# 5. Abstrakte Formulierung der QM im Hilbert-Raum

## 5.1 Motivation

Fragen

(i) Welche mathematische Struktur liegt der Orts- und der Impulsdarstellung $\psi(\underline{r},t)$ bzw. $\phi(\underline{p},t)$ zugrunde?

Existieren weitere Darstellungen der QM?

(ii) Zuordnung klassische Observable $\leftrightarrow$ linearer Operator gemäß Korrespondenzprinzip

$$\underline{Q}(\underline{p},\underline{r}) \rightarrow \begin{cases} \hat{\underline{Q}} = \underline{Q}(-i\hbar\underline{\nabla},\underline{r}) \leftrightarrow \psi(\underline{r},t) \\ \hat{\underline{Q}} = \underline{Q}(\underline{p},i\hbar\underline{\nabla}_{\underline{p}}) \leftrightarrow \phi(\underline{p},t) \end{cases} .$$

Haben überhaupt alle qm Größen ein klassisches Analogon?

$\rightarrow$ Spin

$\rightarrow$ Parität

## 5.2 Linearer Vektorraum (VR) $\mathcal{F}$

Eigenschaften:

• **Abgeschlossenheit**: Für zwei Vektoren $\underline{x}$, $\underline{y}$ sind Addition und Multiplikation mit reellen Zahlen $\alpha$ und $\beta$ definiert.

Sind $\underline{x}, \underline{y} \in \mathcal{F}$, so ist auch $\underline{z} = \alpha\, x + \beta\, y \in \mathcal{F}$. (5.1)

• **Skalarprodukt** definiert als Vorschrift, die zwei Vektoren eine reelle Zahl zuordnet.

Notation: $\underline{x} \cdot \underline{y}$ (5.2)

Eigenschaften: $\underline{x} \cdot \underline{y} = \underline{y} \cdot \underline{x}$ , $\underline{x} \cdot \underline{x} \geq 0$ , $\underline{z} \cdot (\alpha \underline{x} + \beta \underline{y}) = \alpha\, \underline{z} \cdot \underline{x} + \beta\, \underline{z} \cdot \underline{y}$, $\alpha$, $\beta$ - reell. (5.3)

Man nennt $(\underline{x} \cdot \underline{x})^{1/2} \rightarrow$ Norm des Vektors $\underline{x}$ ,

$\underline{x}$ und $\underline{y}$ orthogonal, wenn $\underline{x} \cdot \underline{y} = 0$ für $\underline{x} \neq 0$, $\underline{y} \neq 0$ .

• **Basis und Vollständigkeit**: Es existieren Sätze von Vektoren $\{\underline{e}_i\}$, die orthonormiert und vollständig sind: $\underline{e}_i \cdot \underline{e}_k = \delta_{ik}$, i = 1, …, N → **Basis**. **Vollständigkeit** bedeutet: Jeder $\underline{x} \in \mathcal{F}$ ist

als Linearkombination $\underline{x} = \sum_{i=1}^{N} c_i\, \underline{e}_i$ , $c_i = \underline{x} \cdot \underline{e}_i$ (5.4)

der Basisvektoren darstellbar, wobei die Entwicklungskoeffizienten $c_i$ die Skalarprodukte aus $\underline{x}$ und $\underline{e}_i$ sind.

Der Spaltenvektor $\underline{x} = \begin{pmatrix} c_1 \\ \therefore \\ c_N \end{pmatrix}$ aus den Entwicklungskoeffizienten wird als Darstellung des

Vektors $\underline{x} \in \mathcal{F}$ zur Basis $\{\underline{e}_i\}$ aufgefasst. In Abhängigkeit von der Wahl der Basis sind offensichtlich unterschiedliche, äquivalente Darstellungen von $\underline{x} \in \mathcal{F}$ möglich.

Welche Objekte erfüllen die Axiome des linearen VR?

■ **Vektorpfeile im dreidimensionalen Raum (N = 3)** (vgl. MMPh, Kap. )

(5.1): Vektoraddition (→ Aneinanderreihung zweier Pfeile, Kräfteparallelogramm) und Multiplikation mit einer reellen Zahl erklärt.

