

A.8 Kommutatoren

A.8.1 Kommutatoren der Orts- und Impulsoperatoren

Der Orts- und der Impulsoperator bezüglich derselben kartesischen Richtung vertauschen nicht miteinander. Wir berechnen den Kommutator für alle Richtungskombinationen, indem wir ihn auf eine beliebige Funktion $\psi(\vec{x})$ anwenden und die Produktregel der Ableitung benutzen:

$$\begin{aligned} [\hat{P}_\alpha, \hat{Q}_\beta] \psi(\vec{x}) &= (\hat{P}_\alpha \hat{Q}_\beta - \hat{Q}_\beta \hat{P}_\alpha) \psi(\vec{x}) \\ &= \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x_\alpha} (x_\beta \psi(\vec{x})) - x_\beta \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x_\alpha} \psi(\vec{x}) \\ &= \frac{\hbar}{i} \delta_{\alpha\beta} \psi(\vec{x}) \end{aligned}$$

Da dies für jede Funktion $\psi(x)$ gilt, folgt die Operatorbeziehung

$$[\hat{P}_\alpha, \hat{Q}_\beta] = \frac{\hbar}{i} \delta_{\alpha\beta} \hat{\mathbb{1}}.$$

Die Ortsoperatoren \hat{Q}_α und \hat{Q}_β vertauschen miteinander, weil man x_α und x_β vertauschen kann. Die Impulsoperatoren \hat{P}_α und \hat{P}_β vertauschen miteinander, weil man die Ableitungen nach x_α und x_β vertauschen kann. Insgesamt erhalten wir die

VERTAUSCHUNGSRELATIONEN VON ORTS- UND IMPULSOPERATOREN

$$\begin{aligned} \rightarrow \quad & \underline{[\hat{Q}_\alpha, \hat{P}_\beta] = i \hbar \delta_{\alpha,\beta} \hat{\mathbb{1}}} \\ & [\hat{Q}_\alpha, \hat{Q}_\beta] = 0 \\ & [\hat{P}_\alpha, \hat{P}_\beta] = 0 \end{aligned} \quad (\text{A.149})$$

A.8. Kommutatoren

Man kann zeigen, dass für analytische Funktionen f und g dieser Operatoren gilt (s. Übungen)

$$\underline{[f(\vec{Q}, \vec{P}), \hat{P}_\alpha] = i\hbar \frac{\partial}{\partial \hat{Q}_\alpha} f(\vec{Q}, \vec{P})} \quad (\text{A.152})$$

$$\underline{[\hat{Q}_\alpha, g(\vec{Q}, \vec{P})] = i\hbar \frac{\partial}{\partial \hat{P}_\alpha} g(\vec{Q}, \vec{P})} \quad (\text{A.153})$$

Die Ableitung nach einem Operator ist definiert als

$$\frac{\partial}{\partial \hat{O}_\alpha} f(\vec{O}) = \left(\frac{\partial}{\partial y_\alpha} f(\vec{y}) \right) \Big|_{\vec{y} \rightarrow \vec{O}} \quad (\text{A.154})$$

Beispiele:

$$\underline{[\hat{Q}^2, \hat{P}_\alpha] = i\hbar \frac{\partial}{\partial \hat{Q}_\alpha} \hat{Q}^2 = 2i\hbar \hat{Q}_\alpha} \quad (\text{A.155})$$

$$[e^{c\hat{Q}_\alpha}, \hat{P}_\alpha] = i\hbar \frac{\partial}{\partial \hat{Q}_\alpha} e^{c\hat{Q}_\alpha} = i\hbar c e^{c\hat{Q}_\alpha} \quad (\text{A.156})$$

A.8.2 Gemeinsame Eigenvektoren kommutierender Operatoren

Wir behandeln nun allgemein das Eigenwertproblem für den Fall, dass mehrere kommutierende Operatoren (wie z.B. $\hat{Q}_1, \hat{Q}_2, \hat{Q}_3$) vorliegen.

Wir betrachten zunächst zwei Operatoren \hat{A} und \hat{B} , deren Kommutator verschwindet, $[\hat{A}, \hat{B}] = 0$. Die Eigenwertgleichungen lauten

$$\underline{\hat{A}|a\rangle = a|a\rangle} \quad ; \quad \underline{\hat{B}|b\rangle = b|b\rangle} \quad (\text{A.157})$$

Wir nutzen aus, dass die Operatoren vertauschen.

$$\underline{\hat{A}(\hat{B}|a\rangle)} = \hat{A}\hat{B}|a\rangle = \hat{B}\hat{A}|a\rangle = a \underline{(\hat{B}|a\rangle)} \quad (\text{A.158})$$

$\hat{B}|a\rangle$ ist also gleichzeitig Eigenvektor von \hat{A} zum Eigenwert a . Wenn dieser

Eigenwert nicht entartet ist, folgt $\hat{B}|a\rangle \sim |a\rangle$ und daraus, dass $|a\rangle$ gleichzeitig Eigenvektor von \hat{B} ist

$$\hat{B}|a\rangle = b|a\rangle \quad (\text{A.159})$$

Komplizierter wird es, wenn der Eigenwert a entartet ist, wenn also mehrere linear unabhängige Eigenvektoren zum selben Eigenwert a vorliegen. In diesem Fall spannen die zugehörigen Eigenvektoren von \hat{A} einen Unterraum $V^{(a)}$ auf.

Beweis: Es ist zweckmäßig, die entarteten Eigenvektoren mit einem zusätzlichen Index zu nummerieren: $\hat{A}|a; i\rangle = a|a; i\rangle, \quad i = 1, 2, \dots, l.$

1. Jede Linearkombination der Vektoren aus dem Unterraum $V^{(a)}$

$$|\Psi\rangle = \sum_{i=1}^l c_i |a; i\rangle$$

ist Eigenvektor von \hat{A} zum Eigenwert a und somit Element von $V^{(a)}$:

$$\hat{A}|\Psi\rangle = \sum_{i=1}^l c_i \hat{A}|a; i\rangle = \sum_{i=1}^l c_i a |a; i\rangle = a|\Psi\rangle$$

2. Zu jedem Vektor $|\Psi\rangle \in V^{(a)}$ existiert das Inverse in $V^{(a)}$, $|- \Psi\rangle = -|\Psi\rangle$

$$(|-\Psi\rangle + |\Psi\rangle) = |0\rangle$$

3. Das Nullelement von V liegt ebenfalls in $V^{(a)}$.

$$\hat{A}|0\rangle = 0|0\rangle = a|0\rangle$$

Aus Gl. (A.158) folgt, dass $\hat{B}|\Psi\rangle$ ebenfalls Eigenvektor von A zum Eigenwert a ist. Demzufolge verlässt \hat{B} nicht den Unterraum $V^{(a)}$: $\hat{B}|\Psi\rangle \in V^{(a)}$ $\forall |\Psi\rangle \in V^{(a)}$. Wir können \hat{B} daher im Unterraum $V^{(a)}$ diagonalisieren, d.h. es gibt eine Linearkombination $|a, b\rangle = \sum_{i=1}^l c_i |a; i\rangle$ mit der Eigenschaft

$$\begin{aligned} \hat{A}|a, b\rangle &= a|a, b\rangle \\ \hat{B}|a, b\rangle &= b|a, b\rangle \end{aligned}$$

Hieraus ergibt sich das

Theorem A.8 (Kommutierende Operatoren). Wenn zwei selbstadjungierte Operatoren \hat{A}, \hat{B} einen vollständigen Satz von Eigenvektoren besitzen und miteinander kommutieren ($\hat{A}\hat{B} = \hat{B}\hat{A}$), dann existiert ein vollständiger Satz von gemeinsamen Eigenvektoren (Orthonormalbasis) mit den Eigenschaften

- $\hat{A}|a, b\rangle = a|a, b\rangle$
- $\hat{B}|a, b\rangle = b|a, b\rangle$
- $\sum_{i,j} |a_i, b_j\rangle \langle a_i, b_j| = \hat{1}$ (Vollständigkeit)
- $\langle a_i, b_j | a_{i'}, b_{j'} \rangle = \delta_{i,i'} \delta_{j,j'}$

Das Theorem lässt sich auch auf drei Operatoren ausdehnen.

Wenn $[\hat{A}, \hat{B}] = [\hat{B}, \hat{C}] = [\hat{A}, \hat{C}] = 0$, dann existiert ein gemeinsamer Satz von Eigenvektoren $|a, b, c\rangle$ mit

$$\begin{aligned} \hat{A}|a, b, c\rangle &= a|a, b, c\rangle \\ \hat{B}|a, b, c\rangle &= b|a, b, c\rangle \\ \hat{C}|a, b, c\rangle &= c|a, b, c\rangle \end{aligned}$$

Bsp: $|x_1, x_2, x_3\rangle$

Die Verallgemeinerung lässt sich für beliebig viele Operatoren fortsetzen, allerdings gibt es eine Höchstzahl kommutierender Operatoren. Ist diese erreicht, so ist jede Entartung der Vektoren aufgehoben, und die Eigenwerte a, b, c, \dots charakterisieren eindeutig alle Eigenzustände $|a, b, c, \dots\rangle$. Da die Eigenvektoren eine Basis des Vektorraums bilden, heißt ein derartiger Satz von Operatoren vollständiger Satz kommutierender Operatoren. Alle weiteren kommutierenden Operatoren lassen sich dann durch die bereits gefundenen Operatoren ausdrücken.

Beispiele s.u.

Theorem A.9. Jeder Operator, der mit allen Elementen eines vollständigen Satzes kommutierender Operatoren vertauscht, ist eine Funktion der Operatoren dieses Satzes.

Beispiel: $Q_1^2 + Q_2^2 + Q_3^2$

Der Beweis erfolgt über das Spektraltheorem. Umgekehrt gilt:

Theorem A.10. Operatoren, die nicht vertauschen, haben keinen vollständigen Satz gemeinsamer Eigenvektoren!

