

## Vorlesung: Mathematik 4 für Physiker

### Bemerkungen zu den mathematischen Grundlagen der Quantenmechanik

Eine Hälfte dieses Semesters ist dem Gebiet "Funktionalanalysis" gewidmet. Genauer gesagt geht es um eine Einführung grundlegender Begriffe aus der Theorie der Operatoren im Hilbertraum. Damit erhalten Sie eine solide Basis, um weiterführende Literatur zu den mathematischen Grundlagen der Quantenmechanik /-physik studieren zu können. Aus Zeitgründen werden wir zu dieser Thematik nur sehr wenig behandeln können. Die nachfolgenden Ausführungen sollen Ihnen helfen, einige Schwierigkeiten, die naturgemäß beim Erarbeiten der Quantenmechanik (QM) auftreten, besser einordnen und vielleicht überwinden zu können. Ich werde nach einigen allgemeinen Bemerkungen exemplarisch einige typische Probleme benennen, die auftauchen, wenn man die physikalische Literatur zur QM danach befragt, wie streng dort mit den Begriffen aus mathematischer Sicht umgegangen wird. Dabei geht es nicht darum, einen Gegensatz zwischen Mathematik und Physik hervorzuheben, da in der Physik ein etwas pragmatischer Umgang mit der Mathematik ja geboten ist. Außerdem tauchen die genannten Probleme in der Regel nicht bei konkreten Aufgabenstellungen auf (wie z.B. der Behandlung der Wasserstoffatoms, des harmonischen Oszillators usw.), da sich die Lösung dieser Aufgabenstellungen meist auf das Lösen von Differentialgleichungen konzentriert. Und das ist für die Standardaufgaben gut verstanden und dargestellt. Die Probleme tauchen erfahrungsgemäß auf, wenn man den mathematischen Apparat der QM behandelt und nach der genaueren Natur der dort auftauchenden (mathematischen) Objekte fragt. Einige kritische Anmerkungen werden sich nicht vermeiden lassen.

Um ein physikalisches System zu beschreiben, braucht man im wesentlichen vier „Zutaten“: **Zustände**, die das System anzunehmen in der Lage ist, **Observable**, die für das System relevant sind, **die Zeitentwicklung** des Systems und ggf. **Symmetrien**, die für das System charakteristisch sind. Eine mathematische Theorie, die für die Beschreibung adäquat sein soll, muss festlegen, welche mathematischen Objekte, Strukturen usw. diesen obigen Begriffen entsprechen sollen. Das ist dann schon nahezu ein axiomatischer Zugang zu der jeweiligen physikalischen Theorie. (Sie kennen das schon aus der Mechanik, wo der Hamilton- bzw. Lagrangeformalismus die Schlagworte sind, die diese Situation beschreiben, aus der Elektrodynamik, wo die Maxwell'schen Gleichungen diesen axiomatischen Grundgedanken widerspiegeln). Will man auf der Basis weniger Grundannahmen dann die Theorie mathematisch streng entwickeln **und** die in der Physik längst bekannten Resultate wenigstens wiedergewinnen, dann wird man schnell an Grenzen stoßen: vom Aufwand her, von den innermathematischen Schwierigkeiten her usw. Von diesen Schwierigkeiten ist das gesamte Gebiet der Mathematischen Physik „durchsetzt“. Wie weit man auf diesem Wege kommen kann und welcher mathematische Anspruch sich dahinter verbirgt,

wird sehr schön in der Lehrbuchreihe:

*W. Thirring: Lehrbuch der Mathematischen Physik (Bände 1 - 4)*

widergespiegelt.

Der dort beschriebene Zugang zu Mechanik, Feldtheorie, QM und Quantenstatistik ersetzt - auch im Verständnis von Thirring - keineswegs die zugehörigen Theorie-Vorlesungen! Im Gegenteil! Diese Bücher sollte man nach diesen Vorlesungen studieren - wenn man sich denn für Mathematische Physik interessiert.

So viel zur Einleitung!