(5.2): Skalarprodukt (→ Länge eines Pfeils multipliziert mit der Länge der Projektion des anderen Pfeils erklärt. Eigenschaften (5.3) erfüllt.

(5.4): Basis-/Einheitsvektoren $\underline{e}_x$, $\underline{e}_y$ und $\underline{e}_z$ bilden vollständig orthonormierte Basis:

$$\underline{r} = x\,\underline{e}_x + y\,\underline{e}_y + z\,\underline{e}_z = \sum_{i=1}^{3} x_i\,\underline{e}_i = x_i\,\underline{e}_i\,, \quad \underline{r} = \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} = (x, y, z)^T = \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix} = (x_1, x_2, x_3)^T$$

Skalarprodukt: $\underline{a} \cdot \underline{b} = \sum_{i=1}^{3} a_i\, b_i = a_i b_i$ (Summenkonvention)

■ **Die in [0, L] stetigen reellen Funktionen f(x) mit f(0) = f(L) = 0.**

(5.1): Mit f(x) und g(x) ist auch $\alpha$ f(x) + $\beta$ g(x) eine solche Funktion.

(5.2): Ein entsprechend der Vorschrift

$$\underset{\text{Notation}}{(f, g)} := \int_0^L dx\, f(x)\, g(x) \tag{5.2'}$$

definiertes Skalarprodukt alle unter (5.3) geforderten Eigenschaften.

(5.4): <u>Mögliche</u> Basis<u>funktionen</u>:

$$\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(\frac{n\pi x}{L}\right), \quad n = 1, 2, 3, \ldots \text{ mit } \left(\psi_n(x), \psi_m(x)\right) = \delta_{nm} \text{ . (ZEIGEN!)}$$

Die Vollständigkeit, d.h., die Entwickelbarkeit einer beliebigen f(x) nach $\psi_n(x)$ gemäß

$$f(x) = \sum_{n=1}^{\overset{\downarrow}{\infty}} c_n\, \psi_n(x) \quad \text{mit} \quad c_n = (\psi_n, f) = \int_0^L dx\, f(x)\, \psi_n(x)$$

folgt aus der Theorie der Fourier-Reihen oder aus der Vollständigkeit der Eigenfunktionen des selbstadjungierten Hamilton-Operators (siehe Kap. 5.5) für die 1D Bewegung eines qmT im unendlich tiefen Potenzialtopf, dessen WF $\psi_n(x)$ oben als Basis benutzt werden.

**FAZIT:** Mit dem unter (5.2') definiertem Skalarprodukt bilden stetige, reelle Funktionen mit Definitionsbereich [0, L] und f(0) = f(L) = 0 einen linearen VR, allerdings von u.U. unendlicher Dimension.
WF eines qm Systems können als Elemente eines linearen VR mit geeignet definiertem Skalarprodukt aufgefasst und wenn orthonormiert und vollständig als Basis verwendet werden.

Frage: Wie gehen wir damit um, dass die WF im allgemeinen komplex sein können?

## 5.3 Hilbert-Raum. Dirac-Notation

Wir führen folgende modifizierte Definition des Skalarprodukts für komplexwertige (Wellen)Funktionen $\phi(\underline{x})$ und $\psi(\underline{x})$ mehrerer unabhängiger Variabler $\underline{x}$ ein:

$$(\phi, \psi) := \int d^f x\ \phi^*(\underline{x})\, \psi(\underline{x}) \quad , \quad \underline{x} = (x_1, x_2, ..., x_f) \qquad (5.2'')$$

Eigenschaften:

(i) $(\phi, \psi) = (\phi, \psi)^*$

denn $(\phi, \psi) = \int d^f x\ \phi^*(\underline{x})\, \psi(\underline{x}) = \left(\int d^f x\ \phi(\underline{x})\, \psi^*(\underline{x})\right)^* = \left(\int d^f x\ \psi^*(\underline{x})\, \phi(\underline{x})\right)^* = (\psi, \phi)^*$.