Beispiele für vollständige Sätze kommutierender Operatoren:

- 1) in 1d, ohne Spin: Ortsoperator $Q|x\rangle = x|x\rangle$ hat keine Entartung, daher für sich alleine "vollständig". Ditto Impulsoperator;
- 2) in 3d, ohne Spin: Ortsoperatoren (Q_x, Q_y, Q_z) , Oder ditto (P_x, P_y, P_z)
- 3) Hamiltonoperator, wenn keine Energieentartung vorliegt.
- 4) Wasserstoffartiges Atom (Kapitel 7): Zustände charakterisiert durch Quantenzahlen $|n, l, m, m_z\rangle$, aber die Energie hängt nur von der Hauptquantenzahl n ab. Zu den Quantenzahlen gehört das vollständige System kommutierender Operatoren H, L^2, L_z, S_z

Beweis:

Wir führen den Beweis indirekt. $|a, b\rangle$ sei ein gemeinsamer Satz von Eigenvektoren. Dann gilt aber

$$\begin{aligned}
\hat{A}\hat{B}|a, b\rangle &= \hat{A}b|a, b\rangle = b\hat{A}|a, b\rangle = ba|a, b\rangle \\
&= ab|a, b\rangle = a\hat{B}|a, b\rangle = \hat{B}a|a, b\rangle = \hat{B}\hat{A}|a, b\rangle \\
\hat{A}\hat{B}|a, b\rangle - \hat{B}\hat{A}|a, b\rangle &= 0 \\
\underline{[\hat{A}, \hat{B}]|a, b\rangle} &= 0
\end{aligned}$$

Wenn dies für alle $|a, b\rangle$ gelten würde, dann wäre $[\hat{A}, \hat{B}] = 0$, also ein Widerspruch.

Es kann daher keinen vollständigen Satz gemeinsamer Eigenvektoren geben. Allerdings ist ein Unterraum gemeinsamer Eigenvektoren möglich! !

Anstatt zur Kennzeichnung von Eigenvektoren alle Eigenwerte eines vollständigen Satzes kommutierender Operatoren zu schreiben ($|a, b, c, \dots\rangle$) verwendet man oft einen *kollektiven Index* (etwa $|k\rangle$), insbesondere wenn es sich um „verwandte“ Quantenzahlen handelt. Es gilt dann

Beispiel: Vektor x , steht für x_1, x_2, x_3

$$\begin{aligned}
|k\rangle &= |a, b, c, \dots\rangle \\
\langle k|k'\rangle &= \delta_{k,k'} = \delta_{a,a'}\delta_{b,b'}\delta_{c,c'}\dots \\
\hat{1} &= \sum_k |k\rangle\langle k| = \sum_{a,b,c,\dots} |a, b, c, \dots\rangle\langle a, b, c, \dots|
\end{aligned}$$

Bsp: $\delta_{x_1 x_1} \delta_{x_2 x_2} \delta_{x_3 x_3}$
oder $\delta(x_1, x_1) \cdot \delta_{\dots}$

Zum Auffinden einer vollständigen Basis geht man folgendermaßen vor: Nehmen wir an, der Operator \hat{A} sei bereits diagonalisiert worden, d.h. das Eigenwertproblem $\hat{A}|a\rangle = a|a\rangle$ sei gelöst. Allerdings sei mindestens ein Eigenwert a entartet. Die Eigenwerte werden mit einem zusätzlichen Index durchnumeriert $\hat{A}|a, i\rangle = a|a, i\rangle$. Wendet man nun einen mit \hat{A} kommutierenden Operator \hat{B} auf $|a, i\rangle$ an, so liefert dies zwar nicht unbedingt $|a, i\rangle$ zurück, aber es muss sich um einen Vektor in dem Unterraum handeln, der von den entarteten $|a, i\rangle$ aufgespannt wird, d.h.

$$\hat{B}|a, i\rangle = \sum_j c_j |a, j\rangle$$

A.8. Kommutatoren

In diesem Unterraum diagonalisieren wir \hat{B} und erhalten schließlich

$$\hat{B}|a, b\rangle = b|a, b\rangle$$

$$\hat{A}|a, b\rangle = a|a, b\rangle$$

Wenn die Entartung nun vollständig aufgehoben ist, hat man den vollständigen Satz \hat{A}, \hat{B} gefunden. Andernfalls lässt sich das Verfahren mit einem weiteren mit \hat{A} und \hat{B} kommutierenden Operator fortsetzen.

Beispiele

1. Der Spin eines Spin- $\frac{1}{2}$ Teilchens ist vollständig durch die Eigenwerte von \hat{S}_z bestimmt, da gilt

$$[\hat{S}_z, \hat{S}_x] \neq 0$$

$$[\hat{S}_z, \hat{S}_y] \neq 0$$

$$|\psi\rangle = \sum_{\sigma=\uparrow, \downarrow} \int \psi_{\sigma}(\vec{x}) |x, \sigma\rangle$$

(siehe Basis unter Punkt 2)

$$\hat{Q}_x = \hat{Q}_x \otimes \hat{I}_y \otimes \hat{I}_z \otimes \hat{I}_\sigma$$

2. Bezieht man noch den Ort eines freien Teilchens mit ein, so ist der Zustand gekennzeichnet durch

$$\hat{Q}_x |x, y, z, \sigma\rangle = x |x, y, z, \sigma\rangle$$

$$|x, y, z, \sigma\rangle \equiv |\vec{x}, \sigma\rangle = |x\rangle \otimes |y\rangle \otimes |z\rangle \otimes |\sigma\rangle \approx |x\rangle \otimes |y\rangle \otimes |z\rangle \otimes |\sigma\rangle$$

Wegen $[\hat{Q}_i, \hat{Q}_j] = 0$ ist der Zustand durch den Spin und durch alle kartesischen Koordinaten gemeinsam charakterisiert. Allerdings können gemäß Theorem (A.10) nicht gleichzeitig Orts- und Impulskoordinaten zur selben Richtung vorkommen, da $[\hat{Q}_i, \hat{P}_i] \neq 0$.

$|\vec{x}, \sigma\rangle$ bildet eine vollständige Basis.

Ebenso bilden $|\vec{p}, \sigma\rangle$ oder z.B. $|x, y, p_z, \sigma\rangle$ eine vollständige Basis.

A.8. Kommutatoren

Beweis hier für den allgemeinen Fall eines "gemischten Zustands" ("statistischer Operator" rho. Siehe Kapitel 9. (Der einfachste Fall für rho ist rho = |psi><psi|)

Analoger Beweis auch für "reine Zustände" der Form |psi>. (Siehe z.B. Wikipedia, Heisenbergsche Unschärferelation, unter "Verallgemeinerung")

A.8.3 Die Unbestimmtheitsrelation

Wir definieren zunächst

Def. A.28 (Varianz). Im Zustand, der durch den statistischen Operator $\hat{\rho}$ beschrieben wird, ist die Varianz (Dispersion, Unbestimmtheit) einer Observablen A , der der hermitesche Operator \hat{A} zugeordnet ist, definiert als

$$\text{var}(A) := \langle (\Delta \hat{A})^2 \rangle$$

mit

$$\Delta \hat{A} = \hat{A} - \langle \hat{A} \rangle \text{ und } \langle \hat{A} \rangle = \text{Sp}(\hat{\rho} \hat{A})$$

Es gilt $\langle (\Delta \hat{A})^2 \rangle \equiv \langle (\hat{A} - \langle \hat{A} \rangle)^2 \rangle = \langle \hat{A}^2 \rangle - \langle \hat{A} \rangle^2$.

Theorem A.11 (Unbestimmtheitsrelation). Im dem Zustand, der durch den statistischen Operator $\hat{\rho}$ beschrieben wird, erfüllen die Varianzen zweier Observablen A und B , die durch die selbstadjungierten Operatoren \hat{A} und \hat{B} beschrieben werden, die Ungleichung

$$\text{var}(A) \cdot \text{var}(B) \geq \frac{|\langle [\hat{A}, \hat{B}] \rangle|^2}{4} \quad (\text{A.160})$$

2023 04 24 Kap A.8.3 nur bis hier

Weitere Voraussetzung: Alle Zustände $|\varphi_i\rangle$ in $\hat{\rho} = \sum_i p_i |\varphi_i\rangle\langle\varphi_i|$ müssen zu den Definitionsbereichen von \hat{A} , \hat{B} , $\hat{A}^\dagger \hat{B}$, $\hat{B}^\dagger \hat{A}$, $\hat{A}^\dagger \hat{A}$ und $\hat{B}^\dagger \hat{B}$ gehören (s.u.).

Beweis:

↳ S. A.72

Für einen Operator \hat{T} gilt die Ungleichung

$$\langle \hat{T} \hat{T}^\dagger \rangle = \text{Sp}(\hat{\rho} \hat{T} \hat{T}^\dagger) \geq 0$$

Diese Ungleichung ist sofort einsichtig, wenn wir für $\hat{\rho}$ die Spektraldarstellung verwenden

$$\text{Sp}(\hat{\rho} \hat{T} \hat{T}^\dagger) = \sum_i p_i \underbrace{\langle \varphi_i | \hat{T} \hat{T}^\dagger | \varphi_i \rangle}_{\geq 0} \geq 0$$

↳ $\langle \varphi_i | \hat{T} \hat{T}^\dagger | \varphi_i \rangle$ mit $|\varphi_i\rangle = \hat{T}^\dagger |\varphi_i\rangle$

Die Eigenwerte des statistischen Operators liegen bekanntlich zwischen 0 und 1 und der Erwartungswert $\langle \varphi_i | \hat{T} \hat{T}^\dagger | \varphi_i \rangle$ kann als Normquadrat des

A.8. Kommutatoren

Vektors $\hat{T}^\dagger |\varphi_i\rangle$ aufgefasst werden. Wir wählen speziell $\hat{T} = \Delta\hat{A} + i\alpha\Delta\hat{B}$, wobei α eine beliebige reelle Zahl sein soll. Die Ungleichung liefert dann

$$\langle \hat{T} \hat{T}^\dagger \rangle = Sp \left(\hat{\rho} (\Delta\hat{A})^2 \right) - i\alpha Sp \left(\hat{\rho} [\Delta\hat{A}, \Delta\hat{B}] \right) + \alpha^2 Sp \left(\hat{\rho} (\Delta\hat{B})^2 \right) \geq 0$$

Der Kommutator kann umgeformt werden zu

$$[\Delta\hat{A}, \Delta\hat{B}] = [\hat{A}, \hat{B}] =: i\hat{C}$$

Kommutatoren hermitescher Operatoren sind anti-hermitesch (Gl. (A.42)). \hat{C} ist deshalb hermitesch und besitzt nur reelle Eigenwerte. Aus der Ungleichung wird

$$\langle \hat{T} \hat{T}^\dagger \rangle = Sp \left(\hat{\rho} (\Delta\hat{A})^2 \right) + \alpha^2 Sp \left(\hat{\rho} (\Delta\hat{B})^2 \right) + \alpha Sp \left(\hat{\rho} \hat{C} \right) \geq 0$$

rechte

Alle Terme in dieser Ungleichung sind reell und die ersten beiden sind sogar positiv. Die ~~linke~~ Seite beschreibt eine nach oben geöffnete Parabel in α . Die Ungleichung muss für alle Werte von α erfüllt sein. Deshalb ist es eine notwendige und hinreichende Bedingung, wenn die Ungleichung am Minimum, also für

$$\alpha = -\frac{1}{2} \frac{Sp \left(\hat{\rho} \hat{C} \right)}{Sp \left(\hat{\rho} (\Delta\hat{B})^2 \right)},$$

erfüllt ist. In diesem Fall liefert die Ungleichung nach Einsetzen und Multiplizieren mit dem Nenner von α die gesuchte Unbestimmtheitsrelation

$$Sp \left(\hat{\rho} (\Delta\hat{A})^2 \right) Sp \left(\hat{\rho} (\Delta\hat{B})^2 \right) \geq \frac{\left(Sp \left(\hat{\rho} \hat{C} \right) \right)^2}{4}$$

Die physikalischen Konsequenzen der Unbestimmtheitsrelation sind sehr weitreichend. Man beachte: Die Unbestimmtheitsrelation macht Aussagen über *unabhängige* Messungen an gleich *präparierten* Teilchen; nicht aber über *aufeinanderfolgende* Messungen an demselben Teilchen!