## 1. Zustände

Die QM lebt im Hilbertraum. Die Zustände werden durch Vektoren aus dem Hilbertraum repräsentiert. Das ist noch sehr ungenau. Etwas genauer: Zustände sind die eindimensionalen Unterräume eines separablen, komplexen, unendlichdimensionalen Hilbertraumes. Hierbei wird zum Ausdruck gebracht, daß für einen Hilbertraum  $\mathcal{H}$  ein  $\varphi \in \mathcal{H}$  denselben Zustand beschreibt wie  $c\varphi, c \in \mathbb{C}$ . Da man die eindimensionalen Unterräume von  $\mathcal{H}$  darstellen kann als  $\{c\varphi : \varphi \in \mathcal{H}, \|\varphi\| = 1, c \in \mathbb{C}\}$  wird häufig gesagt: Die Zustände eines quantenmechanischen Systems entsprechen den Einheitsvektoren von  $\mathcal{H}$ .

Das ist für viele Belange immer noch nicht präzise genug. Man hat es nämlich mit verschiedenen Arten von Zuständen (aus physikalischer Sicht zunächst) zu tun: mit „reinen“ und „gemischten“ Zuständen. Es sind gerade die reinen Zustände, die durch die Einheitsvektoren beschrieben werden. Die gemischten Zustände werden durch die (vor allem in der Physik sog.) Dichtematrizen beschrieben. Dazu wurde einiges in der Vorlesung ausgeführt. (vgl. auch Fischer/Kaul, Band 2)

Bemerkungen:

i) Da alle separablen Hilberträume zueinander isometrisch isomorph sind, wären alle diese Hilberträume auch gleichberechtigt, um ein konkretes quantenmechanisches Problem zu lösen oder die Axiomatik weiter zu beschreiben. Letzteres ist in der Tat der Fall, ersteres wäre törricht! Man sucht sich immer einen der konkreten Problematik angepassten Hilbertraum. Das ist in der Regel ein geeigneter  $L^2(\mathbb{R}^n)$  (Raum der quadratisch integrierbaren Funktionen über dem  $\mathbb{R}^n$  - vergleiche aber die in der Vorlesung zu diesem Raum/Sprachgebrauch gemachten Bemerkungen). Funktionenräume kommen deshalb auf natürliche Weise ins Spiel, weil man den Schrödingerschen Zugang zur Quantenmechanik favorisiert. Dort liegt die Schrödingergleichung zur Beschreibung der Dynamik zugrunde - und das ist nun mal eine Differentialgleichung. Im Heisenbergschen Zugang („Matrizenmechanik“) wurde der Raum  $\ell^2$  favorisiert. Das hat sich aber nicht durchgesetzt.

ii) Die Normierungsvorschrift bei den Zuständen kommt der Wahrscheinlichkeitsdeutung in der Quantenmechanik entgegen (s.u.).

### Bemerkungen zur bra - ket-Notation:

Diese von Dirac eingeführte Schreibweise hat den Vorteil, daß sie wie ein Kalkül „automatisch“ arbeitet. Einige Anmerkungen zur Interpretation. Die ket-Vektoren  $|\varphi\rangle$  sind nichts anderes als unsere üblichen Hilbertraumvektoren  $\varphi$ . Bei der Erklärung der bra-Vektoren  $\langle\psi|$  gibt es vielerlei Erklärungsmuster. Am verständlichsten ist es vielleicht so: Die bra-Vektoren sind eigentlich die linearen stetigen Funktionale auf  $\mathcal{H}$ , d.h. die Elemente aus  $\mathcal{H}'$ . Nach dem Satz von Riesz wissen wir: jedem  $f \in \mathcal{H}'$  entspricht ein eindeutiges  $\psi \in \mathcal{H}$  mit  $f(\varphi) = \langle\psi, \varphi\rangle$  für alle  $\varphi \in \mathcal{H}$ . Diese Zuordnung  $f \leftrightarrow \psi$  wird unter der Bezeichnung  $\langle\psi|$  verstanden. Dann bedeutet  $\langle\psi|\varphi\rangle$