(ii) $(\psi, \psi) \geq 0$ (i.a. haben wir orthonormierte WF mit $(\psi, \psi) = 1$ )

(iii) $(\phi, \alpha\, \psi_1 + \beta\, \psi_2) = \alpha\, (\phi, \psi_1) + \beta\, (\phi, \psi_2)$ → linear bzgl. des hinteren Faktors

$(\alpha\, \phi_1 + \beta\, \phi_2, \psi) = \alpha^*\, (\phi_1, \psi) + \beta^*\, (\phi_2, \psi)$ → antilinear bzgl. des vorderen Faktors

wobei nun $\alpha$, $\beta$ komplex.

(iv) **Basis:** Es existiert mindestens ein vollständig orthonormiertes System (VONS) von Basisfunktionen $u_n(\underline{x})$ so dass

$$(u_n, u_m) = \delta_{nm} \quad \text{und} \quad \psi(\underline{x}) = \sum_{n=1}^{\infty} a_n u_n(\underline{x}) \quad \text{für beliebige } \psi \in \mathcal{H}. \tag{5.4''}$$

Der unendlich dimensionale lineare (→ Superpositionsprinzip) Vektorraum mit den Eigenschaften (i-iv), insbesondere dem Skalarprodukt (5.2'), heißt **Hilbert-Raum $\mathcal{H}$**.

- **Dirac-Notation**

Mit $\phi(\underline{x}) = \sum_{n=1}^{\infty} b_n u_n(\underline{x})$ folgt

$$(\psi, \phi) = \int d^f x \sum_{n=1}^{\infty} a_n^* u_n^*(\underline{x}) \sum_{m=1}^{\infty} b_m u_m(\underline{x}) = \sum_{n,m=1}^{\infty} a_n^* b_m \underbrace{\int d^f x \; u_n^*(\underline{x}) u_m(\underline{x})}_{\delta_{nm} \leftrightarrow \text{VONS}} = \sum_{n=1}^{\infty} a_n^* b_n \tag{5.5}$$

Zur Vereinfachung der Darstellung führte Dirac folgende kompakte Notation ein:

$|\psi\rangle$ → bezeichne die WF/den Zustandsvektor (ZV) im $\mathcal{H}$ <u>unabhängig von der Darstellung</u>.

Betrachte $\psi(\underline{x}) = \sum_{n=1}^{\infty} a_n u_n(\underline{x})$ und $\phi(\underline{x}) = \sum_{n=1}^{\infty} b_n u_n(\underline{x})$

$|\psi\rangle$ und $|\phi\rangle$ können in ihren Darstellungen zur Basis $\{u_n(x)\}$ als Spaltenvektoren (Matrizen) mit abzählbar unendlich vielen Elementen auf gefasst werden

$$\psi = \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ \therefore \end{pmatrix} =: \underline{\underline{a}} \quad \text{und} \quad \phi = \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \\ \therefore \end{pmatrix} =: \underline{\underline{b}} \; .$$

Dann ist

$$(\psi, \phi) = \sum_{n=1}^{\infty} a_n^* b_n = \underline{\underline{a}}^{*T} \cdot \underline{\underline{b}} = \underline{\underline{a}}^{+} \cdot \underline{\underline{b}}$$

Definieren wir mit

$$\langle\psi| \equiv |\psi\rangle^{+} \tag{5.6}$$

den für den zu $|\psi\rangle$ adjungierten ZV, können wir das Skalarprodukt darstellen als

$$(\psi,\phi) = \underline{\underline{a}}^{+} \cdot \underline{\underline{b}} = \langle\psi|\cdot|\phi\rangle \underset{\text{Dirac}}{=:} \langle\psi,\phi\rangle$$

Im Sinne von $\underset{\text{bracket}}{\langle\psi,\phi\rangle} = \underset{\text{bra}}{\langle\psi|}\underset{c}{\cdot}\underset{\text{ket}}{|\phi\rangle}$ spricht Dirac von Ket-Vektor, kurz Ket $|...\rangle$ und Bra-Vektor, kurz Bra $\langle...|$ .