Beispiel: Der Erwartungswert des Kommutators von Orts- und Impulsoperator in einer Raumrichtung ist gemäß Gl. (A.151) $|\langle [\hat{Q}_\alpha, \hat{P}_\alpha] \rangle| = \hbar$. Daraus folgt die Unschärferelation

$$\underline{\text{var}(Q_\alpha) \cdot \text{var}(P_\alpha) \geq \frac{\hbar^2}{4}}.$$

Das Gleichheitszeichen wird nur für Gaußsche Funktionen $\exp(-ax^2 - bx)$ erreicht.

Gegenbeispiel: Wir betrachten eine Variable mit dem endlichen Definitionsbereich $0 \leq \theta \leq 2\pi$ und den dazu „konjugierten Impuls“ $\hat{p}_\theta = -i\hbar d/d\theta$. Mit dem Skalarprodukt $\langle u, v \rangle := \int_0^{2\pi} u^*(\theta)v(\theta)d\theta$ sind dies beides selbstadjungierte Operatoren, wenn man sich auf differenzierbare periodische Funktionen mit $u(0) = u(2\pi)$ beschränkt. Es gilt aber

$$\underline{\text{nicht}} \quad \underline{\Delta\theta \Delta p_\theta \geq \frac{\hbar}{2}}.$$



Diese Beziehung wird z.B. von allen Eigenfunktionen von \hat{p}_θ , nämlich $u_m(\theta) = e^{i\pi\theta}/2\pi$ verletzt, weil für diese $\Delta p_\theta = 0$ gilt. Der Grund, warum der Beweis der Unbestimmtheitsrelation hier nicht gilt, ist, dass die Eigenfunktionen $u_m(\theta)$ nicht zum Definitionsbereich von \hat{p}_θ gehören, weil $u_m(\theta)$ nicht periodisch ist.

Generell muss man beim Definitionsbereich unbeschränkter Operatoren wie \hat{P} Vorsicht walten lassen (s.a. Kap. A.10).

A.9 Gaußsche Integrale

(besprochen am 24.4.23)

Gaußsche Integrale werden vielfach benötigt, zum Beispiel zur Beschreibung von Wellenpaketen. Das einfachste Gaußsche Integral

$$I = \int_{-\infty}^{\infty} e^{-x^2} dx$$

kann man leicht durch Übergang auf ein zweidimensionales Integral berechnen:

$$\begin{aligned} I^2 &= \left(\int_{-\infty}^{\infty} e^{-x^2} dx \right) \left(\int_{-\infty}^{\infty} e^{-y^2} dy \right) = \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-(x^2+y^2)} dx dy \\ &= \int_0^{\infty} \int_0^{2\pi} r e^{-r^2} d\varphi dr \quad \text{mit } r^2 = x^2 + y^2, \quad dx dy = r dr d\varphi \\ &= 2\pi \int_0^{\infty} e^{-\alpha} d\alpha \quad \text{mit } \alpha = r^2 \Rightarrow d\alpha = 2r dr \\ &= -\pi e^{-\alpha} \Big|_0^{\infty} = \pi \\ \Rightarrow I &= \sqrt{\pi}. \end{aligned}$$

Daraus folgt das allgemeinere Integral

$$\boxed{\int_{-\infty}^{\infty} e^{-ax^2} dx = \sqrt{\frac{\pi}{a}}} \quad (\text{A.161})$$

mittels der Substitution $y = \sqrt{a}x \Rightarrow dy = \sqrt{a} dx$.

Durch quadratisches Ergänzen erhält man dann leicht allgemein:

<u>GAUSSSCHES INTEGRAL</u>	
$\int_{-\infty}^{\infty} \exp(-ax^2 - bx) dx = \sqrt{\frac{\pi}{a}} \exp\left(\frac{b^2}{4a}\right)$	
$a, b \text{ komplex, } \operatorname{Re} a > 0 .$	(A.162)

Diese Beziehung gilt auch bei komplexen a, b .

Gaußsche Integrale wie $\int_{-\infty}^{\infty} x^n e^{-ax^2} dx$ über Potenzen x^n kann man sich nun sehr einfach verschaffen:

1. Wenn n gerade ist, kann man das Gaußsche Integral durch eine oft nützliche Strategie, nämlich durch sukzessives Ableiten nach dem Parameter a erhalten ! Der erste Schritt lautet (der Einfachheit halber bei $b = 0$):

$$\int_{-\infty}^{\infty} x^2 e^{-ax^2} dx = -\frac{d}{da} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-ax^2} dx = -\frac{d}{da} \sqrt{\frac{\pi}{a}} = \frac{1}{2a} \sqrt{\frac{\pi}{a}} .$$

(A.163)

Die nächste Ableitung nach a ergibt $\int_{-\infty}^{\infty} x^4 e^{-ax^2} dx$, etc.

2. Wenn n ungerade ist, und $b = 0$, dann verschwindet das Integral, weil der Integrand dann in x ungerade ist, und die Integrationsgrenzen in x symmetrisch, d.h. die Integranden zu x und $-x$ heben sich gerade auf:

$\int_{-\infty}^{\infty} x^{2m+1} e^{-ax^2} dx = 0 .$	(A.164)
---	---------

Solche Symmetrie-Überlegungen führen häufig zu starken Vereinfachungen.

A.10 Der Hilbertraum

A.10: Kein Prüfungstoff

Wir haben einen linearen Vektorraum als eine Menge von Elementen definiert, die unter Addition und Multiplikation mit Skalaren abgeschlossen ist. Bemerkenswerterweise sind alle endlich-dimensionalen Vektorräume gleicher Dimension isomorph. Bei unendlich-dimensionalen Vektorräumen muss man jedoch Unterscheidungen machen.

Wir beginnen mit einem endlich- oder unendlich-dimensionalen Satz von Basisvektoren $|e_n\rangle$ mit $n \in \mathbb{N}$. Hieraus konstruieren wir Vektoren

$$|f\rangle = \sum_i f_i |e_i\rangle. \quad (\text{A.165})$$

Wir betrachten einen Vektorraum V , der aus allen Vektoren dieser Form aufgebaut ist, bei denen nur *endlich* viele Koeffizienten ungleich Null sind. Die Grenzelemente von Cauchy-Folgen in diesem Vektorraum V liegen dann nicht unbedingt in V . Wenn wir diese Grenzelemente zu V hinzunehmen erhalten wir einen größeren Vektorraum:

Def. A.29 (Hilbertraum). Ein linearer Vektorraum heißt Hilbertraum \mathcal{H} , wenn in ihm ein Skalarprodukt definiert ist und jede Cauchy-Folge in ihm ein Grenzelement besitzt (Vollständigkeit).

Die Vektoren eines Hilbertraums haben **endliche Norm**: $\sum_i |c_i|^2 < \infty$. Beim kontinuierlichen Ortsraum wird hieraus $\int_{-\infty}^{\infty} |\psi(x)|^2 dx < \infty$, d.h. die Vektoren eines Hilbertraums sind quadratintegrabel. Alle physikalisch realisierbaren Zustände gehören zu einem Hilbertraum.

Quadratintegrable Räume sind separabel, d.h. alle VON sind abzählbar.

Im folgenden gehen wir genauer auf kontinuierliche Räume ein. Dort treten Definitions- und Konvergenz-Probleme für unbeschränkte Operatoren mit kontinuierlichen Spektren auf, wie z.B. den Orts- und den Impulsoperator. So sind z.B. die Eigenvektoren $|y\rangle$ des Ortsoperators \hat{Q} im kontinuierlichen Ortsraum $\langle x|y\rangle = \delta(x-y)$. Sie sind nicht normierbar, d.h. keine Elemente des Hilbertraums. Sie bilden eine überabzählbare Basis eines größeren Raums. Die Eigenfunktionen des Impulsoperators sind die Fourierkoeffizienten. Bei einem unendlich großen kontinuierlichen Ortsraum sind sie ebenfalls nicht normierbar. Man beachte, dass die Eigenfunktionen vom jeweiligen Definitionsbereich und von den Randbedingungen abhängen-

Es gibt zwei verschiedene Zugänge zu Operatoren in kontinuierlichen Räumen. Der erste geht auf von Neumann zurück.

A.10.1 Von Neumansche Projektionsoperatoren

Dieser in der mathematischen Literatur übliche Zugang benutzt nur Vektoren aus Hilberträumen, d.h. normierbare Vektoren, und verzichtet auf die Verwendung von Distributionen. Die zugehörige Spektraltheorie ist sehr komplex. Im folgenden sei nur die Grundidee skizziert, mit der man die Spektraldarstellung von Operatoren in kontinuierlichen Räumen formulieren kann. Eine strengere Behandlung findet man z.B. in A. Peres, Quantum Theory (einführend) oder S. Großmann, Funktionalanalysis.