nichts anderes als  $\langle \psi, \varphi \rangle$ . Wäre es nur das, hätte Dirac diesen Kalkül nicht entwickelt! Man schreibt  $|\varphi\rangle\langle\psi|$  für den eindimensionalen Operator  $F$ , der so wirkt:  $F\chi = (|\varphi\rangle\langle\psi|)(\chi) = \langle \psi, \chi \rangle \varphi$ . In diesem Sinne hat man für eine ONB  $(\varphi_i)$  offenbar als Vollständigkeitsrelation:

$$\sum_i |\varphi_i\rangle\langle\varphi_i| = I.$$

Dieser Kalkül wird nun aber auch angewendet, wenn gar keine diskreten Indizes vorliegen, also auch auf die sog. verallgemeinerten Eigenvektoren (s.3.). Und dann sieht man auch so etwas wie:

$$\sum_x |x\rangle\langle x| = I$$

Ferner wird Ausdrücken wie  $\langle \varphi|A|\psi \rangle$  ein Sinn gegeben und zwar nicht nur als:  $\langle \varphi|A|\psi \rangle = \langle \varphi, A\psi \rangle$ . Es wird auch die linksseitige Operation von  $A$  auf den bra-Vektor  $\langle \varphi|$  erklärt (naheliegender als  $A^*\varphi$ , manchmal aber auch über den sog. dualen Operator  $A'$ . Das soll hier nicht weiter diskutiert werden.

Sehr häufig wird dieser Kalkül (implizit) auch so verstanden, dass die bra-Vektoren nicht zu  $\mathcal{H}'$  gehören sondern dass etwa die Konstellation betrachtet wird: bra-Vektoren aus  $\mathcal{S}'$ , dann ket-Vektoren nur aus  $\mathcal{S}$  usw. Hier kommt der Funktionalcharakter der bra-Vektoren besonders stark zum Tragen!

## 2. Observable

Die Observablen eines quantenmechanischen Systems werden durch selbstadjungierte Operatoren in  $\mathcal{H}$  repräsentiert.

In der physikalischen Literatur unterscheidet man das sehr häufig in der Symbolik recht präzise:  $A$  ist die Observable,  $\hat{A}$  ist der sie repräsentierende Operator. Wir benutzen hier nur das Symbol  $A$ .

Die meisten Physikbücher haben aber mit dem Sprachgebrauch bezüglich der Operatoren und der begrifflichen Klarheit Probleme.

i) Es wird sehr selten zwischen beschränkten und unbeschränkten Operatoren unterschieden. Die meisten Operatoren der QM sind aber unbeschränkt! Zu jedem Operator  $A$  gehört zu seiner Charakterisierung unbedingt sein Definitionsbereich  $\mathcal{D}(A)$ .

Es reicht nicht, den Operator durch die formale Wirkungsvorschrift ( $A = id/dx$  oder  $A = \Delta$ ) anzugeben. Definitionsbereiche werden in physikalischer Literatur in der Regel nie diskutiert.

ii) Es existiert ein ziemlicher Sprachwirrwarr in Bezug auf die Begriffe „hermitesch“, „symmetrisch“, „selbstadjungiert“. Während hermitesch und symmetrisch mitunter auch in der mathematischen Literatur synonym benutzt wird, muss man (bei unbeschränkten Operatoren) streng zwischen symmetrisch und selbstadjungiert unterscheiden.

Ein Operator  $A$  mit Definitionsbereich  $\mathcal{D}(A) \subset \mathcal{H}$  heißt:

*hermitesch*, wenn

$$\langle \varphi, A\psi \rangle = \langle A\varphi, \psi \rangle \quad \forall \varphi, \psi \in \mathcal{D}(A). \quad (1)$$

*symmetrisch*, wenn  $\mathcal{D}(A)$  dicht in  $\mathcal{H}$  und (1) gilt. Das bedeutet dann:  $A \subset A^*$ .

*selbstadjungiert*, wenn  $A = A^*$ .