Beachte: - $\langle\psi|^{+} = |\psi\rangle$ und $\langle\alpha\psi| = \alpha^{*}\langle\psi|$ , $\alpha$ komplexe Zahl

- $\langle\psi|\psi\rangle$ - Norm des Kets $|\psi\rangle$ , $|\psi\rangle\langle\psi|$ - Operator, Projektor (s.u.)

Bra-Vektoren sind Elemente des zu $\mathcal{H}$ dualen Raums $\mathcal{H}^*$ der linearen Funktionale (z.B. des Skalarprodukts). Das Skalarprodukt $\langle\psi,\phi\rangle$ bezeichnet die komplexe Zahl, die das lineare Funktional $\langle\psi|$ einem Ket $|\phi\rangle$ zuordnet.

■ Entwicklungssatz/Vollständigkeitsrelation $\psi(\underline{x}) = \sum_{n=1}^{\infty} a_n u_n(\underline{x})$ (5.4") in Dirac-Notation

$$|\psi\rangle = \sum_{n=1}^{\infty} a_n |n\rangle \quad \text{mit} \quad a_n = \langle n|\psi\rangle \quad \text{denn} \quad \langle n|n'\rangle = \delta_{nn'} \quad \text{wenn} \quad \{|n\rangle\} \text{ ein VONS.}$$

Daraus folgt $|\psi\rangle = \sum_{n=1}^{\infty} a_n |n\rangle = \sum_{n=1}^{\infty} |n\rangle\,\langle n|\psi\rangle = \sum_{n=1}^{\infty} |n\rangle\langle n|\,|\psi\rangle$ für alle $|\psi\rangle \in \mathcal{H}$, also

$$\hat{1} = \sum_{n=1}^{\infty} |n\rangle\langle n| \quad \text{1- Operator} \tag{5.7}$$

## 5.4 Operatoren im Hilbert-Raum.

Ein Operator $\hat{Q}$ ist eine Vorschrift, die jedem Ket $|\psi\rangle \in \mathcal{H}$ einen Ket

$$|\psi'\rangle = \hat{Q}\,|\psi\rangle := \left|\hat{Q}\,\psi\right\rangle \in \mathcal{H} \tag{5.8}$$

zuordnet. Die in der QM betrachteten Operatoren sind linear, deshalb gilt

$$|\psi'\rangle = \hat{Q}\big(\alpha|\phi\rangle + \beta\,|\psi\rangle\big) := \alpha\,\hat{Q}|\phi\rangle + \beta\hat{Q}|\psi\rangle \quad |\phi\rangle, |\psi\rangle \in \mathcal{H}\text{, } \alpha, \beta \text{ - komplexe Zahlen.} \tag{5.8'}$$

Einheits- und Nulloperator sind über $\hat{1}\,|\psi\rangle = |\psi\rangle$ bzw. $\hat{0}\,|\psi\rangle = |\psi\rangle$ für alle $|\psi\rangle \in \mathcal{H}$ definiert.

■ $x_i$ , $F(\underline{r},t)$ als Multiplikatoren; $\frac{\partial}{\partial x_i}$, $\frac{\partial}{\partial t}$, $\underline{\nabla}$ , $\Delta$ usw.

■ $\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\underline{\nabla}^2 + U(\underline{r},t)$ , $\underline{\hat{p}} = -i\hbar\underline{\nabla}$

Beachte: Der Ausdruck $\hat{Q}\,\langle\psi|$ ist nicht definiert, dagegen ist $\left\langle\hat{Q}\psi\right|$ der zum Ket $\left|\hat{Q}\psi\right\rangle$ gehörende Bra, also $\left\langle\hat{Q}\psi\right| = \left|\hat{Q}\psi\right\rangle^{+} = \big(\hat{Q}\,|\,\psi\rangle\big)^{+} = \langle\,\psi|\,\hat{Q}^{+}$ .