Wir betrachten zunächst einen abzählbaren Vektorraum und einen Operator \hat{A} mit Eigenvektoren $|a_i\rangle$ und Eigenwerten a_i . Die Eigenwerte dürfen entartet sein. Wir definieren einen Projektionsoperator, der in den Unterraum der entarteten Eigenzustände zum Eigenwert $a_i = a$ projiziert:

$$\hat{P}(a) := \sum_{i=1}^n |a_i\rangle\langle a_i| \delta_{a,a_i} \quad (\text{A.166})$$

Mit diesem Projektionsoperator kann die Spektraldarstellung Gl. (A.57) von \hat{A} umgeschrieben werden:

$$\hat{A} = \sum_i a_i |a_i\rangle\langle a_i| = \sum_a a \hat{P}(a) \quad , \quad (\text{A.167})$$

wobei die letzte Summe sich über alle unterschiedlichen Eigenwerte a erstreckt. Wir bringen nun Gl. (A.167) in eine Form, die auch auf kontinuierliche Spektren anwendbar ist. Das kann man über das Stieltjes Integral erreichen, das folgendermaßen definiert ist:

$$\int_a^b g(x) d\sigma(x) := \lim_{n \rightarrow \infty} \sum_{i=1}^n g(x_i) (\sigma(x_i) - \sigma(x_{i-1})) \quad (\text{A.168})$$

mit $x_i - x_{i-1} \xrightarrow{n \rightarrow \infty} 0 \quad \forall i$ und einer nicht-fallenden Funktion $\sigma(x)$, aus der man das Maß $d\sigma(x)$ erhält. Wenn $\frac{d\sigma(x)}{dx}$ existiert, dann gilt

$$\underbrace{\int_a^b g(x) d\sigma(x)}_{\text{Stieltjes}} = \underbrace{\int_a^b g(x) \frac{d\sigma(x)}{dx} dx}_{\text{Riemann}} \quad (\text{A.169})$$

A.10. Der Hilbertraum

Für den speziellen Fall $\sigma(x) = x$ wird Gl. (A.168) zum gewöhnlichen Riemann-Integral:

$$\int_a^b g(x) d\sigma(x) = \int_a^b g(x) \frac{d\sigma(x)}{dx} dx = \int_a^b g(x) \frac{dx}{dx} dx = \int_a^b g(x) dx$$

Das Stieltjes-Integral wird dann interessant, wenn $\sigma(x)$ Unstetigkeiten aufweist.

Beispiel: $\sigma(x) = h\Theta(x - c)$, wobei Θ die Heavisidesche Stufenfunktion ist (siehe Abb. (A.7))

$$\Theta(x - c) = \begin{cases} 1 & x > c \\ \frac{1}{2} & x = c \\ 0 & x < c \end{cases} .$$

Der einzige Term, der zur Summe in Gl. (A.168) beiträgt, ist der mit $x_i > c > x_{i-1}$.

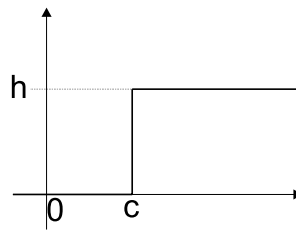


Abbildung A.7: Stufenfunktion

In diesem Fall ist $\sigma(x_i) - \sigma(x_{i-1}) = h$ und das Stieltjes-Integral liefert:

$$\int_a^b g(x) d\sigma(x) = \int_a^b g(x) d(h\Theta(x - c)) = \begin{cases} hg(c) & a < c < b \\ 0 & \text{sonst} \end{cases} \quad (\text{A.170})$$

Anmerkung: Wenn man die Delta-Distribution $\frac{d\sigma(x)}{dx} = \frac{d\Theta(x-c)}{dx} = \delta(x - c)$ zu Hilfe nimmt, kann man dieses Beispiel auch wieder als ein „Riemann-Integral“ formulieren.

Analog zur Heaviside-Funktion führen wir jetzt eine Schar von Projektoren $E(\lambda)$ auf den Unterraum der Eigenfunktionen mit Eigenwerten kleiner oder gleich λ ein:

$$E(\lambda) = \sum_{\lambda' \leq \lambda} P(\lambda') . \quad (\text{A.171})$$

Damit kann man ein Stieltjes-Integral schreiben:

$$\int_{-\infty}^{\infty} g(\lambda) d\hat{E}(\lambda) = \lim_{n \rightarrow \infty} \sum_{i=1}^n g(\lambda_i) \left(\hat{E}(\lambda_i) - \hat{E}(\lambda_{i-1}) \right) \quad (\text{A.172})$$

Mit seiner Hilfe können wir das Spektraltheorem in allgemein gültiger Form angeben:

Theorem A.12 (Spektraltheorem). Zu jedem selbstadjungierten Operator \hat{A} gibt es eine eindeutige Familie von Projektionsoperatoren $E(\lambda)$ ($\lambda \in \mathbb{R}$) („Spektralschar“) mit folgenden Eigenschaften:

1. $\hat{E}(\lambda_1)\hat{E}(\lambda_2) = \hat{E}(\lambda_2)\hat{E}(\lambda_1) = \hat{E}(\min(\lambda_1, \lambda_2))$
2. Für $\epsilon > 0$ gilt: $\lim_{\epsilon \rightarrow 0} \hat{E}(\lambda + \epsilon)|\Psi\rangle = \hat{E}(\lambda)|\Psi\rangle$
3. $\lim_{\lambda \rightarrow -\infty} \hat{E}(\lambda)|\Psi\rangle = 0$
4. $\lim_{\lambda \rightarrow +\infty} \hat{E}(\lambda)|\Psi\rangle = |\Psi\rangle,$

SPEKTRALTHEOREM

$$\hat{A} = \int_{-\infty}^{+\infty} \lambda d\hat{E}(\lambda) \quad (\text{A.173})$$

$$f(\hat{A}) = \int f(\lambda) d\hat{E}(\lambda) \quad (\text{A.174})$$

Diese Gleichungen gelten für beliebige selbstadjungierte Operatoren mit diskretem und/oder kontinuierlichem Spektrum.

Beispiel: Ortsoperator

Für den Ortsoperator soll $\hat{Q}\psi(x) = x\psi(x)$ gelten. Das Spektraltheorem ist erfüllt, wenn man dem Ortsoperator Projektionsoperatoren mit der fol-

A.10. Der Hilbertraum

genden Eigenschaft zuordnet:

$$\hat{E}(\lambda)\Psi(x) = \Theta(\lambda - x)\Psi(x) = \begin{cases} \Psi(x) & x \leq \lambda \\ 0 & x > \lambda \end{cases}$$

(Dies korrespondiert dazu, dass die Ableitung der Θ -Funktion die Eigenfunktionen $\delta(x - x_0)$ des Ortsoperators ergibt. Im von Neumannschen Formalismus benötigen wir diese δ -Distributionen aber nicht; wir verlassen nie den Hilbertraum.)

Wir verifizieren, dass das Spektraltheorem erfüllt ist:

$$\begin{aligned} \hat{Q}\Psi(x) &= \int_{-\infty}^{\infty} \lambda d\hat{E}(\lambda) \Psi(x) = \int_{-\infty}^{\infty} \lambda \underbrace{d(\hat{E}(\lambda)\Psi(x))}_{\text{d wirkt nur auf } \lambda} \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} \lambda d(\Theta(\lambda - x)\Psi(x)) \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} \lambda d(\Theta(\lambda - x)) \Psi(x) = x\Psi(x) \end{aligned}$$

Im letzten Schritt wurde das Ergebnis aus Gl. (A.170) übernommen.

Die eben durchgeführte Rechnung kann anschaulich interpretiert werden, denn der Projektionsoperator $\hat{E}(x_i) - \hat{E}(x_{i-1})$, der beim Ortsoperator in das Stieltjes-Integral Gl. (A.172) eingeht, hat eine einfache Bedeutung. Wenn man ihn auf eine beliebige Funktion $f(x)$ anwendet, liefert er eine neue Funktion $\tilde{f}(x)$,

$$\tilde{f}(x) := \begin{cases} f(x) & \text{wenn } x \in (x_{i-1}, x_i) \\ 0 & \text{sonst} \end{cases},$$

die im Intervall (x_{i-1}, x_i) mit $f(x)$ übereinstimmt und ansonsten Null ist. Der Projektionsoperator schneidet sozusagen ein Intervall aus der Funktion heraus. Wenn man diese Funktionsstücke aller Intervalle wieder zusammensetzt, erhält man natürlich wieder die ursprüngliche Funktion. So erhält man auch den Einheitsoperator $\hat{1} = \sum_i (\hat{E}(x_i) - \hat{E}(x_{i-1}))$. Ebenso sieht man leicht ein, dass mit abnehmenden Intervallbreiten das Spektraltheorem gilt

$$\sum_{i=1}^n x_i (\hat{E}(x_i) - \hat{E}(x_{i-1})) \Psi(x) \xrightarrow{n \rightarrow \infty} x \Psi(x).$$

A.10.2 Erweiterter Hilbertraum

Die Diracsche Bra- und Ket-Formulierung benötigt im Unterschied zur von Neumannschen Formulierung eine Erweiterung des Hilbertraumes, so dass auch Vektoren unendlicher Norm konsistent behandelt werden können. Sie hat den Vorteil, dass sie einfacher zu handhaben ist und man sich in vielen praktischen Rechnungen weniger mit mathematischen Subtilitäten herumschlagen muss.

Wir benötigen die folgende Definitionen, die der Einfachheit halber mit diskreten Indizes geschrieben sind:

Def. A.30 (Konjugierter Raum). *Der zu einem Vektorraum \mathcal{V} konjugierte Raum \mathcal{V}^* ist die Menge aller Vektoren $|g\rangle = \sum_n g_n |e_n\rangle$, deren Skalarprodukt mit Vektoren aus \mathcal{V} endlich ist:*

$$\langle f|g\rangle < \infty \quad \text{für alle } |f\rangle \in \mathcal{V}$$

(d.h.: $\sum_n f_n^* g_n < \infty$), und für die $\langle f|$ ein stetiges Funktional auf \mathcal{V}^* ist.

Es gilt

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}^*, \quad (\text{A.175})$$

d.h. ein Hilbertraum \mathcal{H} ist zu sich selbst konjugiert.

Wir definieren nun den Raum \mathcal{W} aller Vektoren der Form $|\omega\rangle = \sum_n \omega_n |e_n\rangle$ als einen Unterraum von \mathcal{H} , in dem die Koeffizienten extrem schnell konvergieren:

$$\sum_n |\omega_n|^2 n^m < \infty \quad \forall m \in \mathbb{N}_0 \quad .$$

Der dazu konjugierte Raum \mathcal{W}^* enthält nach Def. alle Vektoren, deren Skalarprodukt mit Vektoren aus $\overline{\mathcal{W}}$ endlich ist, also Vektoren $|\nu\rangle = \sum_n \nu_n |e_n\rangle$ mit

$$\langle \omega|\nu\rangle = \sum_n \omega_n^* \nu_n < \infty \quad \forall |\omega\rangle \in \mathcal{W}$$

Offensichtlich ist \mathcal{W}^* wesentlich größer als \mathcal{W} , denn es sind auch Vektoren enthalten, deren Entwicklungskoeffizienten $\overline{}$ so schnell wie eine beliebige

A.10. Der Hilbertraum

Potenz von n für $n \rightarrow \infty$ ansteigen. \mathcal{W}^* heißt erweiterter Hilbertraum (rigged Hilbert space), und es gilt

$$\mathcal{W} \subset \mathcal{H} = \mathcal{H}^* \subset \mathcal{W}^*$$

Im kontinuierlichen Ortsraum ist der Raum \mathcal{W} durch die Funktionen $\Psi(x)$ gegeben, die

$$\int |\Psi(x)|^2 (1 + |x|)^m dx < \infty \quad \forall m = 0, 1, 2, \dots \quad (\text{A.176})$$

erfüllen. Der Raum \mathcal{W}^* besteht aus den Funktionen $\chi(x)$, für die gilt

$$\left| \int \Psi(x)^* \chi(x) dx \right| < \infty \quad \forall \Psi(x) \in \mathcal{W}. \quad (\text{A.177})$$

Dieser Raum \mathcal{W}^* enthält zusätzlich zu den quadratintegralen Funktionen auch solche, die nicht schneller als eine beliebige Potenz von x divergieren.