Für beschränkte Operatoren, die bei uns immer auf ganz  $\mathcal{H}$  definiert sind, fallen

diese Begriffe natürlich zusammen. Das Problem besteht in der physikalischen Literatur meist darin, dass nicht genau definiert wird, was der adjungierte Operator  $A^*$  ist.

Im konkreten Fall kann es sehr schwer sein, die Selbstadjungiertheit eines Operators nachzuweisen.

Häufig kann man sich dadurch Erleichterung verschaffen, dass man nur *wesentlich selbstadjungierte* Operatoren betrachtet. Das sind solche  $A$ , für die  $\bar{A} = A^*$ , d.h. der Abschluß fällt mit dem adjungierten Operator zusammen. Man kann auch so sagen:  $A$  hat dann eine eindeutige selbstadjungierte Fortsetzung. Für viele in der QM auftretende Operatoren ist  $L^2$  der richtige Hilbertraum und der Schwartzraum  $\mathcal{S}$  ein günstiger Definitionsbereich (siehe auch unten bei verallgemeinerten Eigenvektoren).

Für selbstadjungierte Operatoren hat man solche wichtigen Aussagen wie: das Spektrum ist stets reell und solche Operatoren haben eine Spektralzerlegung:

$$A\varphi = \int_{-\infty}^{\infty} \lambda dE_{\lambda}\varphi, \quad \text{für alle } \varphi \in \mathcal{D}(A) = \left\{ \varphi \in \mathcal{H} : \int_{-\infty}^{\infty} \lambda^2 d\|E_{\lambda}\varphi\|^2 < \infty \right\} \quad (2)$$

### Zusammenhang von Observablen und Zuständen; wahrscheinlichkeitstheoretischer Aspekt:

Sei  $\varphi \in \mathcal{H}$  ein Zustand,  $A$  eine Observable (genauer:  $A$  der selbstadjungierte Operator, der eine Observable repräsentiert) mit  $\varphi \in \mathcal{D}(A)$ . Dann nennt man  $\langle \varphi, A\varphi \rangle$  den Mittelwert (manchmal: Erwartungswert) der Messung der Observablen des Systems im Zustand  $\varphi$  (und weil  $A$  selbstadjungiert, tauchen auch nur reelle Messwerte auf!). Mittels der Spektralschar ( $E_{\lambda}$ ) bekommt man folgende Interpretation:

Die Wahrscheinlichkeit dafür, dass der Messwert der Observablen zu  $A$  im Zustand  $\varphi$  im Intervall  $[\lambda, \mu)$  liegt, ist

$$\|(E_{\mu} - E_{\lambda})\varphi\|^2. \quad (3)$$

Will man andere Typen von Intervallen (offen, abgeschlossen,...) betrachten, muss man (3) leicht variieren. Das hängt mit der einseitigen Stetigkeit der Spektralschar zusammen.

### 3. Spektrum und Entwicklung nach Eigenfunktionen

Für selbstadjungierte Operatoren  $A$  ist das Spektrum reell und zerfällt in zwei (disjunkte) Teile (von denen auch einer leer sein kann): das Punktspektrum  $\sigma_p(A)$  (das aus den Eigenwerten besteht) und das stetige Spektrum  $\sigma_c(A)$ . Bei allen Terminologien zum Spektrum überzeuge man sich davon, was der Autor darunter versteht, weil die Terminologie keineswegs einheitlich ist!

Wenn  $A$  ein auf  $\mathcal{D}(A)$  definierter selbstadjungierter Operator in  $\mathcal{H}$  ist, dann ist definitionsgemäß:

$$\lambda \in \sigma_p(A) \iff \text{es existiert ein } \varphi \in \mathcal{D}(A), \varphi \neq 0, A\varphi = \lambda\varphi.$$

