{aligned} \|\psi_n\|_{H^2(B_R)} &\leq \|\psi_n\|_{H^2(\mathbb{R}^3)} \leq C_1 (\|T\psi_n\|_{L^2(\mathbb{R}^3)} + \|\psi_n\|_{L^2(\mathbb{R}^3)}) \\ &\leq C_1 (\|(T - \lambda)\psi_n\|_{L^2(\mathbb{R}^3)} + |\lambda| \|\psi_n\|_{L^2(\mathbb{R}^3)} + \|\psi_n\|_{L^2(\mathbb{R}^3)}) \\ &\leq C_2, \end{aligned}$$

wobei $\|\psi_n\|_{L^2} = 1$ und $\|(T - \lambda)\psi_n\|_{L^2} \rightarrow 0$ verwendet wurde. Damit ist $(\psi_n)_n \subset H^2(B_R)$ beschränkt. Nach dem Satz von Rellich-Kondrachov ist die Einbettung $H^2(B_R) \subset L^2(B_R)$ kompakt (hier benötigt man die Beschränktheit von B_R). Also existiert eine Teilfolge von $(\psi_n)_n$ (o.E. wieder mit $(\psi_n)_n$ bezeichnet) mit $\psi_n \rightarrow \psi \in L^2(B_R)$.

Wegen $\psi_n \rightharpoonup 0$ in $L^2(\mathbb{R}^3)$ und

$$\|\psi\|_{L^2(B_R)}^2 = \lim_{n \rightarrow \infty} \langle \psi_n, \psi \rangle_{L^2(B_R)} = 0$$

folgt $\psi_n \rightarrow 0$ ($n \rightarrow \infty$) in $L^2(B_R)$.

Nach der Interpolationsungleichung für Sobolevräume existiert zu jedem $\delta > 0$ ein $C_\delta > 0$ mit

$$\|\psi_n\|_{H^1(B_R)} \leq \delta \|\psi_n\|_{H^2(B_R)} + C_\delta \|\psi_n\|_{L^2(B_R)} \leq \delta C_2 + C_\delta \|\psi_n\|_{L^2(B_R)}$$

Zu $\varepsilon > 0$ wählt man zunächst $\delta := \frac{\varepsilon}{2C_2}$ und dann n so groß, dass $C_\delta \|\psi_n\|_{L^2(B_R)} < \frac{\varepsilon}{2}$ und erhält $\|\psi_n\|_{H^1(B_R)} < \varepsilon$. Insgesamt folgt also $\psi_n \rightarrow 0$ in $H^1(B_R)$.

Sei $\rho_R \in C^\infty(\mathbb{R}^3)$ mit $\rho_R(x) = 0$ für $|x| \leq \frac{R}{2}$, $\rho_R(x) = 1$ für $|x| \geq R$, $0 \leq \rho_R \leq 1$. Dann ist $\psi_n \rho_R \in H^2(\mathbb{R}^3) = D(T)$ und

$$\begin{aligned} & \|T(\psi_n \rho_R) - \lambda \psi_n \rho_R\|_{L^2(\mathbb{R}^3)} \\ & \leq \|\rho_R(T - \lambda)\psi_n\|_{L^2(\mathbb{R}^3)} + 2 \left\| \sum_{k=1}^3 \frac{\hbar^2}{2m} \partial_k \psi_n \partial_k \rho_R \right\| + \|\psi_n(T - \lambda)\rho_R\| \\ & \leq \|(T - \lambda)\psi_n\|_{L^2(\mathbb{R}^3)} + C \|\psi_n\|_{H^1(B_R)} \\ & \rightarrow 0 \quad (n \rightarrow \infty). \end{aligned}$$

Somit gilt für jedes $R > 0$

$$\|\psi_n\|_{L^2(B_R)} \rightarrow 0 \quad \text{und} \quad \|T(\psi_n \rho_R) - \lambda \psi_n \rho_R\|_{L^2(\mathbb{R}^3)} \rightarrow 0 \quad (n \rightarrow \infty).$$

Speziell für $R = k$, $k = 1, 2, \dots$ existieren $(n_k)_k \subset \mathbb{N}$ mit $n_1 < n_2 < \dots$ und

$$\|\psi_{n_k}\|_{L^2(B_k)} \leq \frac{1}{2}, \quad \|T(\psi_{n_k} \rho_k) - \lambda \psi_{n_k} \rho_k\|_{L^2(\mathbb{R}^3)} \leq \frac{1}{k} \quad (n \geq n_k).$$

Wegen

$$\|\psi_{n_k} \rho_k\|_{L^2(\mathbb{R}^3)}^2 \geq \|\psi_{n_k}\|_{L^2(\mathbb{R}^3) \setminus B_k}^2 \geq 1 - \|\psi_{n_k}\|_{L^2(B_k)}^2 \geq 1 - \frac{1}{4}$$

kann man $g_k := \frac{\psi_{n_k} \rho_k}{\|\psi_{n_k} \rho_k\|_{L^2(\mathbb{R}^3)}} \quad (k \in \mathbb{N})$ definieren. Dann gilt $\|g_k\|_{L^2(\mathbb{R}^3)} = 1$ und $\|(T - \lambda)g_k\|_{L^2(\mathbb{R}^3)} \rightarrow 0$. Andererseits gilt auch

$$\|Sg_k\|_{L^2(\mathbb{R}^3)} = \left\| \frac{\psi_{n_k} g_k}{r} \right\|_{L^2(\mathbb{R}^3)} \leq \frac{2}{k} \|\psi_{n_k}\|_{L^2(\mathbb{R}^3)} = \frac{2}{k}.$$

Insgesamt erhalten wir für den Operator $H = T + S$: $\|(H - \lambda)g_k\|_{L^2(\mathbb{R}^3)} \rightarrow 0$, d.h. $(g_k)_k$ ist eine Folge approximativer Eigenfunktionen sowohl für T als auch für $T + S$.

Angenommen, $(g_k)_k$ besitze eine konvergente Teilfolge, o.E. $g_k \rightarrow g \in L^2(\mathbb{R}^3)$ ($k \rightarrow \infty$). Dann gilt für jedes $R > 0$ $g_k \rightarrow g$ in $L^2(B_R)$. Aber nach Definition von g_k gilt für jedes feste $R > 0$: $g_k \rightarrow 0$ in $L^2(B_R)$ für $k \rightarrow \infty$. Somit ist $g|_{B_R} = 0$ für jedes $R > 0$ und damit $g = 0$ in $L^2(\mathbb{R}^3)$. Dies ist ein Widerspruch zu $\|g\|_{L^2(\mathbb{R}^3)} = \lim_{k \rightarrow \infty} \|g_k\|_{L^2(\mathbb{R}^3)} = 1$.

Insgesamt haben wir gesehen, dass $(g_k)_k$ eine Weylsche Folge für den Operator $H = T + S$ zum Eigenwert λ ist. Somit gilt $\lambda \in \sigma_{\text{ess}}(H)$.

Sei nun $\lambda \in \sigma_{\text{ess}}(H)$. Dieselbe Überlegung wie oben zeigt, dass dann auch $\lambda \in \sigma_{\text{ess}}(H - S) = \sigma_{\text{ess}}(T)$ gilt. Also sind die beiden essentiellen Spektren gleich, was zu zeigen war. \square

3.19 Lemma. *Für den Hamilton-Operator H des Wasserstoffatoms gilt $\sigma_p(H) \subset [-\frac{2me^4}{\hbar^2}, 0)$.*

Beweis. Im Folgenden sei $\|\cdot\| := \|\cdot\|_{L^2(\mathbb{R}^3)}$ und $\langle \cdot, \cdot \rangle = \langle \cdot, \cdot \rangle_{L^2(\mathbb{R}^3)}$. Sei $\psi \in D(H)$ mit $\|\psi\| = 1$ und $H\psi = \lambda\psi$.