Insbesondere enthält er e^{ikx} , die Eigenfunktion des Operators $-i \frac{d}{dx}$, sowie die δ -Distribution, die Eigenfunktion des Ortsoperators \hat{Q} .

Es kann gezeigt werden, dass für jeden selbstadjungierten Operator \hat{A} in \mathcal{H} ein vollständiger Satz von Eigenvektoren in \mathcal{W}^* existiert, und damit eine vollständige orthonormale Basis. Mit dieser Erweiterung des Hilbertraums kann der Bra-Ket-Formalismus auch in kontinuierlichen Räumen angewendet werden.

Die Spektraldarstellung für den Ortsoperator hat dann die vertraute Form

$$\hat{Q} = \int_{-\infty}^{\infty} x |x\rangle \langle x| dx \quad . \quad (\text{A.178})$$

Gleichung (A.178) korrespondiert direkt zum Spektraltheorem Gl. (A.173), wenn man den Projektionsoperator $|x\rangle \langle x|$ auf die nicht-normierbaren Zustände $|x\rangle$ zulässt, denn aus $\frac{d}{dx} \Theta(y-x) = \delta(y-x)$ ergibt sich $\frac{d\hat{E}(x)}{dx} = |x\rangle \langle x|$. Diese Ableitung und dieser Projektionsoperator sind nur mit Hilfe des erweiterten Hilbertraums möglich.

A.11 Singulärwertzerlegung

Die Singulärwertzerlegung (Singular Value Decomposition, SVD) einer Matrix ist ein sehr wichtiges Werkzeug der linearen Algebra, mit vielen Anwendungen, neben der Quantenmechanik z.B. auch bei der Bildverarbeitung, bei Optimierungen etc.

Die SVD dient unter anderem dazu, „wichtige“ Teile einer Matrix von „unwichtigen“ zu trennen. Sie ist mit der vertrauten Eigenwertzerlegung verwandt (s.u.). Im allgemeinen ist die SVD aber eine andere Zerlegung. Insbesondere ist sie für jede reelle oder komplexe Matrix möglich!

A.11.1 Kompakte SVD

Jede reelle oder komplexe $n \times m$ Matrix M kann in der Form

$$\boxed{M = U D V^\dagger} \quad (\text{A.179})$$

zerlegt werden, mit einer diagonalen Matrix D , die nur positive reelle Zahlen (oder Null) enthält, die sogenannten Singulärwerte von M . Die Matrix D hat die Dimension $N = \min(n, m)$. Außerdem gilt

$$\underline{U^\dagger U = \hat{1}}, \quad \underline{V^\dagger V = \hat{1}}, \quad D = \begin{pmatrix} \lambda_1 & & & & & \\ & \ddots & & & & \\ & & \lambda_r & & & \\ & & & 0 & & \\ & & & & \ddots & \\ & & & & & 0 \end{pmatrix}, \quad (\text{A.180})$$

$$\lambda_1 \geq \lambda_2 \geq \dots \geq \lambda_r > \lambda_{r+1} = \dots = \lambda_N = 0. \quad (\text{A.181})$$

Die Zahl r von nicht-negativen Einträgen λ heißt Rang der Matrix M .

• Fall $m \leq n$: $\boxed{M} = \boxed{U} \boxed{D} \boxed{V^\dagger}$

• Fall $m \geq n$: $\boxed{M} = \boxed{U} \boxed{D} \boxed{V^\dagger}$

A.11. Singulärwertzerlegung

- Wenn M reell ist, dann können U und V auch reell gewählt werden.
- Wenn M reell und quadratisch ist, dann sind U and V^\dagger Drehungen (Basistransformationen) und D skaliert die Richtungen.
- Diese Version der SVD, mit im allgemeinen nicht-quadratischen Matrizen U und V^\dagger , heißt auch „thin SVD“.
- Die Singulärwerte sind eindeutig.
- Die Matrizen U und V^\dagger sind aber nicht eindeutig: Bei einem nicht entarteten Singulärwert λ_j kann man die Matrix U von rechts mit einer Diagonalmatrix multiplizieren, bei der die Komponente j durch $\exp(i\varphi_j)$ ersetzt ist, und V^\dagger entsprechend von links mit $\exp(-i\varphi_j)$, ohne M zu ändern.
- Wenn zwei oder mehr Singulärwerte gleich sind, ist analog die SVD in dem entsprechenden Unterraum nicht eindeutig. Man kann in diesem Unterraum eine unitäre Transformation $\hat{\mathbb{1}} = X X^\dagger$ durchführen, d.h. U dort von rechts mit X und V^\dagger von links mit X^\dagger multiplizieren.

A.11.2 SVD als Summe von äußeren Produkten

Die Singulärwertzerlegung $M = UDV^\dagger$ kann äquivalent als

$$M_{ij} = \sum_k \lambda_k U_{ik} (V^\dagger)_{kj} = \sum_k \lambda_k u_i^{(k)} v_j^{(k)}. \quad (\text{A.182})$$

geschrieben werden. Hier sind $u_i^{(k)} = U_{ik}$ und $v_i^{(k)} = V_{ik}$, $i = 1, \dots, m$; $k = 1, \dots, N = \min(m, n)$ die Spaltenvektoren von U and V (nicht von V^\dagger). Die Eigenschaft $U^\dagger U = V^\dagger V = \mathbb{1}$ impliziert, dass sie orthonormal sind. In Vektorschreibweise lautet die SVD dann

$$\text{(ganze Matrix)} \left(M_{ij} \right) = \sum_k \lambda_k \underline{\vec{u}^{(k)}} \times \underline{\vec{v}^{(k)T}} = \sum_k \left(\begin{matrix} \lambda_k \\ \vdots \end{matrix} \right) \times \left(\begin{matrix} \vec{u}^{(k)} \\ \vec{v}^{(k)T} \end{matrix} \right) \quad \text{mal lambda}_k \quad (\text{A.183})$$

Dies ist eine Summe von *äußeren Produkten* der Vektoren $\vec{u}^{(k)}$ und $\vec{v}^{(k)}$, gewichtet mit λ_k .

Die Vektoren $\vec{u}^{(k)}$ und $\vec{v}^{(k)}$ heißen links- und rechts-seitige Singulärvektoren von M . Die SVD zusammen mit $V^\dagger V = \mathbb{1}$ impliziert

$$M \vec{v}^{(k)} = \lambda_k \vec{u}^{(k)} \quad \text{und} \quad M^\dagger \vec{u}^{(k)} = \lambda_k \vec{v}^{(k)} .$$

A.11.3 Zusammenhang mit der Eigenwertzerlegung

- Eine Singulärwertzerlegung existiert für jede Matrix, mit immer positiven Singulärwerten. Dagegen gibt es eine Eigenwertzerlegung nicht für jede Matrix, und Eigenwerte brauchen nicht reell oder positiv zu sein.
- Wenn M quadratisch ist und alle Eigenwerte ≥ 0 sind, dann ist die Eigenwertzerlegung $M = UDU^\dagger$ dieselbe wie die SVD.
- Aus der SVD für eine beliebige Matrix M folgt die Eigenwertzerlegung für die hermiteschen Matrizen $M^\dagger M$ und MM^\dagger :

$$\underline{M^\dagger M} = (UDV^\dagger)^\dagger UDV^\dagger = \underline{VD^\dagger U^\dagger} UDV^\dagger = V \begin{pmatrix} \lambda_1^2 & & \\ & \lambda_2^2 & \\ & & \dots \end{pmatrix} V^\dagger .$$

Analog

$$\underline{MM^\dagger} = UDV^\dagger (UDV^\dagger)^\dagger = UDV^\dagger \underline{VD^\dagger U^\dagger} = U \begin{pmatrix} \lambda_1^2 & & \\ & \lambda_2^2 & \\ & & \dots \end{pmatrix} U^\dagger .$$

Die diagonalisierten Formen von $M^\dagger M$ und MM^\dagger enthalten somit die Quadrate der Singulärwerte auf der Diagonalen.

A.11. Singulärwertzerlegung

A.11.4 Darstellung der SVD mit quadratischen Transformationsmatrizen (unitären)

Wenn M nicht quadratisch ist, dann ist in der Zerlegung $M = UDV^\dagger$ entweder U or V^\dagger nicht quadratisch. Alternativ kann man die SVD mit unitären quadratischen Matrizen \tilde{U} und \tilde{V} schreiben:

$$\underline{M} = UDV^\dagger = \underline{\tilde{U}\tilde{D}\tilde{V}^\dagger} \quad (\text{A.184})$$

Man kann diese Zerlegung als eine Basistransformation mit \tilde{V}^\dagger interpretieren, gefolgt von einer Umwichtung der Richtungen mit \tilde{D} und einer weiteren Basistransformation mit \tilde{U} . Wenn M $m \times n$ dimensional ist, dann ist \tilde{U} $m \times m$, \tilde{D} ist $m \times n$, und \tilde{V}^\dagger ist $n \times n$ dimensional.

• Fall $m \leq n$:

$$\boxed{M} = \boxed{U} \boxed{D \mid 0 \ 0 \ 0} \begin{array}{|c} \hline V^\dagger \\ \hline \text{(Rest)} \\ \hline \end{array}$$

In diesem Fall gilt $\tilde{U} = U$. Die unteren Zeilen von \tilde{V}^\dagger enthalten weitere Eigenvektoren, zusätzlich zu denen in V^\dagger . Sie tragen wegen der Nullen in \tilde{D} nicht zu M bei. ~~Da die Eigenvektoren in V^\dagger orthogonal sind,~~ ergibt die Anwendung von M auf diese neuen Eigenvektoren Null, d.h. sie gehören zum Kern („null space“) von M . Die Richtungen jenseits des Rangs r der Matrix, mit verschwindenden Singulärwerten $\lambda_{j>r} = 0$, gehören ebenfalls zum Kern von M . Wenn man die Wirkung von M im gesamten Vektorraum betrachtet, kann der Unterraum des Kerns (null space) ignoriert werden (s.u.).

• Fall $m \geq n$:

$$\boxed{M} = \begin{array}{|c} U \\ \hline \text{(Rest)} \end{array} \begin{array}{|c} D \\ \hline 0 \end{array} \boxed{V^\dagger}$$

Jetzt ist $\tilde{V} = V$.