- **Matrizendarstellung von Operatoren**

Das Skalarprodukt $\langle\phi|\psi'\rangle = \left\langle\phi\middle|\hat{Q}\psi\right\rangle = \langle\phi|\hat{Q}|\psi\rangle$ ist eine komplexe Zahl. Bei Verwendung von Elementen eines VONS $\{|n\rangle\}$ in Bra und Ket werden

$$\langle n|\hat{Q}|n'\rangle \;\rightarrow\; \text{Matrixelemente des Operators } \hat{Q} \text{ zur Basis } \{|n\rangle\} \tag{5.9}$$

genannt. Wir erhalten die Matrizendarstellung des Operators $\hat{Q}$ im Raum diskreter oder kontinuierlicher Basiszustände $\{|n\rangle\}$

$$\hat{Q} \leftrightarrow \begin{pmatrix} Q_{11} & Q_{12} & \dots & Q_{1j} & \dots \\ Q_{21} & Q_{22} & \dots & Q_{2j} & \dots \\ \vdots & \vdots & & \vdots & \\ Q_{i1} & Q_{i2} & & Q_{ij} & \dots \\ \vdots & \vdots & & \vdots & \end{pmatrix}$$

$\rightarrow$ quadratische Matrix mit abzählbar (diskrete Basis) oder überabzählbar unendlich (kontinuierliche Basis) vielen Zeilen und Spalten.

Lineare Algebra: Ein linearer Operator mit diskretem Spektrum (endlich oder abzählbar unendlich viele Eigenwerte) kann als Matrix auf einem (endlich bzw. unendlich dimensionalen) Vektorraum dargestellt werden.

■ Matrizendarstellung von $|\psi'\rangle = \hat{Q}\,|\psi\rangle$

$$\langle n|\psi'\rangle = \langle n|\hat{Q}|\psi\rangle = \langle n|\hat{Q}\Big|\,\hat{1}\,\Big|\psi\Big\rangle = \langle n|\hat{Q}\left(\sum_{n'=1}^{\infty}|n'\rangle\langle n'|\right)|\psi\rangle = \sum_{n'=1}^{\infty}\langle n|\hat{Q}|n'\rangle\langle n'|\psi\rangle.$$

Unter Verwendung der Entwicklungskoeffizienten $b_n = \langle n|\psi'\rangle$ und $a_n = \langle n|\psi\rangle$ folgt

$$b_n = \sum_{n'=1}^{\infty}\langle n|\hat{Q}|n'\rangle\, a_{n'} = \sum_{n'=1}^{\infty} Q_{nn'}\, a_{n'}$$

$\rightarrow$ äquivalent zu $|\psi'\rangle = \hat{Q}\,|\psi\rangle$ ist die Matrixdarstellung $\underline{b} = \underline{\underline{Q}}\,\underline{a}$

$$\begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \\ \vdots \\ b_i \\ \vdots \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} Q_{11} & Q_{12} & \dots & Q_{1j} & \dots \\ Q_{21} & Q_{22} & \dots & Q_{2j} & \dots \\ \vdots & \vdots & & \vdots & \\ Q_{i1} & Q_{i2} & & Q_{ij} & \dots \\ \vdots & \vdots & & \vdots & \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ \vdots \\ a_i \\ \vdots \end{pmatrix}$$

QM in Matrizenform → **Heisenberg´sche Matrizenmechanik.**

■ Eigenwertgleichung (EWG) für Operator $\hat{Q}$ in Matrizendarstellung

$$\hat{Q}\left|\psi_n\right\rangle = q_n \left|\psi_n\right\rangle$$

mit $\left\{\left|\psi_n\right\rangle\right\}$ → Eigenfunktionen/Eigenvektoren (EW/EV) , $\left\{q_n\right\}$ → Eigenwerte (EW) von $\hat{Q}$.