Daher ist es gar keine Frage, dass man Eigenvektoren (auf Eins) normieren kann. Eigenvektoren zu verschiedenen Eigenwerten stehen orthogonal. Wenn man „Glück“ hat, dann gibt es zu einem gegebenen Operator  $A$  hinreichend viele Eigenvektoren, nämlich ein vollständiges System  $(\varphi_n)$ , eine ONB, von Eigenvektoren. Das bedeutet

dann: jedes  $\varphi \in \mathcal{H}$  hat eine Darstellung

$$\varphi = \sum \langle \varphi_n, \varphi \rangle \varphi_n, \quad (4)$$

und für die  $\varphi \in \mathcal{D}(A)$  gilt:

$$A\varphi = \sum \lambda_n \langle \varphi_n, \varphi \rangle \varphi_n.$$

Für Punkte aus dem stetigen Spektrum liegt die Sache ganz anders! Die typischen Beispiele sind:  $A = -id/dx$  (Impulsoperator) und  $A = Q$  (Multiplikation mit  $x$  im  $L^2(\mathbb{R})$ , Ortsoperator). Natürlich fehlt hier noch die Angabe der jeweiligen Definitionsbereiche. Der Einfachheit halber und weil es den folgenden Betrachtungen entgegenkommt, nehmen wir als Definitionsbereiche für beide Operatoren den Schwartzraum  $\mathcal{S} = \mathcal{S}(\mathbb{R})$ . Beide Operatoren sind auf  $\mathcal{S}$  wesentlich selbstadjungiert (man verliert also auch bei Betrachtung des Spektrums keine Information bezüglich ihres Abschlusses, den selbstadjungierten Operatoren - Impuls- und Ortsoperator) und beide lassen  $\mathcal{S}$  invariant. Das Spektrum ist jeweils die gesamte reelle Achse.

Formale Betrachtung der Eigenwertgleichung liefert:

$$-idf/dx = \lambda f \quad \Rightarrow \quad f(x) = e^{i\lambda x}, \quad \forall \lambda \in \mathbb{R}.$$

Da  $e^{i\lambda x}$  natürlich nicht aus  $L^2(\mathbb{R})$  ist, ist  $\lambda$  kein Eigenwert, und  $e^{i\lambda x}$  auch keine zugehörige Eigenfunktion - obwohl es ja eine „richtige“ Funktion ist.

Beim Ortsoperator  $A = M_x$  wird es noch schlimmer: die Gleichung

$$M_x f = \lambda f, \quad \text{d.h. } xf(x) = \lambda f(x)$$

lässt sich für kein  $\lambda$  und für kein  $f \in L^2$  erfüllen.

In mehr oder minder erklärenden Worten wird jetzt  $\delta_\lambda$ , die an  $\lambda$  konzentrierte „Deltafunktion“ ins Spiel gebracht.

Der Sprachgebrauch für diese beiden Situationen ist nun mannigfaltig: man spricht von nicht-normierbaren Eigenfunktionen, verallgemeinerten Eigenfunktionen usw. Und mit diesen wird dann analog zu (4) gearbeitet, wobei man aus vielen Beziehungen, wo bei den Eigenwerten ein Summenzeichen steht, formal sinnigemäße Beziehungen mit dem Integralzeichen erhält. Manchmal wird auch das Symbol  $\sum$  benutzt. Die Situation ist delikat! Für zahlreiche Operatoren, zu denen die meisten der für die QM relevanten Operatoren gehören, lässt sich eine mathematisch exakte Theorie entwickeln, die auch den formal hingeschriebenen Relationen einen genauen Sinn gibt. Und das ist auch der Grund dafür, dass bei der formalen Handhabung dieser Beziehungen kaum Fehler passieren („weil es eben klappt“ .) Den strukturellen Hintergrund erfährt man dabei aber nicht. Wir deuten am Beispiel der beiden oben angegebenen Operatoren an, wo dieser allgemeine Hintergrund angesiedelt ist. Hier kommt uns das zugute, was wir früher zu Distributionen dargelegt haben.