A.11.5 Pseudoinverse

Wir diskutieren zunächst den Fall einer quadratischen Matrix M . Formal ist die Inverse durch

$$\underline{M^{-1}} = (\underline{\tilde{U} \tilde{D} \tilde{V}^\dagger})^{-1} = \underline{\tilde{V} \tilde{D}^{-1} \tilde{U}^\dagger}, \tag{A.185}$$

gegeben, da \tilde{U} und \tilde{V} unitär sind. Die Matrix \tilde{D} kann aber Singulärwerte $\lambda_{j>r} = 0$ enthalten. In diesen Richtungen j ergibt die Anwendung von M Null, d.h. diese Richtungen des Vektorraums sind von M nicht betroffen, und die Inverse \tilde{D}^{-1} würde unendlich große Werte enthalten.

Es ist viel besser, diesen Unterraum (Kern, null space) auch bei der Inversen wegzulassen, d.h. dort \tilde{D}^{-1} auf Null zu setzen statt auf unendlich. Die resultierende Matrix nennt man die (Moore-Penrose) Pseudoinverse.

$$\underline{\lambda_j \mapsto \frac{1}{\lambda_j}, \text{ aber } 0 \mapsto 0.} \tag{A.186}$$

In der Praxis ist es wichtig, auch schon Singulärwerte unterhalb einer gewissen Schwelle (z.B. 10^{-10}) auf Null abzubilden, um in der Pseudoinversen nicht sehr große Einträge an eigentlich unwichtigen Stellen zu erhalten.

Bei Benutzung der Pseudoinversen wird aus $M^{-1}M$ die Matrix

$$\underline{M^{-1}M} = \underline{\tilde{V} \tilde{D}^{-1} \tilde{U} \tilde{U}^\dagger \tilde{D} \tilde{V}^\dagger} = \underline{\begin{pmatrix} 1 & & & & & \\ & \ddots & & & & \\ & & 1 & & & \\ & & & 0 & & \\ & & & & \ddots & \\ & & & & & 0 \end{pmatrix}} = \dots = \underline{M M^{-1}} \tag{A.187}$$

in welcher nur die ersten r Komponenten (oder wegen der Schwelle noch weniger) der Einheitsmatrix entsprechen, während der Rest verschwindet.

Dieselben Überlegungen kann man auch auf den Fall anwenden, dass M nicht quadratisch ist, $n > m$ oder $m > n$. Dann ist $M^{-1}M$ eine $n \times n$ Matrix, und MM^{-1} ist $m \times m$ dimensional. Sie sind beide von der Form eq. A.187.

A.11. Singulärwertzerlegung

A.11.6 Anwendungen

Der numerische Aufwand zur Berechnung der SVD ist $\mathcal{O}(\max(n, m)^3)$, ähnlich einer Matrixdiagonalisierung.

Viele Anwendungen der SVD verwenden die Zerlegung, um die Größe der Matrix M zu reduzieren („truncation“), indem kleine Singulärwerte unterhalb einer gewählten Schwelle auf Null gesetzt werden. Dadurch erhält man eine *Näherung* für M , die oft sehr gut ist, obwohl sie *sehr* viel weniger Komponenten enthält und daher mit sehr viel weniger Rechenaufwand und Speicherplatz weiterverarbeitet werden kann.

Zu den Beispielen gehören die Bildverarbeitung, Signalverarbeitung, Optimierungen, die Quanteninformationstheorie, stark korrelierte Quantensysteme, und viele andere.

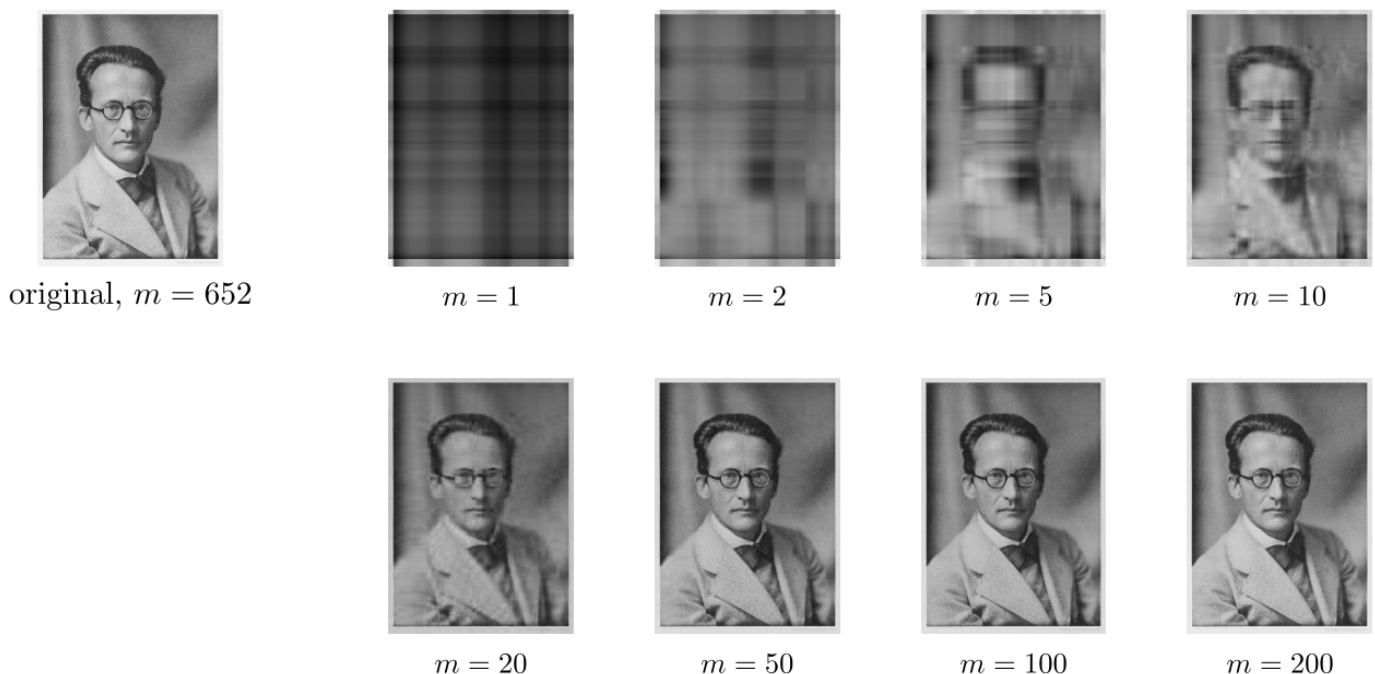


Figure I.B.8. Compressed images¹⁰⁸ of Erwin Schrödinger. Shown are various compressions where the original image was decomposed with an SVD into three matrices and multiplied back again.

Aus:

Florian Maislinger,
Non-Equilibrium Approaches to Strongly Interacting Many Body Systems
Ph.D. Tesis, TU Graz 2021.

A.12 Ergänzungen

Dieser Abschnitt enthält einige Beziehungen, die in den Übungen gezeigt worden sind, sowie eine zusammenfassende Darstellung der Behandlung von reinen Zuständen mit mehreren Freiheitsgraden (s.a. Kap. 9.5).

A.12.1 Kommutatoren

Ergänzend zu Kap. A.3.4:

- a) Spur $[\hat{A}, \hat{B}] = 0$
- b) $[\hat{A}, \hat{B}\hat{C}] = [\hat{A}, \hat{B}]\hat{C} + \hat{B}[\hat{A}, \hat{C}]$
- c) $[\hat{A}, [\hat{B}, \hat{C}]] + [\hat{C}, [\hat{A}, \hat{B}]] + [\hat{B}, [\hat{C}, \hat{A}]] = 0$

Die gleichen Beziehungen gelten für die Darstellungen der Operatoren in einer Basis, in Form von $n \times n$ Matrizen.

A.12.2 Baker-Hausdorff-Formeln

- a) $e^{\hat{A}} e^{\hat{B}} = e^{\hat{A} + \hat{B} + \frac{1}{2}[\hat{A}, \hat{B}] + O(\hat{K})}$
- b) $e^{\hat{A}} e^{\hat{B}} = e^{\hat{A} + \hat{B}} e^{\frac{1}{2}[\hat{A}, \hat{B}] + O(\hat{K})}$
- c) $e^{\hat{A}} \hat{C} e^{-\hat{A}} = \hat{C} + [\hat{A}, \hat{C}] + \frac{1}{2!}[\hat{A}, [\hat{A}, \hat{C}]] + \frac{1}{3!}[\hat{A}, [\hat{A}, [\hat{A}, \hat{C}]]] + \dots$

\hat{K} steht abkürzend für Terme mit Vielfach-Kommutatoren wie z.B. $[\hat{A}, [\hat{A}, \hat{B}]]$.

A.12.3 Hellman-Feynman-Theorem

\hat{H}_λ sei ein hermitescher Operator, der von einem Parameter λ abhängt. Seine normierten Eigenzustände seien $|\psi_\lambda\rangle$, mit $\hat{H}_\lambda|\psi_\lambda\rangle = E_\lambda|\psi_\lambda\rangle$. Es gilt

$$\frac{d}{d\lambda} E_\lambda \equiv \frac{d}{d\lambda} \langle \psi_\lambda | \hat{H}_\lambda | \psi_\lambda \rangle = \langle \psi_\lambda | \left(\frac{d}{d\lambda} \hat{H}_\lambda \right) | \psi_\lambda \rangle .$$

A.12. Ergänzungen

A.12.4 Reine Zustände mit mehreren Freiheitsgraden

Reale physikalische Systeme besitzen sehr viele Freiheitsgrade. Dazu gehören in der Ortsraumbasis die drei Ortskoordinaten für jedes Teilchen, sowie z.B. Spinfreiheitsgrade.