(i) Unter Verwendung der 3. Poincaré-Ungleichung gilt

$$\begin{aligned} \lambda &= \langle H\psi, \psi \rangle = \frac{\hbar^2}{2m} \|\nabla\psi\|^2 - \left\langle \frac{e^2}{r} \psi, \psi \right\rangle \\ &\geq \frac{\hbar^2}{2m} \|\nabla\psi\|^2 - e^2 \left\| \frac{\psi}{r} \right\| \|\psi\| \\ &\geq \frac{\hbar^2}{2m} \|\nabla\psi\|^2 - 2e^2 \|\nabla\psi\| \|\psi\| \\ &= \left(\frac{\hbar}{\sqrt{2m}} \|\nabla\psi\| - \frac{\sqrt{2m}}{\hbar} e^2 \|\psi\| \right)^2 - \frac{2me^4}{\hbar^2} \|\psi\|^2 \\ &\geq -\frac{2me^4}{\hbar^2}. \end{aligned}$$

(ii) Für $\alpha > 0$ sei $\psi_\alpha(x) := \psi(\alpha x)$. Wegen $\Delta\psi_\alpha(x) = \alpha^2(\Delta\psi)(\alpha x)$ folgt

$$\begin{aligned} \lambda\psi_\alpha(x) &= \lambda\psi(\alpha x) = -\frac{\hbar^2}{2m}(\Delta\psi)(\alpha x) - \frac{e^2}{|\alpha x|}\psi(\alpha x) \\ &= -\frac{\hbar^2}{2m\alpha^2}\Delta\psi_\alpha(x) - \frac{e^2}{\alpha|x|}\psi_\alpha(x) \end{aligned}$$

und damit

$$\begin{aligned} \alpha^2\lambda\langle \psi_\alpha, \psi \rangle &= \langle \alpha^2\lambda\psi_\alpha, \psi \rangle \\ &= \left\langle -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\psi_\alpha - \frac{\alpha e^2}{r}\psi_\alpha, \psi \right\rangle \\ &= \left\langle \psi_\alpha, -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\psi - \frac{\alpha e^2}{r}\psi \right\rangle \\ &= \left\langle \psi_\alpha, H\psi + \frac{(1-\alpha)e^2}{r}\psi \right\rangle \\ &= \lambda\langle \psi_\alpha, \psi \rangle + (1-\alpha)e^2\left\langle \psi_\alpha, \frac{\psi}{r} \right\rangle. \end{aligned}$$

Damit erhalten wir

$$(\alpha^2 - 1)\lambda\langle\psi_\alpha, \psi\rangle = (1 - \alpha)e^2\left\langle\psi_\alpha, \frac{\psi}{r}\right\rangle.$$

Für $\alpha \neq 1$ folgt

$$(\alpha + 1)\lambda\langle\psi_\alpha, \psi\rangle = -e^2\left\langle\psi_\alpha, \frac{\psi}{r}\right\rangle.$$

Im Grenzwert $\alpha \rightarrow 1$ folgt $\|\psi_\alpha - \psi\| \rightarrow 0$ (Übung) und damit $\langle\psi_\alpha, \psi\rangle \rightarrow \|\psi\|^2 = 1$ sowie $\langle\psi_\alpha, \frac{\psi}{r}\rangle \rightarrow \langle\psi, \frac{\psi}{r}\rangle > 0$. Daher erhalten wir für $\alpha \rightarrow 1$:

$$2\lambda = -e^2\left\langle\psi, \frac{\psi}{r}\right\rangle < 0.$$

□

Die obige Abschätzung für die Eigenwerte ist um einen Faktor 4 zu grob, tatsächlich ist der kleinste Eigenwert gegeben durch $\frac{me^4}{2\hbar^2}$. Die tatsächliche Berechnung der Eigenwerte und der Eigenfunktionen ist technisch aufwändig und wird hier weggelassen (siehe z.B. [Tr72], Satz 36.2).

3.20 Satz. *Das Punktspektrum des Hamiltonoperators des Wasserstoffatoms ist gegeben durch*

$$\sigma_p(H) = \left\{ -\frac{me^4}{2\hbar^2 N^2} : N = 1, 2, \dots \right\}.$$

Der Eigenraum zum Eigenwert $-\frac{me^4}{2\hbar^2 N^2}$ hat die Dimension N^2 . Der Normalzustand des Wasserstoffatoms wird durch die normierte Eigenfunktion $\psi_1(x) = c \exp(-\frac{me^2}{\hbar^2}|x|)$ und das zugehörige Energieniveau $E_1 = -\frac{me^4}{2\hbar^2}$ beschrieben.

3.21 Bemerkung. a) Die Energieniveaus des Wasserstoffatoms sind gegeben durch $E_N = -\frac{me^4}{2\hbar^2 N^2}$, $N \in \mathbb{N}$. Nach der zweiten Interpretationsregel wird bei einem Übergang von einem stationären Zustand mit Energieniveau E_M auf einen Zustand mit niedrigerem Niveau E_N elektromagnetische Strahlung mit der Frequenz

$$\nu_{N,M} = \frac{1}{h}(E_M - E_N) = R\left(\frac{1}{N^2} - \frac{1}{M^2}\right) \quad (N < M)$$

frei, wobei $R := \frac{2\pi^2 me^4}{h^3}$ gesetzt wurde (Rydberg-Konstante).

b) Die obigen Überlegungen übertragen sich sofort auf Atome mit nur einem Elektron, wobei e^2 durch Ze^2 zu ersetzen ist mit der Kernladungszahl Z des Atoms. Als Punktspektrum ergibt sich dann $\{-\frac{mZ^2 e^4}{2\hbar^2 N^2} : N = 1, 2, \dots\}$.

3.22 Bemerkung (Atomradius). Der Abstand des Elektrons zum Atomkern des Wasserstoffatoms wird klassisch durch $r = |x|$ gegeben. Quantenmechanisch entspricht dies der Observablen $T: L^2(\mathbb{R}^3) \supset D(T) \rightarrow L^2(\mathbb{R}^3)$ mit $D(T) := \{\psi \in L^2(\mathbb{R}^3) : r\psi \in L^2(\mathbb{R}^3)\}$ und $(T\psi)(x) := r\psi(x)$ ($\psi \in D(T)$).

Analog zur eindimensionalen Ortsobservablen zeigt man, dass T selbstadjungiert ist. Es gilt weiter: T ist positiv (d.h. es gilt $\langle T\psi, \psi \rangle \geq 0$ ($\psi \in D(T)$)), das Spektrum ist gegeben durch $\sigma(T) = \sigma_c(T) = [0, \infty)$, und das Spektralmaß von T ist gegeben durch

$$(E(A)\psi)(x) = \chi_A(|x|)\psi(x) \quad (A \in \mathcal{B}([0, \infty))).$$

Nach einem der Axiome der Quantenmechanik ist damit die Wahrscheinlichkeit dafür, dass sich das Elektron im Abstand $r \in [r_1, r_2]$ zum Kern aufhält, gegeben durch

$$\|E([r_1, r_2])\psi\|^2 = \int_{|x| \in [r_1, r_2]} |\psi(x)|^2 dx = \int_{r_1}^{r_2} \int_{|x|=r} r^2 |\psi(rx)|^2 dS(x) dr.$$

Speziell im Grundzustand ist $\psi(x) = c_1 \exp(-\frac{me^2}{\hbar^2}r)$ und damit

$$\|E([r_1, r_2])\psi\|^2 = c_2 \int_{r_1}^{r_2} r^2 \exp\left(-\frac{2me^2}{\hbar^2}r\right) dr.$$

Im Grundzustand besitzt also die Aufenthaltswahrscheinlichkeit die Wahrscheinlichkeitsdichte $\varphi(r) := c_2 r^2 \exp(-\frac{2me^2}{\hbar^2}r)$ für $r \geq 0$.

Ein möglicher Wert für den Atomradius ist der Wert r , für welchen $\varphi(r)$ maximal wird. Es gilt

$$\varphi'(r) = c_2 \exp\left(-\frac{2me^2}{\hbar^2}r\right) \left[2r - \frac{2me^2}{\hbar^2}r^2\right] = 0$$

für $r = r_0 := \frac{\hbar^2}{me^2} \approx 0.53 \cdot 10^{-8}$ cm. Dies ist der Bohrsche Atomradius.

d) Das Wasserstoffatom mit Spin

Nach Satz 3.20 ist der Grundzustand eines Wasserstoffatoms eindimensional. Dies widerspricht jedoch Experimenten, bei welchen eine „Aufspaltung“ der Spektrallinien durch den Einfluss eines äußeren Magnetfelds auch für den Grundzustand beobachtet wurde (anormaler Zeeman-Effekt). Es zeigt sich, dass das Elektron noch einen weiteren internen Freiheitsgrad besitzt, der keine klassische Entsprechung hat, genannt Spin des Elektrons. Durch diesen Freiheitsgrad wird das Spektrum letztlich „verdoppelt“, d.h. die Eigenräume besitzen doppelt so große Vielfachheit.

3.23 Definition. a) Die Spin-Operatoren (bei Teilchen mit Spin $\frac{1}{2}$) in Richtung der Koordinatenachsen sind gegeben durch $S_j: \mathbb{C}^2 = D(S_j) \rightarrow \mathbb{C}^2$, $S_j = \frac{\hbar}{2}\sigma_j$, wobei

die Matrizen $\sigma_1, \sigma_2, \sigma_3 \in \mathbb{C}^{2 \times 2}$ gegeben sind durch

$$\sigma_1 := \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_2 := \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_3 := \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

(Pauli-Matrizen).

b) Auch die „trivialen Fortsetzungen“ $\text{id}_{L^2(\mathbb{R}^3)} \otimes S_j : L^2(\mathbb{R}^3; \mathbb{C}^2) \rightarrow L^2(\mathbb{R}^3; \mathbb{C}^2)$, gegeben durch

$$(\text{id}_{L^2(\mathbb{R}^3)} \otimes S_j) \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{pmatrix} (x) := S_j \begin{pmatrix} \psi_1(x) \\ \psi_2(x) \end{pmatrix} \quad (\psi \in L^2(\mathbb{R}^3; \mathbb{C}^2))$$

werden als Spinoperatoren bezeichnet (wieder mit Symbol S_j). Der Vektor aus den

drei Spinoperatoren $\mathbf{S} := \begin{pmatrix} S_1 \\ S_2 \\ S_3 \end{pmatrix}$ heißt auch Spinvektoroperator.