Sei  $\mathcal{H} = L^2(\mathbb{R})$ ,  $A : \mathcal{D}(A) \rightarrow \mathcal{H}$  ein symmetrischer Operator mit  $\mathcal{S} \subset \mathcal{D}(A)$ . Die Distribution  $T \in \mathcal{S}'$ ,  $T \neq 0$  heißt *verallgemeinerte Eigenfunktion* von  $A$  zum Eigenwert  $\lambda \in \mathbb{R}$ , wenn für alle  $f \in \mathcal{S}$  gilt:

$$T(Af) = \lambda T(f)$$

Ein System  $(T_\lambda)_{\lambda \in \mathcal{I}}$  von verallgemeinerten Eigenfunktionen von  $A$  heißt *vollständig*, wenn

$$T_\lambda(f) = 0 \text{ für alle } \lambda \in \mathcal{I} \quad \Rightarrow \quad f = 0$$

Wir betrachten  $P = -id/dx$  auf dem Schwartzraum  $\mathcal{S}$ . Dann können die  $e^{i\lambda x} = f_\lambda(x)$  als Elemente von  $\mathcal{S}'$  aufgefasst werden. Genauer: wir haben Funktionale  $T_\lambda \in \mathcal{S}'$ , die so wirken sollen:  $T_\lambda(f) := \int_{\mathbb{R}} \overline{f_\lambda(x)} f(x) dx$  für alle  $f \in \mathcal{S}$ . Dann gilt (vgl. 3. Semester: Ableitung von Distributionen!) mit partieller Integration:

$$T_\lambda(Pf) = \int_{\mathbb{R}} i \overline{f'_\lambda(x)} f(x) dx = \int_{\mathbb{R}} \lambda \overline{f_\lambda(x)} f(x) dx = \lambda T_\lambda(f).$$

D.h. wir haben es tatsächlich mit verallgemeinerten Eigenfunktionen zu tun. Und wie folgt die Vollständigkeit? Sei also

$$0 = T_\lambda(f) = \int_{\mathbb{R}} e^{-i\lambda x} f(x) dx.$$

Das bedeutet aber gerade, dass  $F(f) = 0$ , wobei  $F$  (bis auf Faktor) die Fouriertransformation auf  $\mathcal{S}$  ist. Daraus folgt aber gewiss  $f = 0$ .

Und was bedeutet denn nun die Entwicklung nach diesen verallgemeinerten Eigenfunktionen? Wir möchten dann gern so etwas haben wie:

$$"f = \int_{\mathbb{R}} \langle f_\lambda, f \rangle f_\lambda d\lambda"$$

(wobei  $\mathbb{R}$  hier gerade  $\sigma(P)$  bedeutet!).

Man hat nur richtig zu interpretieren:  $\langle f_\lambda, f \rangle = T_\lambda(f)$ . Dann ergibt sich aber:

$$\int_{\mathbb{R}} T_\lambda(f) d\lambda = \int_{\mathbb{R}} \left[ \int_{\mathbb{R}} e^{-i\lambda x} f(x) \right] e^{i\lambda x} d\lambda$$

Aber die rechte Seite ist nichts anderes als (bis auf sich weghebende Faktoren):  $F^{-1}[F(f)] = f$ , wobei  $F^{-1}$  die inverse Fouriertransformation bezeichnet.

Betrachten wir noch den Ortsoperator  $Q$ :  $(Qf)(x) = xf(x)$ . Hier sollten die  $(\delta_y)_{y \in \mathbb{R}}$  ein vollständiges System verallgemeinerter Eigenvektoren bilden. Es ist  $\delta_y(Qf) = (Qf)(y) = yf(y) = y\delta_y(f)$ , also liegen tatsächlich verallgemeinerte Eigenvektoren vor. Die Vollständigkeit des Systems sieht man so:  $\delta_y(f) = f(y) = 0$  für alle  $y$  bedeutet gerade  $f = 0$ . Nun zur Entwicklung nach diesen verallgemeinerten Eigenvektoren! Formal geht das so: sei  $f \in \mathcal{S}$  (oder eventuell sogar in  $L^2(\mathbb{R})$ ). Dann soll so etwas gelten wie:

$$f = \int_{\mathbb{R}} \langle \delta_y, f \rangle \delta_y dy \quad (*)$$

Auch hier hat man richtig zu interpretieren!  $\langle \delta_y, f \rangle = \delta_y(f) = f(y)$ . Dann wird aus (\*):

$$f = \int_{\mathbb{R}} \delta_y(f) \delta_y dy = \int_{\mathbb{R}} f(y) \delta_y dy \quad (**)$$