Aus $\hat{Q}\left|\psi_n\right\rangle = q_n \left|\psi_n\right\rangle = \hat{1}\,\hat{Q}\,\hat{1}\left|\psi_n\right\rangle = q_n\,\hat{1}\left|\psi_n\right\rangle$ folgt

$$\sum_{i,j=1^{******}}^{\infty} \left|n_i\right\rangle\left\langle n_i\right|\hat{Q}\left|n_j\right\rangle\left\langle n_j\middle|\psi_n\right\rangle = q_n \sum_{i=1\ ******}^{\infty} \left|n_i\right\rangle\left\langle n_i\middle|\psi_n\right\rangle$$

und da die $\left|n_i\right\rangle$ linear unabhängig (VONS!)

$$\sum_{i,j=1}^{\infty} \left(\left\langle n_i\right|\hat{Q}\left|n_j\right\rangle - q_n\delta_{ij}\right)\left\langle n_j\middle|\psi_n\right\rangle = 0 \quad \text{für alle i.} \qquad (*)$$

Dieses System aus endlich oder abzählbar unendlich vielen homogenen linearen algebraischen Gleichungen hat nur dann nichttriviale Lösungen, wenn die Determinante

$$\det\left(\left\langle n_i\right|\hat{Q}\left|n_j\right\rangle - q_n\delta_{ij}\right) = \det\left(Q_{ij} - q_n\delta_{ij}\right) = 0$$

verschwindet. Sind die Matrixelemente $Q_{ij}$ bekannt, lassen sich aus der charakteristischen Gleichung die EW $q_n$ bestimmen. Dann werden für jedes $q_n$ aus (*) die Entwicklungskoeffizienten $\left\langle n_j\middle|\psi_n\right\rangle$ ermittelt; die zu $q_n$ gehörende EF ist

$$\left|\psi_n\right\rangle = \sum_{j=1}^{\infty} \left\langle n_j\middle|\psi_n\right\rangle \left|n_j\right\rangle \ .$$

Beachte: Wird der lineare Operator $\hat{Q}$ zur Basis seiner EF $|\psi_n\rangle$ dargestellt und diese bilden ein VONS, so ist die darstellende Matrix diagonal und auf der Diagonalen stehen die EW von $\hat{Q}$, denn

$$Q_{ij} = \langle \psi_i | \hat{Q} | \psi_j \rangle = \langle \psi_i | \hat{Q} \psi_j \rangle = \langle \psi_i | q_j \psi_j \rangle = q_j \langle \psi_i | \psi_j \rangle = q_j \delta_{ij} .$$

$\rightarrow$ Bestimmung der EW ist also äquivalent zur Diagonalisierung der Matrix $Q_{ij}$. Welche Transformation leistet das ? (s.u.).

- **Produkte von Operatoren. Kommutator**

Def.: $(\hat{A}\hat{B})|\psi\rangle = \hat{A}(\hat{B}|\psi\rangle)$ (5.10)

Im Allgemeinen sind Operatoren nicht vertauschbar. Die Differenz

$$[\hat{A}, \hat{B}] := \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A} \tag{5.11}$$

wird **Kommutator der Operatoren** $\hat{A}$ **und** $\hat{B}$ genannt.

■ $[\hat{x}, \hat{p}_x] \underset{\text{Ortsd.}}{=} x\left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\right) - \left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\right)x = i\hbar\left(-x\frac{\partial}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial x}x\right) = i\hbar\left(-x\frac{\partial}{\partial x} + 1 + x\frac{\partial}{\partial x}\right) = i\hbar$

$\rightarrow$ komplexe Zahl

■ $\left[\frac{\partial}{\partial x_i}, \frac{\partial}{\partial x_j}\right] = \frac{\partial^2}{\partial x_i \partial x_j} - \frac{\partial^2}{\partial x_j \partial x_i} = 0$ (stetige WF)

■ $\left[x_i, \frac{\partial}{\partial x_j}\right] \underset{\text{Ortsd.}}{=} x_i \frac{\partial}{\partial x_j} - \frac{\partial}{\partial x_j} x_i = x_i \frac{\partial}{\partial x_j} - \delta_{ij} - x_i \frac{\partial}{\partial x_j} = -\delta_{ij}$ also $\underline{[\hat{x}_i, \hat{p}_j] = i\hbar\,\delta_{ij}}$ (5.12)

Bem.: Vergleiche mit fundamentalen Poisson-Klammern.