Man beachte in obiger Definition, dass $L^2(\mathbb{R}^3; \mathbb{C}^2)$ den Hilbertraum aller quadratintegrierbaren Funktionen $f: \mathbb{R}^3 \rightarrow \mathbb{C}^2$ bezeichnet. Eine Funktion $f \in L^2(\mathbb{R}^3; \mathbb{C}^2)$ kann als Tupel $f = \begin{pmatrix} f_1 \\ f_2 \end{pmatrix}$ geschrieben werden. Allgemeiner können Hilbert- oder Banachraumwertige L^2 bzw. L^p -Räume betrachtet werden; dies führt auf den Begriff des Bochner-Integrals. Es gilt $L^2(\mathbb{R}^3; \mathbb{C}^2) = L^2(\mathbb{R}^3) \otimes \mathbb{C}^2$ (Tensorprodukt von Banach- bzw. Hilberträumen).

3.24 Definition. Seien L_1, L_2, L_3 Observable in einem Hilbertraum \mathcal{H} , und sei $\mathbf{L} := (L_1, L_2, L_3)^T$. Dann heißt \mathbf{L} ein Drehimpulsoperator, falls $D \subset \mathcal{H}$ existiert mit $D \subset D(L_i)$, $L_i(D) \subset D$ und $\overline{L_i|_D} = L_i$ und falls die folgenden Kommutatorrelationen als Gleichheit auf D gelten:

$$\begin{aligned} [L_1, L_2] &= i\hbar L_3, \\ [L_2, L_3] &= i\hbar L_1, \\ [L_3, L_1] &= i\hbar L_2. \end{aligned}$$

3.25 Bemerkung. Die obigen Kommutatorbeziehungen werden auch in der Form

$$[L_i, L_j] = i\hbar \sum_{k=1}^3 \varepsilon_{ijk} L_k$$

geschrieben, wobei

$$\varepsilon_{ijk} := \begin{cases} 1, & \text{falls } (i, j, k) \text{ zyklisch aus } (1, 2, 3) \text{ entsteht,} \\ -1, & \text{falls } (i, j, k) \text{ antizyklisch aus } (1, 2, 3) \text{ entsteht,} \\ 0, & \text{falls mindestens zwei Indizes } i, j, k \text{ gleich sind,} \end{cases}$$

das Levi-Civita-Symbol, oder auch der ε -Tensor ist.

3.26 Beispiel. a) Die Spin-Operatoren bei Teilchen mit Spin $\frac{1}{2}$ sind ein Beispiel für ein Drehimpulsoperatoren mit $D = \mathcal{H} = \mathbb{C}^2$. Es gilt $S_j = \frac{\hbar}{2}\sigma_j$ mit den Pauli-Matrizen $\sigma_1, \sigma_2, \sigma_3 \in \mathbb{C}^{2 \times 2}$, und direktes Rechnen zeigt

$$[\sigma_1, \sigma_2] = 2i\sigma_3 \quad (+ \text{zyklisches Vertauschen der Indizes}).$$

Damit sind auch die Spin-Operatoren in $\mathcal{H} := L^2(\mathbb{R}^3; \mathbb{C}^2)$ mit $D = \mathcal{H}$ Drehimpulsoperatoren.

b) (Bahndrehimpulsoperatoren) In der klassischen Mechanik gibt es den Begriff des Drehimpulses. Wenn ein Teilchen der Masse m mit Impuls $p \in \mathbb{R}^3$ einen Punkt $x \in \mathbb{R}^3$ passiert, dann heißt

$$\mathbf{L} := x \times p := \begin{pmatrix} x_2 p_3 - x_3 p_2 \\ x_3 p_1 - x_1 p_3 \\ x_1 p_2 - x_2 p_1 \end{pmatrix}$$

der Drehimpuls dieses Teilchens. Quantenmechanisch entspricht dies formal dem Bahndrehimpulsoperator $\mathbf{L} = (L_1, L_2, L_3)^T$ mit

$$\mathbf{L} := \mathbf{Q} \times \mathbf{P} := \begin{pmatrix} Q_2 P_3 - Q_3 P_2 \\ Q_3 P_1 - Q_1 P_3 \\ Q_1 P_2 - Q_2 P_1 \end{pmatrix}.$$

Man beachte, dass Q_i und P_j kompatibel sind, falls $i \neq j$. Damit führt die Ersetzungsregel hier zu einem eindeutigen formalen Ausdruck. Jede Komponente von \mathbf{L} wird zunächst auf $D := C_0^\infty(\mathbb{R}^3)$ definiert.

Wegen $[Q_i, P_j] = 0$ und $Q_i(C_0^\infty(\mathbb{R}^3)) \subset C_0^\infty(\mathbb{R}^3)$ (analog für P_j) ist jede Komponente von \mathbf{L} symmetrisch. Man kann zeigen, dass $L_i|_{C_0^\infty(\mathbb{R}^3)}$ wesentlich selbstadjungiert ist. Die Kommutatorrelationen folgen direkt aus den kanonischen Vertauschungsrelationen für P_j und Q_j , somit ist \mathbf{L} ein Beispiel für einen Drehimpulsoperator.

3.27 Lemma. Sei \mathbf{L} ein Drehimpulsoperator, und sei $D \subset \mathcal{H}$ wie in Definition 3.24. Definiere als Abbildungen auf D

$$\begin{aligned} L_+ &:= L_1 + iL_2, \\ L_- &:= L_1 - iL_2 \end{aligned}$$

(Leiter- oder Stufenoperatoren) sowie $\mathbf{L}^2 := L_1^2 + L_2^2 + L_3^2$. Dann gilt (als Gleichheit von Operatoren auf D)

- (i) $[L_+, L_-] = 2\hbar L_3$,
- (ii) $[L_3, L_\pm] = \pm\hbar L_\pm$,
- (iii) $[\mathbf{L}^2, L_i] = 0 \quad (i = 1, 2, 3)$,

$$(iv) [\mathbf{L}^2, L_{\pm}] = 0.$$

Beweis. Dies folgt durch direktes Nachrechnen, so gilt beispielsweise

$$\begin{aligned} [L_+, L_-] &= [L_1 + iL_2, L_1 - iL_2] = -i[L_1, L_2] + i[L_2, L_1] \\ &= -2i[L_1, L_2] = -2i\hbar iL_3 = 2\hbar L_3. \end{aligned}$$

Für (iii) beachte $[L_1^2, L_1] = 0$ sowie

$$\begin{aligned} [L_2^2 + L_3^2, L_1] &= L_2[L_2, L_1] + L_2L_1L_2 - [L_1, L_2]L_2 - L_2L_1L_2 \\ &\quad + L_3[L_3, L_1] + L_3L_1L_3 - [L_1, L_3]L_3 - L_3L_1L_3 \\ &= -i\hbar L_2L_3 - i\hbar L_3L_2 + i\hbar L_3L_2 + i\hbar L_2L_3 = 0. \end{aligned}$$

□

3.28 Lemma. Sei \mathbf{L} ein Drehimpulsoperator. Es existiere ein $\psi \in D$ mit $\mathbf{L}^2\psi = \lambda^2\hbar^2\psi$, $\lambda \geq 0$, und $L_3\psi = \mu\hbar\psi$. Dann existiert ein ℓ mit $2\ell \in \mathbb{N}_0$ und $(\psi_k)_{k=-\ell}^{\ell} \subset D$ mit $\|\psi_k\| = 1$, $\mathbf{L}^2\psi_k = \lambda^2\hbar^2\psi_k$ und $L_3\psi_k = k\hbar\psi_k$ für $k = -\ell, \dots, \ell$. Weiter gilt $\lambda = \ell(\ell + 1)$.

Beweis. (i) Es gilt

$$\hbar^2(\lambda^2 - \mu^2) = \langle (\mathbf{L}^2 - L_3^2)\psi, \psi \rangle = \langle (L_1^2 + L_2^2)\psi, \psi \rangle = \|L_1\psi\|^2 + \|L_2\psi\|^2 \geq 0,$$

daher folgt $|\mu| \leq \lambda$.

(ii) Setze $\varphi := L_+\psi$. Dann gilt unter Verwendung von Lemma 3.27

$$\begin{aligned} \mathbf{L}^2\varphi &= \mathbf{L}^2L_+\psi = L_+\mathbf{L}^2\psi = \lambda^2\hbar^2L_+\psi = \lambda^2\hbar^2\varphi, \\ L_3\varphi &= L_3L_+\psi = L_+L_3\psi + [L_3, L_+]\psi = \mu\hbar L_+\psi + \hbar L_+\psi = (\mu + 1)\hbar\varphi. \end{aligned}$$

Analog zeigt man, dass für $\tilde{\varphi} := L_-\psi$ gilt: $\mathbf{L}^2\tilde{\varphi} = \lambda^2\hbar^2\tilde{\varphi}$ sowie $L_3\tilde{\varphi} = (\mu - 1)\hbar\tilde{\varphi}$.