Diese Gleichung muß man nun auch im distributionellen Sinne interpretieren, d.h.  $f$  steht für die reguläre Distribution  $T_f$ . Dann stimmt es, wenn man das Integral richtig interpretiert/definiert:

$$\left( \int_{\mathbb{R}} f(y) \delta_y dy \right)(g) = \int_{\mathbb{R}} f(y) \delta_y(g) dy = \int_{\mathbb{R}} f(y) g(y) dy = T_f(g)$$

für alle  $g \in \mathcal{S}$ .

Will man beweisen, dass beliebige selbstadjungierte Operatoren ein vollständiges System von verallgemeinerten Eigenvektoren haben, dann muss man tief in das mathematische Arsenal greifen!

#### 4. Hamiltonoperator, Zeitentwicklung quantenmechanischer Systeme

Zu einem quantenmechanischen System gehört ein eindeutig bestimmter selbstadjungierter Operator  $H$ , der Hamiltonoperator, der (u.a.) die Dynamik des Systems beschreibt.

Wenn wir das **Schrödingerbild** zugrunde legen, dann wird die Dynamik oder Zeitentwicklung von Zuständen beschrieben. Dieser Beschreibung liegt die Schrödingergleichung zugrunde:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \varphi = H\varphi, \quad \varphi(0) = \varphi_0 \quad (5)$$

wobei  $\hbar = h/2\pi$ ,  $h$  - das Plancksche Wirkungsquantum. Im folgenden werden wir  $\hbar$  immer unterdrücken. Die Lösung von (5) lautet so:

$$\varphi(t) = e^{-iHt} \varphi_0. \quad (6)$$

Was soll  $e^{-iHt}$  bedeuten? Wenn  $H$  ein beschränkter selbstadjungierter Operator wäre, dann könnte man setzen:

$$e^{-iHt} := \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-it)^n H^n}{n!}, \quad (7)$$

also Ausnutzung der Reihe für die Exponentialfunktion! Die Konvergenz wäre dann die Norm-Konvergenz in  $\mathcal{B}(\mathcal{H})$ .

Aber die Hamiltonoperatoren der QM sind unbeschränkte Operatoren! Die sauberste Definition von  $e^{-iHt}$  geschieht dann über den sog. Funktionalkalkül auf der Basis der Spektralzerlegung von  $H$ :

$$H\varphi = \int_{-\infty}^{\infty} \lambda dE_{\lambda} \varphi, \quad e^{-iHt} \psi = \int_{-\infty}^{\infty} e^{-i\lambda t} dE_{\lambda} \psi \quad (8)$$

Hierbei ist  $\varphi \in \mathcal{D}(H)$ ,  $\psi \in \mathcal{H}$ .

Man kann - mit zusätzlichen Begriffsbildungen (den sog. analytischen Vektoren) - auch (7) einen Sinn geben:

$$e^{-iHt} \varphi := \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-it)^n H^n \varphi}{n!} \quad (9)$$

Für alle (sog. analytischen) Vektoren  $\varphi$  aus einer dichten Menge  $\mathcal{D} \subset \mathcal{H}$ . Aber günstiger ist auf alle Fälle (8).

Hat man erst einmal  $U(t) := e^{-iHt}$  korrekt definiert, dann zeigt man folgende fundamentalen Eigenschaften:

- i) jedes  $U(t)$  ist ein unitärer Operator (das garantiert, dass ein Zustand  $\varphi_0$  wieder in einen **Zustand**  $\varphi(t)$  übergeht (vgl. (6)).
- ii)  $U(t)_{t \in \mathbb{R}}$  ist eine einparametrische, stark stetige Gruppe unitärer Operatoren mit dem Erzeuger  $-iH$ , d.h.