Allgemeiner: wenn $\{|e_A\rangle\}$, $\{|e_B\rangle\}$, ... orthonormale Basisvektoren zum Freiheitsgrad A, B, \dots sind (z.B. $\{|x\rangle\}$, $\{|y\rangle\}$, ...), dann sind, wie schon in Kap. (4.4) angesprochen,

$$|e_A, e_B, \dots\rangle \equiv |e_A\rangle \otimes |e_B\rangle \dots \equiv |e_A\rangle |e_B\rangle \dots \quad (\text{A.188})$$

die Basiszustände des gesamten Hilbertraums, mit dem Skalarprodukt

$$\langle e_A, e_B, \dots | e_{A'}, e_{B'}, \dots \rangle = \langle e_A | e_{A'} \rangle \cdot \langle e_B | e_{B'} \rangle \dots = \delta_{A,A'} \delta_{B,B'} \dots, \quad (\text{A.189})$$

und ein allgemeiner reiner Zustand des Hilbertraums ist eine Linearkombination der Basisvektoren. Der Operator

$$|e_A, e_B, \dots\rangle \langle e_A, e_B, \dots|$$

ist ein Projektionsoperator auf einen Basiszustand, und die Summe über alle diese Projektionsoperatoren ergibt wie immer den Einheitsoperator im gesamten Hilbertraum:

$$\sum_A \sum_B \sum_{\dots} |e_A, e_B, \dots\rangle \langle e_A, e_B, \dots| = \hat{\mathbb{1}}. \quad (\text{A.190})$$

Ein Operator \hat{O}_A , der nur in einem der Teilräume wirkt

$$\hat{O}_A |e_A, e_B, \dots\rangle = (\hat{O}_A |e_A\rangle) \otimes |e_B\rangle \otimes \dots \quad (\text{A.191})$$

hat dann bezüglich der Basisvektoren die Matrixelemente

$$\langle e_A, e_B, \dots | \hat{O}_A |e_{A'}, e_{B'}, \dots \rangle = \langle e_A | \hat{O}_A |e_{A'} \rangle \cdot \underbrace{\langle e_B | e_{B'} \rangle}_{\delta_{B,B'}} \dots \quad (\text{A.192})$$

Im allgemeinen Fall wirkt aber ein Operator, etwa der Hamiltonoperator, auf mehrere (viele) Freiheitsgrade und kann dabei z.B. verschränkte Zustände wie

$$\frac{1}{\sqrt{2}} (|Ort_1, Spin_1\rangle + |Ort_2, Spin_2\rangle) \quad (\text{A.193})$$

erzeugen. In diesem Zustand sind Ort und Spin korreliert (verschränkt), wie z.B. beim Stern-Gerlach-Experiment.

Tensorprodukt der Unterräume, die jeweils von den Basisvektoren aufgespannt werden, die zu den einzelnen Freiheitsgraden gehören

A.13 Weitere Ergänzungen (2019)

A.13.1 Allgemeiner Zeitentwicklungsoperator, Dyson-Reihe

Dies ist eine Ergänzung zu Kap. 3.1 und Kap. 5.4.1. In Kap. 3.1 haben wir die Schrödingergleichung für den Zeitentwicklungsoperator

$$i\hbar \frac{d}{dt} \hat{U}(t, t_0) = \hat{H} \cdot \hat{U}(t, t_0) \quad (3.5)$$

für den Fall kommutierender Hamiltonoperatoren gelöst, mit dem Ergebnis

$$\hat{U}(t, t_0) = e^{-\frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t \hat{H}(\tau) d\tau}, \quad (3.9)$$

und bei zeitunabhängigem \hat{H} speziell $\hat{U}(t, t_0) = e^{-\frac{i}{\hbar}(t-t_0)\hat{H}}$.

Wir behandeln jetzt den allgemeinen Fall, bei dem die Hamiltonoperatoren auch nicht-vertauschend sein dürfen. Die o.a. Schrödingergleichung (3.5), zusammen mit $\hat{U}(t_0, t_0) = \hat{1}$, hat die formale Lösung

$$\hat{U}(t, t_0) = \hat{1} + \frac{-i}{\hbar} \int_{t_0}^t dt_1 \hat{H}(t_1) \hat{U}(t_1, t_0).$$

Hier taucht auf der rechten Seite $\hat{U}(t_1, t_0)$ auf, für das man dieselbe Gleichung wieder verwenden kann:

$$\hat{U}(t, t_0) = \hat{1} + \frac{-i}{\hbar} \int_{t_0}^t dt_1 \hat{H}(t_1) \hat{U}(t_1, t_0) + \left(\frac{-i}{\hbar}\right)^2 \int_{t_0}^t dt_1 \int_{t_0}^{t_1} dt_2 \hat{H}(t_1) \hat{H}(t_2) \hat{U}(t_2, t_0).$$

Weiteres rekursives Einsetzen ergibt die

VON NEUMANSCHER REIHE FÜR DEN ZEITENTWICKLUNGSOPERATOR

$$\hat{U}(t, t_0) = \hat{1} + \sum_{n=1}^{\infty} \hat{U}^{(n)}(t, t_0), \quad \text{mit} \quad (A.194)$$

$$\hat{U}^{(n)}(t, t_0) = \left(\frac{-i}{\hbar}\right)^n \int_{t_0}^t dt_1 \int_{t_0}^{t_1} dt_2 \dots \int_{t_0}^{t_{n-1}} dt_n \hat{H}(t_1) \hat{H}(t_2) \dots \hat{H}(t_n).$$

Die Rekursion sorgt hier für Integrationsgrenzen mit einer Zeitordnung:

$$t \geq t_1 \geq t_2 \geq \dots \geq t_n \geq t_0. \quad (A.195)$$

A.13. Weitere Ergänzungen (2019)

Der Hamiltonoperator mit der kleinsten Integrationszeit t_n steht in der Reihe ganz rechts und wirkt somit zuerst.

Gleichung (A.194) ist schon das Ergebnis für den Zeitentwicklungsoperator. Im Rest von Kap. A.13.1 schreiben wir es noch auf andere leicht veränderte Arten, die häufig verwendet werden.

Man kann insbesondere die von Neumann Reihe kompakter formulieren, mit Hilfe eines nach seinem Erfinder Freeman Dyson (*1923) benannten Operators:

<u>DYSONSCHER ZEITORDNUNGSOPERATOR</u>	
$\mathcal{T}(\hat{H}(t_1) \hat{H}(t_2)) := \begin{cases} \hat{H}(t_1) \hat{H}(t_2) & \text{wenn } t_1 > t_2, \\ \hat{H}(t_2) \hat{H}(t_1) & \text{wenn } t_2 > t_1 \end{cases} \quad (\text{A.196})$	

Die Verallgemeinerung auf Produkte vieler Operatoren ist analog: \mathcal{T} ordnet Operatoren nach der Reihenfolge ihrer Zeitargumente, mit der kleinsten Zeit rechts. In der von Neumann-Reihe (A.194) stehen die Operatoren schon in dieser Reihenfolge:

$$\hat{H}(t_1)\hat{H}(t_2)\dots\hat{H}(t_n) = \mathcal{T}(\hat{H}(t_1)\hat{H}(t_2)\dots\hat{H}(t_n)).$$

Wir können daher in (A.194) den Zeitordnungoperator hinzuschreiben:

$$\hat{U}^{(n)}(t, t_0) = \left(\frac{-i}{\hbar}\right)^n \int_{t_0}^t dt_1 \int_{t_0}^{t_1} dt_2 \dots \int_{t_0}^{t_{n-1}} dt_n \mathcal{T}(\hat{H}(t_1)\hat{H}(t_2)\dots\hat{H}(t_n)).$$

Man beachte, dass die Reihenfolge der Operatoren im Argument von \mathcal{T} das Ergebnis nicht ändert. $U^{(n)}$ ist deswegen von der Form

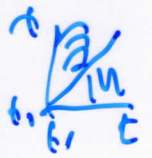
$$S^{(n)} := \int_{t_0}^t dt_1 \int_{t_0}^{t_1} dt_2 \dots \int_{t_0}^{t_{n-1}} dt_n \underline{K(t_1, t_2, \dots, t_n)},$$

wobei K symmetrisch in der Reihenfolge seiner Argumente ist. Wir betrachten nun

$$I^{(n)} := \int_{t_0}^t dt_1 \int_{t_0}^{t_1} dt_2 \dots \int_{t_0}^{t_{n-1}} dt_n K(t_1, t_2, \dots, t_n),$$

bei dem alle Integrale von t_0 bis t gehen. Der Integrationsbereich kann in $n!$ Unterbereiche mit verschiedenen Permutationen wie $t_1 \geq t_2 \geq \dots \geq t_n$, oder $t_2 \geq t_1 \geq \dots \geq t_n$ etc. aufgeteilt werden. Wegen der Symmetrie von K ist das Ergebnis in jedem Integrationsbereich dasselbe. Es gilt deswegen $I^{(n)} = n! S^{(n)}$. Wir können daher auch $U^{(n)}$ wie $I^{(n)}$ mit lauter gleichen Integrationsintervallen schreiben, wenn wir um den Faktor $n!$ korrigieren:

$$\hat{U}^{(n)}(t, t_0) = \frac{1}{n!} \left(\frac{-i}{\hbar} \right)^n \int_{t_0}^t dt_1 \int_{t_0}^{t_1} dt_2 \dots \int_{t_0}^{t_{n-1}} dt_n \mathcal{T}(\hat{H}(t_1) \hat{H}(t_2) \dots \hat{H}(t_n))$$



und erhalten mit $\hat{U}(t, t_0) = \hat{\mathbb{1}} + \sum_{n=1}^{\infty} \hat{U}^{(n)}(t, t_0)$ eine zur von Neumann Reihe (A.194) äquivalente

KOMPACTE FORM DES ZEITENTWICKLUNGSOPERATORS

$$\hat{U}(t, t_0) = \mathcal{T} e^{-\frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t \hat{H}(\tau) d\tau} \tag{A.197}$$

$$\equiv \hat{\mathbb{1}} + \sum_{n=1}^{\infty} \hat{U}^{(n)}(t, t_0),$$

$$\hat{U}^{(n)}(t, t_0) = \frac{1}{n!} \left(\frac{-i}{\hbar} \right)^n \int_{t_0}^t dt_1 \int_{t_0}^{t_1} dt_2 \dots \int_{t_0}^{t_{n-1}} dt_n \mathcal{T}(\hat{H}(t_1) \hat{H}(t_2) \dots \hat{H}(t_n))$$

für beliebige zeitabhängige Hamiltonoperatoren. Diese Form unterscheidet sich formal vom Ergebnis (3.9) für kommutierende $\hat{H}(\tau)$ nur durch den Zeitordnungsoperator. Zum Merken: Die Exponentialfunktion ist wie immer über ihre Potenzreihe definiert. Der Operator \mathcal{T} ordnet die dabei auftretenden Hamiltonoperatoren der Zeit nach, mit den kleinsten Zeiten ganz rechts.