Damit haben wir gesehen, dass mit $\mu\hbar$ auch $(\mu \pm 1)\hbar$ ein Eigenwert ist, falls $L_{\pm}\psi \neq 0$ gilt. Wendet man dies auf φ (bzw. $\tilde{\varphi}$) statt auf ψ an, so erhält man iterativ eine Folge von Eigenwerten von L_3 der Form $\mu\hbar, (\mu \pm 1)\hbar, (\mu \pm 2)\hbar, \dots$. Nach (i) ist jeder Eigenwert betragsmäßig durch $\lambda\hbar$ beschränkt, die Folge bricht also in beiden Richtungen ab. Definiere $\ell := \min\{\mu + k : k \in \mathbb{N}_0, L_+^{k+1}\psi = 0\}$ und analog $m := \max\{\mu - k : k \in \mathbb{N}_0, L_-^{k+1}\psi = 0\}$. Dann gilt $\ell - m \in \mathbb{N}_0$.

(iii) Für $\psi_{\ell} := L_+^{\ell-\mu}\psi$ gilt damit $\psi_{\ell} \neq 0$, $L_3\psi_{\ell} = \ell\hbar\psi_{\ell}$, $\mathbf{L}^2\psi_{\ell} = \lambda^2\hbar^2\psi_{\ell}$ und $L_+\psi_{\ell} = 0$. Wir verwenden $L_-L_+ = \mathbf{L}^2 - L_3^2 - \hbar L_3$ (direktes Nachrechnen) und erhalten

$$0 = L_-L_+\psi_{\ell} = (\mathbf{L}^2 - L_3^2 - \hbar L_3)\psi_{\ell}$$

$$= (\lambda^2 \hbar^2 - \ell^2 \hbar^2 - \ell \hbar^2) \psi_\ell.$$

Wegen $\psi_\ell \neq 0$ folgt $\lambda^2 = \ell(\ell+1)$. Die analoge Rechnung zeigt $\lambda^2 = m(m-1)$. Somit gilt $\ell(\ell+1) = m(m-1)$. Diese Gleichung hat die Lösungen $m = \ell+1$ und $m = -\ell$, wovon nach Definition von ℓ und m nur $m = -\ell$ in Frage kommt.

Somit folgt $2\ell = \ell - m \in \mathbb{N}_0$, und die Kette von Eigenwerten von L_3 hat die Form $-\ell\hbar, (-\ell+1)\hbar, \dots, \ell\hbar$. Speziell gilt auch $\lambda^2 = \ell(\ell+1)$. \square

3.29 Bemerkung. Nach obiger Aussage kommen für ℓ ganzzahlige und halbzahlige Werte in Frage. Durch direkte Berechnung des Spektrums kann man zeigen, dass beim Bahndrehimpuls nur ganzzahlige Werte auftreten. Tatsächlich tritt jedes $\ell \in \mathbb{N}_0$ auf: Für die Bahndrehimpulsobservable \mathbf{L} gilt $\sigma(\mathbf{L}^2) = \sigma_p(\mathbf{L}^2) = \{\ell(\ell+1) : \ell \in \mathbb{N}_0\}$, und für jedes $\ell \in \mathbb{N}_0$ existieren gemeinsame Eigenfunktionen von \mathbf{L}^2 und L_3 zum Eigenwert $\ell(\ell+1)$ bzw. k mit $k = -\ell, -\ell+1, \dots, \ell$. Die Menge aller solchen Eigenfunktionen ist vollständig in $L^2(\mathbb{R}^3)$; es handelt sich um Kugelflächenfunktionen.

Beim Spin hingegen sind auch halbzahlige Werte möglich: Bei Teilchen mit Spin $\frac{1}{2}$ ist $\ell = \frac{1}{2}$, d.h. es gibt die beiden Eigenwerte $-\frac{\hbar}{2}, +\frac{\hbar}{2}$ von S_3 . Die zugehörigen gemeinsamen Eigenfunktionen von \mathbf{S}^2 und S_3 sind in diesem Fall $\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$ und $\begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$. In diesem Fall gilt

$$S_3 = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{S}^2 = \frac{3}{4} \hbar^2 \text{id}_{\mathbb{C}^2}, \quad S_+ = \hbar \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad S_- = \hbar \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}.$$

Beim Spinoperator heißt die Zahl ℓ auch Spinquantenzahl. Teilchen mit halbzahligem Spin heißen Fermionen (darunter fallen z.B. Elektron, Proton, Neutron mit Spin $\frac{1}{2}$), Teilchen mit ganzzahligem Spin heißen Bosonen (z.B. Phonon mit Spin 0, Photon mit Spin 1).

Verwendet man quantenmechanische Systeme unter Berücksichtigung des Spins, ergibt sich in den meisten Fällen eine Verdoppelung des Spektrums. Hier nur ein Beispiel:

3.30 Definition. Das quantenmechanische System eines Wasserstoffatoms mit Spin ist gegeben durch den Hamilton-Operator $H_{\text{spin}}: L^2(\mathbb{R}^3; \mathbb{C}^2) \supset D(H) \rightarrow L^2(\mathbb{R}^3; \mathbb{C}^2)$ mit $D(H_{\text{spin}}) := H^2(\mathbb{R}^3; \mathbb{C}^2)$ und

$$H_{\text{spin}}\psi := -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\psi - \frac{e^2}{r}\psi \quad (\psi \in D(H_{\text{spin}})).$$

Dabei ist $\Delta\psi := \begin{pmatrix} \Delta\psi_1 \\ \Delta\psi_2 \end{pmatrix}$ für $\psi = \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{pmatrix} \in D(H_{\text{spin}})$.

3.31 Satz. Für den Hamilton-Operator H_{spin} aus Definition 3.30 gilt $\sigma_c(H_{\text{spin}}) = [0, \infty)$ und $\sigma_p(H_{\text{spin}}) = \{-\frac{me^4}{2\hbar^2 N^2} : N \in \mathbb{N}\}$. Der Eigenwert $-\frac{me^4}{2\hbar^2 N^2}$ hat die Dimension $2N^2$. Eine Orthonormalbasis des Eigenraums ist gegeben durch

$$\left\{ \begin{pmatrix} \psi_j \\ 0 \end{pmatrix} : j = 1, \dots, N^2 \right\} \cup \left\{ \begin{pmatrix} 0 \\ \psi_j \end{pmatrix} : j = 1, \dots, N^2 \right\},$$

wobei $\{\psi_j : j = 1, \dots, N^2\}$ eine Orthonormalbasis des entsprechenden Eigenraums des (skalaren) Hamiltonoperators H beim Wasserstoffatom ohne Spin ist.

Beweis. In Matrixschreibweise lässt sich H_{spin} schreiben als $H_{\text{spin}} = \begin{pmatrix} H & 0 \\ 0 & H \end{pmatrix}$. Man sieht sofort, dass $H_{\text{spin}} - \lambda$ genau dann bijektiv bzw. injektiv ist, falls dies auf $H - \lambda$ zutrifft. Falls $\lambda \in \sigma_p(H)$ mit zugehöriger Eigenfunktion ψ , so sind sowohl $\begin{pmatrix} \psi \\ 0 \end{pmatrix}$ als auch $\begin{pmatrix} 0 \\ \psi \end{pmatrix}$ Eigenfunktionen von H_{spin} . \square

3.32 Bemerkung. Während die Einführung des Spins bei den bisherigen Beispielen keine neuen Erkenntnisse gebracht hat, gibt es Experimente, welche nur mit Hilfe des Spins erklärt werden können. Dazu zählt der anormale Zeeman-Effekt, der z.B. bei Wasserstoffatomen in einem Magnetfeld konstanter Stärke beobachtet werden kann und hier kurz erklärt werden soll.

a) Nach Satz 3.20 besitzt der Hamiltonoperator H des Wasserstoffatoms ohne Spin die Eigenwerte $-\frac{me^4}{2\hbar^2 N^2} = -\frac{Rh}{N^2}$ mit Vielfachheit N^2 , wobei $N \in \mathbb{N}$ und R die Rydberg-Konstante ist. Bei Anwesenheit eines äußeren Magnetfeldes konstanter Stärke $|\vec{H}|$ besitzt der entsprechend geänderte Hamilton-Operator H_{Zee} hingegen die Eigenwerte $-\frac{Rh}{N^2} - \mu_B |\vec{H}| M$ mit Vielfachheit $N - |M|$, wobei $N \in \mathbb{N}$ und $M \in \mathbb{Z}$ mit $|M| \leq N - 1$.