- i)  $U(s+t) = U(s)U(t) = U(t)U(s), U(-t) = U(t)^{-1}, U(0) = I$  (einparametrische Gruppe unitärer Operatoren).
- ii)  $\lim_{t \rightarrow 0} U(t)\varphi = \varphi$  für alle  $\varphi \in \mathcal{H}$  (starke Stetigkeit).
- iii)  $-iH$  ist der eindeutig bestimmte Operator mit  $e^{-iHt} = U(t)$ .

Im übrigen gilt auch eine gewisse Umkehrung dieses Sachverhaltes:

**Satz von Stone:** Jede stark stetige einparametrische unitäre Gruppe  $V(t)$  wird als Exponentialfunktion gegeben (zum Beweis ist schon einiger Aufwand nötig).

Hauptidee:

$$-iH\varphi := \lim_{h \rightarrow 0} \frac{(V(h) - V(0))\varphi}{h}$$

für alle  $\varphi$ , für die dieser Limes existiert (das ist dann sogar ein dichter Unterraum),  $H$  ist selbstadjungiert.

Wir können nun auch die Zeitentwicklung von Observablen (**Heisenbergbild**) beschreiben. Sieht man einmal von Fragen der Definitionsbereiche ab, so gilt:

$$A(t) = e^{iHt}A(0)e^{-iHt} = e^{iHt}A_0e^{-iHt} \quad (10)$$

mit den offensichtlichen Bedeutungen:  $A_0 = A(0) =$  Observable zum Zeitpunkt Null,  $A(t) =$  Observable zum Zeitpunkt  $t$ . Zwischen diesen beiden Bildern besteht u.a. folgender Zusammenhang:

$$\langle \varphi_0, A(t)\varphi_0 \rangle = \langle \varphi_0, e^{iHt}A_0e^{-iHt}\varphi_0 \rangle = \langle e^{-iHt}\varphi_0, A_0e^{-iHt}\varphi_0 \rangle = \langle \varphi(t), A_0\varphi(t) \rangle \quad (11)$$

In Worten bedeutet (11): Der Erwartungswert der Messung der Observablen  $A$  zum Zeitpunkt  $t$  im Zustand zum Zeitpunkt 0 = Erwartungswert der Messung der Observablen zum Zeitpunkt 0 im Zustand zum Zeitpunkt  $t$ .

## 5. Kurzbemerkung zur Zusammensetzung physikalischer Systeme

Häufig muß man folgende Situation mathematisch modellieren: Gegeben seien zwei physikalische Systeme  $S_1, S_2$ , modelliert in  $\mathcal{H}_1, \mathcal{H}_2$ . Diese beiden Systeme sollen zu einem Gesamtsystem  $S$  zusammengesetzt werden. Wo "lebt"  $S$ ? Der richtige mathematische Kontext ist der des Tensorproduktes!  $S$  wird in  $\mathcal{H} := \mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2$  (Tensorprodukt von  $\mathcal{H}_1$  und  $\mathcal{H}_2$ ) modelliert. Dieser Begriff wird in nahezu keinem Buch über QM benutzt. Man umgeht ihn auf folgende Weise (die dann allerdings viel "Reden" benötigt). Der Standardfall ist ja etwa:  $\mathcal{H}_1 = L^2(\mathbb{R}^m), \mathcal{H}_2 = L^2(\mathbb{R}^n)$ . Dann kann man beweisen, dass  $\mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2$  isomorph zu  $L^2(\mathbb{R}^m \times \mathbb{R}^n) = L^2(\mathbb{R}^{m+n})$  ist. Kleinste Bausteine dieses Tensorproduktes sind die Funktionen  $f \otimes g$  mit  $(f \otimes g)(x, y) = f(x)g(y)$ ,  $x \in \mathbb{R}^m, y \in \mathbb{R}^n$ . Dann muss man das Tensorprodukt von Observablen, Zuständen (einschließlich Dichteoperatoren) erklären und auch beschreiben, wie man  $\mathcal{S}_i, i = 1, 2$  als Teilsystem in  $S$  wiederfindet usw.