■ Komponenten des Bahndrehimpulses

Drehimpuls $\underline{L} = \underline{r} \times \underline{p} \underset{\text{prinzip}}{\overset{\text{Korrespondenz-}}{\longrightarrow}} \underline{\hat{L}} = \underline{\hat{r}} \times \underline{\hat{p}} \underset{\text{darst.}}{\overset{\text{Orts-}}{=}} \frac{\hbar}{i} \underline{r} \times \underline{\nabla}$

Für den Kommutator der Operatoren der Komponenten des Drehimpulses erhalten wir

$$\left[\hat{L}_x, \hat{L}_y\right] = \left[y\hat{p}_z - z\hat{p}_y, z\hat{p}_x - x\hat{p}_z\right] = \left[y\hat{p}_z, z\hat{p}_x\right] - \underbrace{\left[y\hat{p}_z, x\hat{p}_z\right]}_{\text{Null}} - \underbrace{\left[z\hat{p}_y, z\hat{p}_x\right]}_{\text{Null}} + \left[z\hat{p}_y, x\hat{p}_z\right] =$$

$$= y\hat{p}_x \underbrace{\left[\hat{p}_z, z\right]}_{-i\hbar} + x\hat{p}_y \underbrace{\left[z, \hat{p}_z\right]}_{i\hbar} = i\hbar\,(x\hat{p}_y - y\hat{p}_x) = i\hbar\,\hat{L}_z$$

$$\underline{\left[\hat{L}_i, \hat{L}_j\right] = i\hbar\,\varepsilon_{ijk}\,\hat{L}_k} \qquad \rightarrow \text{Operator} \qquad (5.13)$$

■ Für den Hamiltonoperator $\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + U(\underline{r})$ eines qmT bei Bewegung in $U(\underline{r})$ ist

$$\left[\hat{H}, \hat{x}_i\right] = -i\frac{\hbar}{m}\hat{p}_i \quad \text{und} \quad \left[\hat{H}, \hat{p}_i\right] = \left[U(\underline{r}), -i\hbar\frac{\partial}{\partial x_i}\right] = -i\hbar\frac{\partial U}{\partial x_i} \qquad (5.14)$$

■ Matrixelemente von $\hat{A}\,\hat{B}$

$$\left(\hat{A}\,\hat{B}\right)_{nn'} = \langle n|\hat{A}\,\hat{B}|n'\rangle = \langle n|\hat{A}\;\hat{1}\;\hat{B}|n'\rangle = \sum_k \langle n|\hat{A}\,|k\rangle\langle k|\,\hat{B}|n'\rangle = \sum_k A_{nk}\,B_{kn'} \quad (5.15)$$

$\rightarrow$ Matrizenmultiplikation

**Satz:** Zwei lineare Operatoren haben genau dann einen gemeinsamen VONS von EF, wenn sie kommutieren.

**Beweis:**

**(→)** Angenommen, $\hat{A}$ und $\hat{B}$ haben einen gemeinsamen VONS von EF $\{|\psi_n\rangle\}$, d.h. $\hat{A}|\psi_n\rangle = a_n|\psi_n\rangle$ und $\hat{B}|\psi_n\rangle = b_n|\psi_n\rangle$. Dann gilt für alle $|\psi\rangle \in H$

$$\hat{A}\hat{B}|\psi\rangle \underset{\text{Vollst.}}{=} \hat{A}\hat{B}\sum_n c_n|\psi_n\rangle = \hat{A}\sum_n c_n\hat{B}|\psi_n\rangle = \hat{A}\sum_n c_n b_n|\psi_n\rangle = \sum_n c_n b_n \hat{A}|\psi_n\rangle = \sum_n c_n b_n a_n|\psi_n\rangle$$

bzw.

$$\hat{B}\hat{A}|\psi\rangle = \ldots = \sum_n c_n a_n b_n|\psi_n\rangle.$$

Also ist $\hat{A}\hat{B}|\psi\rangle - \hat{B}\hat{A}|\psi\rangle = 0$, für beliebige $|\psi\rangle$, denn die EW sind als i.a. komplexe Zahlen beliebig vertauschbar.