Speziell für $N = 1$ ist $M = 0$, d.h. der Eigenwert ist unverändert. Für $N = 2$ hingegen erhält man die Werte $M = -1, 0, 1$, und die entsprechenden Eigenwerte besitzen die Vielfachheit 1, 2 und 1. Man sieht, dass der Eigenwert von H zu $N = 2$ (mit Vielfachheit 4) durch das äußere Magnetfeld „aufgespalten“ wird in drei Eigenwerte der Vielfachheiten 1, 2 und 1. Dieser Effekt heißt normaler Zeeman-Effekt und wird durch H_{Zee} (genaue Definition siehe unten) gut beschrieben.

b) Experimentell beobachtet wird aber auch ein Aufspalten des Grundzustands $N = 1$ in zwei Eigenräume. Dieser Effekt heißt anormaler Zeeman-Effekt und kann ohne Spin nicht beschrieben werden. Betrachtet man jedoch den Hamiltonoperator $H_{\text{Zee,spin}}$ eines Wasserstoffatoms im Magnetfeld mit Spin, so besitzt dieser die Eigenwerte $\lambda_{N,M,+} := -\frac{Rh}{N^2} + \mu_B |\vec{H}| (M + 1)$ und $\lambda_{N,M,-} := -\frac{Rh}{N^2} + \mu_B |\vec{H}| (M - 1)$, wobei wieder $N \in \mathbb{N}$ und $|M| \leq N - 1$.

Speziell für $N = 1$ erhält man die beiden Eigenwerte

$$\lambda_{1,0,+} = -\frac{Rh}{N^2} + \mu_B |\vec{H}|, \quad \lambda_{1,0,-} = -\frac{Rh}{N^2} - \mu_B |\vec{H}|.$$

Dies zeigt das Aufspalten des zweidimensionalen Eigenraums zum Eigenwert $-\frac{Rh}{N^2}$ von H_{spin} in zwei eindimensionale Eigenräume von $H_{\text{Zee,spin}}$.

Für die genauen Formulierungen der oben genannten Hamilton-Operatoren seien e und m die Ladung und Masse des Elektrons, c die Lichtgeschwindigkeit, $\mu_B := \frac{|e|\hbar}{2mc}$ das Bohrsche Magneton und $R := \frac{2\pi^2me^4}{h^3}$ die Rydberg-Konstante. Das äußere Magnetfeld habe die Form $\vec{H} = (0, 0, |\vec{H}|)^T$, wobei $|\vec{H}| \in \mathbb{R}$ als klein angenommen wird.

Man definiert H_{Zee} in $L^2(\mathbb{R}^3)$ durch $D(H_{\text{Zee}}) := C_0^\infty(\mathbb{R}^3)$ und

$$H_{\text{Zee}}\psi := -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\psi - \frac{e^2}{r}\psi + \frac{\mu_B|\vec{H}|}{i}\left(x_1\frac{\partial\psi}{\partial x_2} - x_2\frac{\partial\psi}{\partial x_1}\right) \quad (\psi \in D(H_{\text{Zee}})).$$

Der analoge Operator mit Spin wird definiert durch $D(H_{\text{Zee,spin}}) := C_0^\infty(\mathbb{R}^3; \mathbb{C}^2)$ und

$$H_{\text{Zee,spin}}\psi := -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\psi - \frac{e^2}{r}\psi + \frac{\mu_B|\vec{H}|}{i}\left(x_1\frac{\partial\psi}{\partial x_2} - x_2\frac{\partial\psi}{\partial x_1}\right) + \mu_B|\vec{H}|\begin{pmatrix} \psi_1 \\ -\psi_2 \end{pmatrix}$$

für $\psi = (\psi_1, \psi_2)^T \in D(H_{\text{Zee,spin}})$.

Der folgende Satz kann hier nicht bewiesen werden.

3.33 Satz. a) H_{Zee} ist wesentlich selbstadjungiert. Es gilt

$$\sigma_p(\overline{H_{\text{Zee}}}) = \{\lambda_{N,M} : N \in \mathbb{N}, |M| \leq N-1\} \quad \text{mit } \lambda_{N,M} := -\frac{Rh}{N^2} - \mu_B|\vec{H}|M,$$

wobei $\lambda_{N,M}$ die Vielfachheit $N - |M|$ besitzt (falls nicht verschiedene Eigenwerte bei spezieller Wahl von $|\vec{H}|$ zusammenfallen).

b) $H_{\text{Zee,spin}}$ ist wesentlich selbstadjungiert. Es gilt

$$\sigma_p(\overline{H_{\text{Zee,spin}}}) = \{\lambda_{N,M,+} : N \in \mathbb{N}, |M| \leq N-1\} \cup \{\lambda_{N,M,-} : N \in \mathbb{N}, |M| \leq N-1\}$$

wobei

$$\begin{aligned} \lambda_{N,M,+} &:= -\frac{Rh}{N^2} + \mu_B|\vec{H}|(M+1), \\ \lambda_{N,M,-} &:= -\frac{Rh}{N^2} + \mu_B|\vec{H}|(M-1). \end{aligned}$$

Der Eigenwert $\lambda_{N,M,\pm}$ besitzt die Vielfachheit $N - |M|$, wobei manche dieser Eigenwerte zusammenfallen (z.B. $\lambda_{N,M,+} = \lambda_{N,M+2,-}$) und die Vielfachheit dann entsprechend höher ist.

3.34 Bemerkung (Spin-Bahn-Kopplung). Selbst bei Abwesenheit eines äußeren Magnetfelds tritt ein Aufspalten des Energieniveaus auf. Dies liegt unter anderem

an der Spin-Bahn-Wechselwirkung. Hier wird die Kopplung zweier magnetischer Momente berücksichtigt: das durch den Spin erzeugte Moment des Elektrons und das magnetische Moment, welches durch die Kreisbewegung des Elektrons um den Atomkern erzeugt wird (genauer durch die Bewegung des Atomkerns in dem Bezugssystem, in welchem das Elektron ruht).

Eine formale Ableitung der Spin-Bahn-Kopplung verwendet relativistische Quantenmechanik und führt auf einen Korrekturterm des Hamilton-Operators. Ohne Berücksichtigung weiterer Effekte erhält man den Operator

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta - \frac{e}{r} + \frac{\mu_0}{8\pi m^2 r^3} \mathbf{L} \cdot \mathbf{S},$$

wobei \mathbf{L} der Bahndrehimpulsoperator (Beispiel 3.26 b)) und \mathbf{S} der Spinoperator (Beispiel 3.26 b)) ist. Man erhält eine Aufspaltung der Spektrallinien in mehrere dicht nebeneinander liegende Linien, welche auch als Feinstruktur des Wasserstoffatoms bezeichnet wird.

3.35 Bemerkung (Quantenzahlen). Man kann zeigen, dass der Eigenraum von H zum Eigenwert $-\frac{R\hbar}{N^2}$ aufgespannt wird von Funktionen der Form $\psi_{N,M,L}(x) = \psi_L^{(N)}(r)\psi_M^{(L)}(\theta)$ (in Polarkoordinaten $x = r\theta$), wobei $L = 0, \dots, N-1$ und $M = -L, \dots, L$. Dabei heißt N die Hauptquantenzahl, L die Nebenquantenzahl und M die magnetische Quantenzahl. Ohne Magnetfeld bestimmt alleine die Hauptquantenzahl N das Energieniveau des stationären Zustands, bei Wasserstoffatomen im Magnetfeld erfolgt eine Aufspaltung. Mit Spin gibt es noch die Spinquantenzahl $S \in \{+, -\}$, wobei einem stationären Zustand ψ der Form $\psi = \begin{pmatrix} \psi_1 \\ 0 \end{pmatrix}$ der Spin „+“ zugeordnet wird und einem der Form $\psi = \begin{pmatrix} 0 \\ \psi_2 \end{pmatrix}$ der Spin „-“ zugeordnet wird. Statt $S \in \{+, -\}$ schreibt man auch $S \in \{\uparrow, \downarrow\}$.

e) Dirac-Operatoren

3.36 Definition. Seien $\sigma_1, \sigma_2, \sigma_3$ die Pauli-Matrizen (siehe Definition 3.23). Dann sind die Dirac-Matrizen $\alpha_k \in \mathbb{C}^{4 \times 4}$ ($k = 1, \dots, 4$) definiert durch

$$\alpha_k := \begin{pmatrix} 0 & -i\sigma_k \\ i\sigma_k & 0 \end{pmatrix} \quad (k = 1, 2, 3), \quad \alpha_4 := \begin{pmatrix} I_2 & 0 \\ 0 & -I_2 \end{pmatrix},$$

wobei I_n die $n \times n$ -Einheitsmatrix bezeichne.

3.37 Bemerkung. Man rechnet direkt nach, dass $\sigma_k \sigma_\ell + \sigma_\ell \sigma_k = 2\delta_{k\ell} I_2$ gilt, d.h. die Pauli-Matrizen bilden ein antikommutierendes System selbstadjungierter Matrizen. Damit erhält man

$$\alpha_k \alpha_\ell + \alpha_\ell \alpha_k = 2\delta_{k\ell} I_4 \quad (k, \ell = 1, \dots, 4).$$

Definiert man noch $\alpha_5 := \begin{pmatrix} 0 & I_2 \\ I_2 & 0 \end{pmatrix}$, so bildet $\{\alpha_1, \dots, \alpha_5\}$ ein System antikommutierender selbstadjungierter Matrizen. Bei Matrizen der Dimension 4 ist 5 bereits die maximale Größe eines solchen Systems.

3.38 Definition. Ein freies Teilchen im dreidimensionalen Raum wird in der relativistischen Quantenmechanik beschrieben durch den Operator $H_{D,0}: L^2(\mathbb{R}^3; \mathbb{C}^4) \supset D(H_{D,0}) \rightarrow L^2(\mathbb{R}^3; \mathbb{C}^4)$ mit $D(H_{D,0}) := C_0^\infty(\mathbb{R}^3; \mathbb{C}^4)$ und

$$H_{D,0}\psi := \frac{c\hbar}{i} \sum_{k=1}^3 \alpha_k \frac{\partial \psi}{\partial x_k} + mc^2 \alpha_4 \psi \quad (\psi \in D(H_{D,0})).$$

Dabei ist m die Masse des Teilchens und c die Lichtgeschwindigkeit.

3.39 Bemerkung. a) Für $\psi \in C_0^\infty(\mathbb{R}^3; \mathbb{C}^4)$ gilt

$$\begin{aligned} H_{D,0}^2 \psi &= \frac{c\hbar}{i} \sum_{k=1}^3 \alpha_k \frac{\partial (H_{D,0} \psi)}{\partial x_k} + mc^2 \alpha_4 H_{D,0} \psi \\ &= -c^2 \hbar^2 \sum_{k,\ell=1}^3 \alpha_k \alpha_\ell \frac{\partial^2 \psi}{\partial x_k \partial x_\ell} + \frac{c\hbar}{i} mc^2 \sum_{k=1}^3 \alpha_k \alpha_4 \frac{\partial \psi}{\partial x_k} \\ &\quad + mc^2 \frac{c\hbar}{i} \sum_{k=1}^3 \alpha_4 \alpha_k \frac{\partial \psi}{\partial x_k} + m^2 c^4 \alpha_4^2 \psi \\ &= -c^2 \hbar^2 \sum_{k=1}^3 \alpha_k^2 \frac{\partial^2 \psi}{\partial x_k^2} + m^2 c^4 \alpha_4^2 \psi \\ &= -c^2 \hbar^2 \Delta \psi + m^2 c^4 \psi, \end{aligned}$$

wobei $\alpha_k \alpha_\ell = 0$ für $k \neq \ell$ und $\alpha_k^2 = I_4$ verwendet wurde (Bemerkung 3.37).

b) Die relativistische Hamiltonfunktion ist gegeben durch

$$h(x, p) = \sqrt{m^2 c^4 + c^2 p_1^2 + c^2 p_2^2 + c^2 p_3^2}.$$

Ersetzt man p_k durch P_k (siehe Quantisierungsregel 2.12), so erhält man formal den Operator $\sqrt{m^2 c^4 - c^2 \hbar^2 \Delta}$.

Definiert man den Operator $B: L^2(\mathbb{R}^3) \supset D(B) \rightarrow L^2(\mathbb{R}^3)$ durch $D(B) := H^2(\mathbb{R}^2)$ und $B\psi := -c^2 \hbar^2 \Delta \psi + m^2 c^2 \psi$, so ist B nach dem Kriterium von Kato (Satz 3.13) selbstadjungiert. Wegen $\sigma(-\Delta) = \sigma_c(-\Delta) = [0, \infty)$ (Lemma 3.7) gilt

$$\sigma(B) = \sigma_c(B) = [m^2 c^2, \infty).$$

Insbesondere ist $(\lambda \mapsto \sqrt{\lambda}) \in C(\sigma(B))$, und nach dem Spektralsatz ist \sqrt{B} wohldefiniert und ein selbstadjungierter positiver Operator. Es gilt $(\sqrt{B})^2 = B$ nach dem Funktionalkalkül, und man kann zeigen, dass $D(\sqrt{B}) = H^1(\mathbb{R}^3)$ gilt.

Allerdings ist \sqrt{B} kein Differentialoperator und zumindest formal tauchen auch Ableitungen zweiter Ordnung auf. Günstiger ist es daher, die Dimension zu erhöhen und in $L^2(\mathbb{R}^3; \mathbb{C}^4)$ einen Operator H_D zu suchen, welcher ebenfalls $H_D^2 = B$ erfüllt (genauer $H_D^2 = B \otimes \text{id}_{\mathbb{C}^4}$). Nach Teil a) gilt dies für $H_{D,0}$ als Gleichheit in $C_0^\infty(\mathbb{R}^3; \mathbb{C}^4)$.

Eine formale Begründung für die Verwendung von $H_{D,0}$ anstelle von \sqrt{B} verwendet die Invarianz bezüglich der relativistischen Koordinatentransformation (Lorentztransformation). Diese beschreibt den Wechsel auf ein Bezugssystem, welches sich mit konstanter Geschwindigkeit bezüglich des ursprünglichen bewegt. Bei Bewegung in x_1 -Richtung mit Geschwindigkeit v wird der Orts-Zeitvektor (x, t) abgebildet auf (x', t') mit

$$x'_1 = \frac{x_1 - vt}{\sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}}, \quad x'_2 = x_2, \quad x'_3 = x_3, \quad t' = \frac{t - \frac{v}{c^2}x_1}{\sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}}.$$

3.40 Satz. *Der Operator $H_{D,0}$ aus Definition 3.38 ist wesentlich selbstadjungiert. Für den Dirac-Operator $H_D := \overline{H_{D,0}}$ gilt $D(H_D) = H^1(\mathbb{R}^3; \mathbb{C}^4)$ und $H_D^2 = B \otimes \text{id}_{\mathbb{C}^4}$ inklusive Gleichheit der Definitionsbereiche $D(H_D^2) = D(B \otimes \text{id}_{\mathbb{C}^4}) = H^2(\mathbb{R}^3; \mathbb{C}^4)$.*

Beweis. Für $\psi, \varphi \in D(H_{D,0})$ erhalten wir mit $\alpha_k = \alpha_k^*$ in $\mathbb{C}^{4 \times 4}$ und mit partieller Integration

$$\begin{aligned} \langle H_{D,0}\psi, \varphi \rangle &= \frac{c\hbar}{i} \sum_{k=1}^3 \left\langle \alpha_k \frac{\partial \psi}{\partial x_k}, \varphi \right\rangle + mc^2 \langle \alpha_4 \psi, \varphi \rangle \\ &= \frac{c\hbar}{i} \sum_{k=1}^3 \left\langle \frac{\partial \psi}{\partial x_k}, \varphi \right\rangle + mc^2 \langle \psi, \alpha_4 \varphi \rangle \\ &= \left\langle \psi, \frac{c\hbar}{i} \sum_{k=1}^3 \alpha_k \frac{\partial \varphi}{\partial x_k} + mc^2 \varphi \right\rangle \\ &= \langle \psi, H_{D,0} \varphi \rangle. \end{aligned}$$

Also ist $H_{D,0}$ symmetrisch und damit nach Satz 2.3 (i) abschließbar. Sei $H_D := \overline{H_{D,0}}$.

Für $\psi \in C_0^\infty(\mathbb{R}^3; \mathbb{C}^4)$ folgt mit Bemerkung 3.39

$$\begin{aligned} \|H_{D,0}\psi\|^2 &= \langle H_{D,0}^2 \psi, \psi \rangle \\ &= -c^2 \hbar^2 \langle \Delta \psi, \psi \rangle + m^2 c^4 \|\psi\|^2 \\ &= c^2 \hbar^2 \|\nabla \psi\|^2 + m^2 c^4 \|\psi\|^2 \\ &\approx \|\psi\|_{H^1(\mathbb{R}^3; \mathbb{C}^4)}^2. \end{aligned}$$

Da $C_0^\infty(\mathbb{R}^3; \mathbb{C}^4)$ dicht in $H^1(\mathbb{R}^3; \mathbb{C}^4)$ liegt, folgt $D(H_D) = H^1(\mathbb{R}^3; \mathbb{C}^4)$.

Für $\psi \in H^2(\mathbb{R}^3; \mathbb{C}^4)$ ist $H_D\psi \in H^1(\mathbb{R}^3; \mathbb{C}^4)$, da H_D nur Ableitungen erster Ordnung enthält. Damit folgt $\psi \in D(H_D^2)$ und $H_D^2\psi = -c^2\hbar^2\Delta\psi + m^2c^4\psi = \tilde{B}$ mit dem Operator $\tilde{B} := B \otimes \text{id}_{\mathbb{C}^4}$, wobei B wie in Bemerkung ?? b) definiert ist. Der Operator \tilde{B} ist selbstadjungiert mit $0 \in \rho(\tilde{B})$ (siehe Bemerkung ?? b)). Somit ist $\tilde{B}: D(\tilde{B}) = H^2(\mathbb{R}^3; \mathbb{C}^4) \rightarrow L^2(\mathbb{R}^3; \mathbb{C}^4)$ surjektiv, und wegen

$$D(H_D^2) \supset D(\tilde{B}), \quad H_D^2\psi = \tilde{B}\psi \quad (\psi \in D(\tilde{B}))$$

ist auch H_D surjektiv. Als surjektiver symmetrischer Operator ist H_D selbstadjungiert.