**(←)** Sei $[\hat{A},\hat{B}] = 0$. Dann ist mit $|\psi_n\rangle$ auch $\hat{B}|\psi_n\rangle$ Lösung des EWP $\hat{A}|\psi_n\rangle = a_n|\psi_n\rangle$, also EF von $\hat{A}$, denn

$$\hat{A}\left(\hat{B}|\psi_n\rangle\right) = \hat{B}\hat{A}|\psi_n\rangle = \hat{B}a_n|\psi_n\rangle = a_n\left(\hat{B}|\psi_n\rangle\right).$$

Angenommen, der **EW $a_n$** ist **nicht entartet**. Dann entspricht ihm (bis auf Multiplikation mit einer (Normierungs)Konstanten) genau eine EF $|\psi_n\rangle$, es muss also

$\hat{B}|\psi_n\rangle = \text{const}|\psi_n\rangle =: b_n|\psi_n\rangle.$

Das bedeutet, $|\psi_n\rangle$ ist auch EF von $\hat{B}$ (zum EW $b_n$).

Ist **$a_n$ entartet**, wird der Beweis etwas aufwändiger, da dann $\hat{B}|\psi_n\rangle \neq \text{const}|\psi_n\rangle$ möglich ist: Angenommen, der EW $a_n$ sei k-fach entartet und $\{|\psi_n^{(1)}\rangle,...,|\psi_n^{(k)}\rangle\}$ eine Basis im Eigenraum von $\hat{A}$ zu diesem $a_n$. Wie oben gezeigt, sind alle $\hat{B}|\psi_n^{(i)}\rangle$ $i = 1,...,k$ auch EF zu $\hat{A}$, d.h. nach den $\{|\psi_n^{(i)}\rangle\}$ entwickelbar $\hat{B}|\psi_n^{(i)}\rangle = \sum_j^k c_{ij}|\psi_n^{(i)}\rangle$ (*).

Wir behaupten, es gibt EF von $\hat{B}$, die passende Linearkombinationen der $|\psi_n^{(i)}\rangle$ und damit auch EF von $\hat{A}$ sind: Wir suchen also $|\phi\rangle$ derart, dass gilt

$$\hat{B}|\phi\rangle = b|\phi\rangle \quad \text{und} \quad |\phi\rangle = \sum_i^k c_i|\psi_n^{(i)}\rangle \ .$$

Wir haben

$$\hat{B}|\phi\rangle = \hat{B}\sum_i^k c_i|\psi_n^{(i)}\rangle = b\sum_i^k c_i|\psi_n^{(i)}\rangle \quad \text{und} \quad \hat{B}|\phi\rangle = \hat{B}\sum_i^k c_i|\psi_n^{(i)}\rangle = \sum_i^k c_i\hat{B}|\psi_n^{(i)}\rangle \overset{(*)}{=} \sum_i^k c_i \sum_j^k c_{ij}|\psi_n^{(j)}\rangle$$

also $\sum_i^k c_i \sum_j^k c_{ij}|\psi_n^{(j)}\rangle = b\sum_i^k c_i|\psi_n^{(i)}\rangle$ und schließlich $\sum_j^k \left(\sum_i^k c_i\, c_{ij} - b\, c_i\, \delta_{ij}\right)|\psi_n^{(i)}\rangle = 0$ .

Das führt auf das EWP $\underline{\sum_i^k (c_{ij} - b\,\delta_{ij})\,c_i \ = 0}$ für die Matrix $c_{ij}$ :

$$\begin{pmatrix} c_{11}-b & c_{12} & \dots & c_{1k} \\ c_{21} & c_{22}-b & \dots & c_{2k} \\ \therefore & \therefore & \therefore & \therefore \\ c_{k1} & c_{k2} & \dots & c_{kk} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \\ \therefore \\ c_k \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ \therefore \\ 0 \end{pmatrix}$$

Es hat k Lösungen; diese sind reell, wenn $\hat{B}$ ein hermitescher Operator ist (s.u). Beachte, dass allen $|\phi^{(i)}\rangle = \sum_j^k c_j^{(i)}|\psi_n^{(j)}\rangle$ derselbe EW $a_n$ bzgl. $\hat{A}$, aber i.a. unterschiedliche EW $b^{(i)}$ bzgl. $\hat{B}$ entsprechen.