Wegen $D(H_D^2) \supset H^2(\mathbb{R}^3; \mathbb{C}^4) = D(\tilde{B})$ und

$$\langle H_D^2\psi, \varphi \rangle = \langle H_D\psi, H_D\varphi \rangle = \langle \psi, H_D^2\varphi \rangle \quad (\psi, \varphi \in H^2(\mathbb{R}^3; \mathbb{C}^4))$$

ist H_D^2 eine symmetrischer Fortsetzung des selbstadjungierten Operators \tilde{B} . Also ist $H_D^2 = \tilde{B}$, insbesondere gilt auch $D(H_D^2) = D(\tilde{B})$. \square

3.41 Lemma (Spektralabbildungssatz). *Sei $A: \mathcal{H} \supset D(A) \rightarrow \mathcal{H}$ eine Observable, q ein komplexes Polynom. Dann ist $q(A)$ abgeschlossen, und es gilt*

$$\sigma(q(A)) = q(\sigma(A)) := \{q(\mu) : \mu \in \sigma(A)\}.$$

Die analoge Aussage gilt, falls man σ durch σ_p ersetzt.

Beweis. (i) O. E. sei q normiert mit $\deg q =: n \geq 1$, d.h. $q(z) = \sum_{k=0}^n a_k z^k$ mit $a_n = 1$. Wir zeigen die Abgeschlossenheit von $q(A)$ durch Induktion über n .

$n = 1$: Als selbstadjungierter Operator ist A abgeschlossen und damit auch $q(A) = A + a_0$.

$n \rightarrow n + 1$: Sei $\mu := q(i)$. Wir schreiben $q(z) = (z - i)r(z) + \mu$ mit einem Polynom r mit $\deg r = n$. Sei $(x_m)_{m \in \mathbb{N}} \subset D(A^{n+1}) = D(q(A))$ eine Folge mit $x_m \rightarrow x$ in \mathcal{H} und $q(A)x_m \rightarrow y$ in \mathcal{H} . Dann gilt

$$r(A)x_m = (A - i)^{-1}q(A)x_m - \mu(A - i)^{-1}x_m \rightarrow (A - i)^{-1}(y - \mu x) \quad (m \rightarrow \infty).$$

Nach Induktionsvoraussetzung ist $r(A)$ abgeschlossen, und es folgt $x \in D(r(A)) = D(A^n)$ und $r(A)x = (A - i)^{-1}(y - \mu x) \in D(A)$. Also ist $x \in D(A^{n+1})$ und $q(A)x = (A - i)r(A)x + \mu x = y$, d.h. $q(A)$ ist abgeschlossen.

(ii) Sei $\lambda \in \mathbb{C}$. Schreibe $q(z) - \lambda = \prod_{j=1}^n (z - \mu_j)$. Dann gilt $q(\mu_j) = \lambda$ und

$$q(A) - \lambda = (A - \mu_1) \cdot \dots \cdot (A - \mu_n). \quad (3-5)$$

Falls $\lambda \in \rho(q(A))$, ist $q(A) - \lambda: D(A^n) \rightarrow \mathcal{H}$ bijektiv, und nach (3-5) ist $A - \mu_1$ surjektiv und $A - \mu_n$ injektiv. Da alle Faktoren vertauschen, sind alle $A - \mu_j$ bijektiv, d.h. $\mu_j \in \rho(A)$ ($j = 1, \dots, n$).

Falls andererseits mindestens einer der Faktoren $A - \mu_j$ nicht bijektiv ist, so ist auch die Komposition $q(A) - \lambda$ nicht bijektiv. Also folgt $\lambda \in \rho(q(A))$ genau dann, wenn $\mu_j \in \rho(A)$ für alle $j = 1, \dots, n$ gilt, d.h. es gilt

$$\sigma(q(A)) = \{\lambda \in \mathbb{C} : \exists \mu \in \sigma(A) : \lambda = q(\mu)\} = q(\sigma(A)).$$

Falls $(A - \mu_j)x = 0$ mit $x \in D(A) \setminus \{0\}$, so folgt $x \in D(q(A))$, und aus (3-5) folgt $(q(A) - \lambda)x = 0$. Falls wiederum alle $A - \mu_j$ injektiv sind, ist die Komposition $q(A) - \lambda$ ebenfalls injektiv. Also gilt auch $\sigma_p(q(A)) = q(\sigma_p(A))$. \square

3.42 Korollar. Für den Dirac-Operator H_D gilt

$$\sigma(H_D) = \sigma_c(H_D) = (-\infty, -mc^2] \cup [mc^2, \infty).$$

Beweis. Nach Satz 3.40 gilt $H_D^2 = \tilde{B}$, d.h. $\sigma(H_D^2) = \sigma_c(H_D^2) = [m^2c^4, \infty)$. Also gilt nach Lemma 3.41 $\sigma_p(H_D) = \emptyset$, und für jedes $\lambda \in [mc^2, \infty)$ gilt $\lambda \in \sigma_c(H_D)$ oder $-\lambda \in \sigma_c(H_D)$. Zu zeigen ist also nur noch $\lambda \in \sigma_c(H_D) \iff -\lambda \in \sigma_c(H_D)$.

Sei $\lambda \in \sigma_c(H_D)$ und $(\psi_n)_{n \in \mathbb{N}}$ eine Weylsche Folge zu λ (siehe Definition 3.17). Sei $\alpha_5 := \begin{pmatrix} 0 & I_2 \\ I_2 & 0 \end{pmatrix}$ (siehe Bemerkung 3.37). Dann ist $\alpha_5 \psi_n \in H^1(\mathbb{R}^3; \mathbb{C}^4) = D(H_D)$ und

$$\|\alpha_5 \psi_n\|^2 = \langle \alpha_5^2 \psi_n, \psi_n \rangle = \|\psi_n\|^2 = 1.$$

Also besitzt auch $(\alpha_5 \psi_n)_n$ keine konvergente Teilfolge. Weiter gilt, da $\alpha_5 \alpha_k = -\alpha_k \alpha_5$ für $k = 1, \dots, 4$ nach Bemerkung 3.37,

$$\|(H_D + \lambda)\alpha_5 \psi_n\| = \|\alpha_5(-H_D + \lambda)\psi_n\| = \|(H_D - \lambda)\psi_n\| \rightarrow 0 \quad (n \rightarrow \infty),$$

d.h. $(\alpha_5 \psi_n)_n$ ist eine Weylsche Folge für H_D zu $-\lambda$. \square

3.43 Bemerkung. Der Dirac-Operator ist der erste auftretende Hamilton-Operator, welcher nicht halbbeschränkt ist. Die Existenz beliebig negativer Energien hat zur Vorhersage der Existenz des Positrons, des Antiteilchens des Elektrons, geführt.

3.44 Definition. In der relativistischen Quantenmechanik wird das Wasserstoffatom beschrieben durch den Hamilton-Operator $H^{(0)}: L^2(\mathbb{R}^3; \mathbb{C}^4) \supset D(H^{(0)}) \rightarrow L^2(\mathbb{R}^3; \mathbb{C}^4)$ mit $D(H^{(0)}) := C_0^\infty(\mathbb{R}^3; \mathbb{C}^4)$ und

$$H^{(0)}\psi := \frac{c\hbar}{i} \sum_{k=1}^3 \alpha_k \frac{\partial \psi}{\partial x_k} + mc^2 \alpha_4 \psi - \frac{e^2}{r} \psi \quad (\psi \in D(H^{(0)})).$$

3.45 Satz. $H^{(0)}$ ist wesentlich selbstadjungiert, und für $H := \overline{H^{(0)}}$ gilt $D(H) = H^1(\mathbb{R}^3; \mathbb{C}^4)$ und $\sigma_c(H) = (-\infty, -mc^2] \cup [mc^2, \infty)$.

Beweis. (i) Für $\psi \in C_0^\infty(\mathbb{R}^3; \mathbb{C}^4)$ gilt mit der 3. Poincaré-Ungleichung, Lemma 3.14,

$$\left\| e^2 \frac{\psi}{r} \right\|^2 = e^4 \sum_{k=1}^4 \left\| \frac{\psi_k}{r} \right\|_{L^2(\mathbb{R}^3)}^2 \leq 4e^4 \sum_{k=1}^4 \|\nabla \psi_k\|_{L^2(\mathbb{R}^3; \mathbb{R}^3)}^2.$$

Somit ist

$$\begin{aligned} \|H_D \psi\|^2 &= c^2 \hbar^2 \sum_{k=1}^4 \|\nabla \psi_k\|_{L^2(\mathbb{R}^3; \mathbb{C}^3)}^2 + m^2 c^4 \|\psi\|_{L^2(\mathbb{R}^3; \mathbb{C}^4)}^2 \\ &\geq \frac{c^2 \hbar^2}{4e^4} \left\| e^2 \frac{\psi}{r} \right\|^2 \\ &\geq 4 \|(H^{(0)} - H_D) \psi\|^2, \end{aligned}$$

wobei verwendet wurde, dass für die Sommerfeldsche Feinstrukturkonstante $\alpha := \frac{e^2}{\hbar c}$ gilt: $\alpha \approx \frac{1}{137} < \frac{1}{2}$.

Also ist $H^{(0)}$ eine Kato-Störung von H_D (Satz 3.13), und damit ist H selbstadjungiert mit Definitionsbereich $D(H) = D(H_D) = H^1(\mathbb{R}^3; \mathbb{C}^4)$.

(ii) Analog zum Beweis von Satz 3.18 kann man zeigen, dass für eine Weylsche Folge $(\psi_n)_n$ von H_D die entsprechend modifizierte Folge $(\psi_{n_k} \rho_k)_k$ eine Weylsche Folge sowohl für H_D als auch für H ist und daher $\sigma_c(H_D) = \sigma_c(H)$ gilt. \square

3.46 Bemerkung. Der obige Satz trifft nur eine Aussage über das kontinuierliche Spektrum, die Bestimmung des Punktspektrums ist deutlich komplizierter. Man kann zeigen, dass im Intervall $(-mc^2, mc^2)$ unendlich viele Eigenwerte liegen, die sich bei mc^2 häufen. Es gilt

$$\sigma_p(H) = \left\{ mc^2 \left(1 + \frac{\alpha^2}{(n + \sqrt{k^2 - \alpha^2})^2} \right)^{-1/2} : k \in \mathbb{N}, n \in \mathbb{N}_0 \right\},$$

wobei wieder $\alpha := \frac{e^2}{\hbar c} \approx \frac{1}{137}$ ist. Damit ergibt sich eine Korrektur der Spektrallinien verglichen mit der nichtrelativistischen Rechnung (Feinstruktur).

Literatur

- [Ad75] Adams, R. A.: Sobolev spaces. Academic Press, New York 1975.
- [GP89] Galindo, A., Pascual, P.: Quantum mechanics I. Springer, Berlin et al., 1989.
- [GGK90] Gohberg, I., Goldberg, S., Kaashoek, M. A.: Classes of linear operators. Vol. I. Birkhäuser Basel 1990.
- [Ha74] Halmos, P.: A Hilbert Space Problem Book. Springer-Verlag, Berlin 1974.
- [He86] Heuser, H.: Funktionalanalysis. B.G. Teubner Verlag, Stuttgart 1986.
- [Ja68] Jauch, J. M.: Foundations of Quantum Mechanics. Addison-Wesley Massachusetts 1968.
- [Ka76] Kato, T.: Perturbation theory for linear operators. Springer Berlin 1976.
- [Ko09] Kohlmann, M.: Beiträge zur naiven Quantenmechanik. Martin Meidenbauer Verlagsbuchhandlung München 2009.
- [Ne32] von Neumann, J.: Mathematische Grundlagen der Quantenmechanik. Verlag Julius Springer Berlin 1932.
- [No02-2] Nolting, W.: Grundkurs Theoretische Physik 2: Analytische Mechanik. Springer, Berlin et al. 2002.
- [No02-5/1] Nolting, W.: Grundkurs Theoretische Physik 5/1: Quantenmechanik - Grundlagen. Springer, Berlin et al. 2002.
- [No02-5/2] Nolting, W.: Grundkurs Theoretische Physik 5/2: Quantenmechanik - Methoden und Anwendungen. Springer, Berlin et al. 2002.
- [RS90] Reed, M., Simon, B.: Methods of modern mathematical physics. I-IV. Functional analysis. Academic Press San Diego 1980.
- [Ru73] Rudin, W.: Functional analysis. McGraw-Hill New York 1973.
- [St05] Strocchi, F.: An introduction to the mathematical structure of quantum mechanics. World Scientific New Jersey 2005.
- [Tr72] Triebel, H.: Höhere Analysis. Verlag der Wissenschaften Berlin 1972.
- [Tr79] Triebel, H.: Analysis und mathematische Physik. Carl Hanser Verlag München 1979.
- [We05] Werner, D.: Funktionalanalysis (5., erw. Aufl.). Springer Berlin 2005.

Index

- abgeschlossen (Operator), 4
- abschließbar, 4
- Abschließung (Operator), 4
- adjungierter Operator, 5
- antikommütierendes System, 50
- Antiteilchen, 54
- Approximative Eigenfunktionen, 38
- Axiome der Quantenmechanik, 25

- Bahndrehimpulsoperatoren, 45
- Basis eines Hilbertraums, 3
- Besetzungszahloperator, 28
- Bohrsches Magneton, 49
- Bosonen, 47

- dicht, 3
- Dirac-Matrizen, 50
- Dirac-Operator, 52
- Drehimpulsoperator, 44

- Erwartungswert, 13
- Erzeugungsoperator, 28
- essentielles Spektrum, 39

- Feinstruktur des Wasserstoffatoms, 50, 55
- Fermionen, 47
- Fouriertransformation, 8
- Friedrichs-Erweiterung, 27
- Funktion eines Operators, 11
- Funktionalkalkül, 11

- halbbeschränkt, 26
- Hamilton-Funktion
 - relativistische, 51
- Hamilton-Operator
 - des anormalen Zeeman-Effekts, 49
 - des freien Teilchens, 32
 - des freien Teilchens (relativistisch), 52
 - des normalen Zeeman-Effekts, 49
 - des relativistischen Wasserstoffatoms, 54
 - des Wasserstoffatoms mit Spin, 47
 - des Wasserstoffatoms ohne Spin, 37
- Hamilton-Prinzip, 1
- Hamiltonoperator, 23
- Hamiltonsche Bewegungsgleichungen, 1
- Harmonischer Oszillator
 - klassisch, 1
- harmonischer Oszillator, 25
- Hauptquantenzahl, 50
- Heisenbergsche Unschärferelation, 14
- Hermite-Polynome, 30
- Hilbertraum, 3

- Impulse
 - generalisierte, 1
- Impulsobservable, 7
- Impulsoperator, 7
- Integral bzgl. Spektralmaß, 10
- Interpretationsregeln, 26
- isometrisch, 8

- kanonische Vertauschungsrelationen, 15, 22
- Kommutatorrelationen
 - von Drehimpulsoperatoren, 44
- kompatibel, 34
- Koordinaten
 - generalisierte, 1
- Kriterium von Kato, 35

- Lagrangefunktion, 1
- Leiteroperatoren, 45
- Lorentztransformation, 52

- Maß
 - projektorwertiges, 10
- magnetische Quantenzahl, 50
- Nebenquantenzahl, 50
- normaler Operator, 6
- Observable, 6
 - kompatible, 34

- vertauschbare, 34
- Operator
 - Dirac-, 52
 - halbbeschränkter, 26
 - linearer, 4
 - positiver, 26
 - Spin, 44
 - stetiger linearer, 4
 - strikt positiver, 28
- orthogonal, 3
- orthogonales Komplement, 5
- orthonormal, 3
- Ortsobservable, 7
- Ortsoperator, 7
- Pauli-Matrizen, 44
- Plancksches Wirkungsquantum, 8
- Poincaré-Ungleichung
 - Dritte, 36
- Positron, 54
- Prähilbertraum, 3
- Projektion
 - orthogonale, 9
- PV-Maß, 10
- quantenmechanisches System, 6
- Quantenzahlen, 50
- Quantisierungsregel, 24
- Resolventenmenge, 5
- Rydberg-Konstante, 42
- Satz
 - Satz
 - Dritte Poincaré-Ungleichung, 36
 - Kriterium für Kompatibilität, 34
 - Kriterium von Kato, 35
 - Spektralabbildungssatz, 53
 - von Stone, 20
- schnell fallende Funktion, 28
- Schrödingergleichung, 23
- schwache Ableitung, 8
- Schwartz-Raum, 28
- selbstadjungiert, 6
- separabel, 3
- Skalarprodukt, 3
- Sobolevraum, 8, 32
- Sommerfeldsche Feinstrukturkonstante, 55
- Spektralabbildungssatz, 53
- Spektralmaß, 10
- Spektralsatz, 11
- Spektrum, 5
 - essentielles, 39
 - kontinuierliches, 5
 - Punkt-, 5
 - residuelles, 5
 - Rest-, 5
- Spin, 47
- Spin-Bahn-Kopplung, 49
- Spin-Operatoren, 44
- Spinquantenzahl, 47, 50
- Spinvektoroperator, 44
- Standardabweichung, 13
- starkstetig, 17
- starkstetige unitäre Gruppe, 17
- stationär, 23
- stochastische Interpretation, 13
- Stufenfunktion, 10
- Stufenoperatoren, 45
- symmetrischer Operator, 6
- Teilchenzahloperator, 28
- unitär, 6
- unitäre Gruppe, 17
- Unschärfe, 13
- Unschärferelation, 14
- Varianz, 13
- Vernichtungsoperator, 28
- vertauschbar, 34
- Vertauschungsrelation
 - nach Heisenberg, 15
 - nach Weyl, 22
- vollständig, 3
- wesentlich selbstadjungiert, 6
- Weylsche Folge, 39
- Wirkungsfunktional, 1

Zeeman-Effekt
 anormaler, 48
 normaler, 48
Zustand
 reiner, 6