Zugang über stückweise Integration

Wir können zum selben Ergebnis auch auf eine andere Art kommen, die für manche Anwendungen nützlicher ist. Wir spalten das Intervall von t_0 bis t in n kleine Teile der Länge $\Delta = (t - t_0)/n$ auf, wobei wir am Ende den Limes $n \rightarrow \infty$ betrachten. Innerhalb jedes (am Ende infinitesimal großen) Intervalls behandeln wir $\hat{H}(t)$ als konstant, d.h. $\hat{H}(t) = \hat{H}(t_j)$,

A.13. Weitere Ergänzungen (2019)

wobei t_j (z.B.) das Ende des entsprechenden Zeitintervalls ist. Der Zeitentwicklungsoperator von t_{j-1} bis t_j ist dann einfach $e^{-\frac{i}{\hbar}\Delta\cdot\hat{H}(t_j)}$ und der gesamte Zeitentwicklungsoperator wird zu

$$\hat{U}(t, t_0) = \lim_{n \rightarrow \infty} \underbrace{e^{-\frac{i}{\hbar}\Delta\cdot\hat{H}(t_n)}}_{\text{green}} \underbrace{e^{-\frac{i}{\hbar}\Delta\cdot\hat{H}(t_{n-1})}}_{\text{green}} \dots \underbrace{e^{-\frac{i}{\hbar}\Delta\cdot\hat{H}(t_2)}}_{\text{green}} \underbrace{e^{-\frac{i}{\hbar}\Delta\cdot\hat{H}(t_1)}}_{\text{green}}. \quad (\text{A.198})$$

(Die Nummerierung ist anders als zuvor; hier ist jetzt t_1 die kleinste Zeit.)
Man beachte, dass (A.198) für jeden Wert von n unitär ist, während dies bei einer mit endlicher Ordnung abgebrochenen von Neumann-Reihe nicht der Fall ist.

Die Zeiten in (A.198) sind wie zuvor geordnet, mit den kleinsten Werten ganz rechts. Wir könnten daher die rechte Seite auch mit einem zusätzlichen Zeitordnungsoperator schreiben. Wir nutzen nun wieder aus, dass beim Zeitordnungsoperator die Reihenfolge der Operatoren im Argument egal ist, $\mathcal{T}(\hat{H}(t_i)\hat{H}(t_j)) = \mathcal{T}(\hat{H}(t_j)\hat{H}(t_i))$, so dass sie als kommutierend behandelt werden können. Deswegen gilt auch

$$\mathcal{T}\left(\underbrace{e^{-\frac{i}{\hbar}\Delta\cdot\hat{H}(t_i)}}_{\text{blue}} \underbrace{e^{-\frac{i}{\hbar}\Delta\cdot\hat{H}(t_j)}}_{\text{blue}}\right) = \mathcal{T}\left(\underbrace{e^{-\frac{i}{\hbar}\Delta\cdot\hat{H}(t_j)}}_{\text{blue}} \underbrace{e^{-\frac{i}{\hbar}\Delta\cdot\hat{H}(t_i)}}_{\text{blue}}\right).$$

Dies können wir für das ganze Produkt (A.198) ausnutzen und wir erhalten in der Tat wieder das Ergebnis (A.197):

$$\hat{U}(t, t_0) = \lim_{n \rightarrow \infty} \mathcal{T} e^{-\frac{i}{\hbar} \sum_{j=1}^n \Delta \cdot \hat{H}(t_j)} = \mathcal{T} e^{-\frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t \hat{H}(\tau) d\tau}. \quad (\text{A.199})$$

Wechselwirkungsbild

In Kap. 5.4.1 hatten wir das Wechselwirkungsbild eingeführt, mit

$$\hat{H}(t) = \hat{H}_0 + \hat{H}_1(t).$$

Der Zustandsvektor im Wechselwirkungsbild

$$|\Psi^I(t)\rangle \equiv \hat{U}_0^\dagger |\Psi^S(t)\rangle$$

gehört der Schrödingergleichung

$$i\hbar \frac{d}{dt} |\Psi^I(t)\rangle = \hat{H}_1^I(t) |\Psi^I(t)\rangle,$$

wobei $\hat{U}_0 \equiv e^{-\frac{i}{\hbar}(t-t_0)\hat{H}_0}$ und

$$\hat{H}_1^I(t) \equiv \hat{U}_0^\dagger \hat{H}_1^S(t) \hat{U}_0. \quad (\text{A.200})$$

Man kann auch hier einen Zeitentwicklungsoperator definieren, über

$$|\Psi^I(t)\rangle = \hat{U}^I(t, t_0) |\Psi^I(0)\rangle. \quad (\text{A.201})$$

Aus der Schrödingergleichung für $|\psi^I(t)\rangle$ folgt dann direkt die Schrödingergleichung für $\hat{U}^I(t, t_0)$:

$$i\hbar \frac{d}{dt} \hat{U}^I(t, t_0) = \hat{H}_1^I(t) \hat{U}^I(t, t_0), \quad (\text{A.202})$$

direkt analog zur zu Beginn dieses Abschnitts behandelten Gl. (3.5) im Schrödingerbild.

Wir können daher die Ergebnisse (A.194) und (A.197) analog übernehmen. Wir erhalten die *Störungsreihe* oder

DYSON-REIHE FÜR DEN ZEITENTWICKLUNGSOPERATOR

$$\hat{U}^I(t, t_0) = \mathcal{T} e^{-\frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t \hat{H}_1^I(\tau) d\tau} = \hat{\mathbb{1}} + \sum_{n=1}^{\infty} \hat{U}^{(I,n)}(t, t_0), \quad (\text{A.203})$$

$$\hat{U}^{(I,n)}(t, t_0) = \left(\frac{-i}{\hbar}\right)^n \int_{t_0}^t dt_1 \int_{t_0}^{t_1} dt_2 \dots \int_{t_0}^{t_{n-1}} dt_n \hat{H}_1^I(t_1) \hat{H}_1^I(t_2) \dots \hat{H}_1^I(t_n),$$

(hier geschrieben mit unterschiedlichen Integrationsgrenzen, und ohne 1/n! Faktor, so wie in (A.194))

die genauso aussieht wie (A.197), nur mit \hat{H}_1^I statt \hat{H} . Dieses Ergebnis entspricht Gl. (5.52) und (5.54), mit den Beispielen (5.55) und (5.56) für die erste und zweite Ordnung.

Wenn man die Definition (A.200) von \hat{H}_1^I einsetzt, dann wird der Integrand in der letzten Zeile von (A.203) zu

$$\underbrace{e^{-\frac{i}{\hbar}(t-t_1)\hat{H}_0}}_{\text{...}} \underbrace{\hat{H}_1^S(t_1)}_{\text{...}} \underbrace{e^{-\frac{i}{\hbar}(t_1-t_2)\hat{H}_0}}_{\text{...}} \underbrace{\hat{H}_1^S(t_2)}_{\text{...}} \underbrace{e^{-\frac{i}{\hbar}(t_2-t_3)\hat{H}_0}}_{\text{...}} \underbrace{\hat{H}_1^S(t_3)}_{\text{...}} \dots \dots \underbrace{\hat{H}_1^S(t_n)}_{\text{...}} \underbrace{e^{-\frac{i}{\hbar}(t_n-t_0)\hat{H}_0}}_{\text{...}} \quad (\text{A.204})$$

und man sieht eine Struktur mit ungestörter Zeitentwicklung, bei der zu n Zeitpunkten der Störoperator \hat{H}_1^S wirkt.

A.13.2 Reellwertige Kombinationen der Kugelflächenfunktionen

Die in Kap. 6.5.5 besprochenen Kugelflächenfunktionen $Y_l^m(\theta, \varphi) = \langle \theta, \varphi | l, m \rangle$ bilden zusammen eine vollständige Basis im Raum aller winkelabhängigen Funktionen. Die $Y_l^m \sim (-1)^m e^{im\varphi} P_l^m(\cos \theta)$ sind wegen des Faktors $e^{im\varphi}$ komplexwertig. Sie sind durch diesen Faktor Eigenfunktionen von $\hat{L}_z \stackrel{\wedge}{=} \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial \varphi}$. Mittels Linearkombinationen $e^{im\varphi} \pm e^{-im\varphi}$ kann man alternativ eine reellwertige Basis $Y_{lm}(\theta, \varphi)$ im Raum der winkelabhängigen Funktionen wählen:⁵

$$Y_{lm} := \begin{cases} \frac{1}{\sqrt{2}} (Y_l^{-m} + (-1)^m Y_l^m) & \text{wenn } m > 0, \\ Y_l^0 & \text{wenn } m = 0, \\ \frac{i}{\sqrt{2}} (Y_l^m - (-1)^m Y_l^{-m}) & \text{wenn } m < 0 \end{cases} \quad (\text{A.205})$$

Mit Magnetfeld: Term mit L im Hamiltonian

Man beachte, dass die Y_{lm} keine Eigenfunktionen von \hat{L}_z mehr sind. Für ein wasserstoffähnliches Atom ohne äußeres Magnetfeld hängen die Eigenenergien nicht von m ab, und daher sind auch Linearkombinationen wie (A.205) Winkelanteile von Eigenfunktionen des Hamiltonoperators. Wenn ein äußeres Magnetfeld vorliegt, ist dies nicht mehr der Fall.

Die Y_{lm} lassen sich leicht in den kartesischen Koordinaten $x = r \sin \theta \cos \varphi$, $y = r \sin \theta \sin \varphi$ und $z = r \cos \theta$ ausdrücken. Beispiele:

$$l = 0 \text{ (s-Orbital)} : Y_{l0} = Y_l^0 = \frac{1}{2\sqrt{\pi}} \approx \text{const.} \quad (\text{A.206})$$

$$l = 1 \text{ (p-Orbitale)} : \begin{aligned} Y_{1,1} &\equiv \underline{p_x} = c \frac{x}{r} \\ Y_{1,-1} &\equiv \underline{p_y} = c \frac{y}{r} \\ Y_{1,0} &\equiv \underline{p_z} = c \frac{z}{r} \end{aligned} \quad (\text{A.207})$$

$$(\text{A.208})$$

⁵Die Namen Y_l^m, Y_{lm} und die Faktoren $(-1)^m$ werden in der Literatur nicht einheitlich verwendet.

$$\begin{aligned}
 Y_{2,2} &\equiv d_{x^2-y^2} = c' \frac{x^2-y^2}{r^2} \\
 Y_{2,1} &\equiv d_{xz} = 2c' \frac{xz}{r^2} \\
 \underline{l = 2 \text{ (d-Orbitale)}}: \quad Y_{2,-1} &\equiv d_{yz} = 2c' \frac{yz}{r^2} \quad (\text{A.209}) \\
 Y_{2,-2} &\equiv d_{xy} = 2c' \frac{xy}{r^2} \\
 Y_{2,0} &\equiv d_{z^2} = c'/\sqrt{3} \frac{3z^2-r^2}{r^2}
 \end{aligned}$$

mit Normierungskonstanten $c = \sqrt{\frac{3}{4\pi}}$ und $c' = \sqrt{\frac{15}{16\pi}}$.

Wegen $x^2 - y^2 = (x + y)(x - y)$ sieht $d_{x^2-y^2}$ genauso aus wie d_{xy} , aber mit um 45 Grad gedrehten Achsen $x + y$ und $x - y$. Die Funktionen aus den Beispielen sind in Abb. A.13.2 graphisch dargestellt.

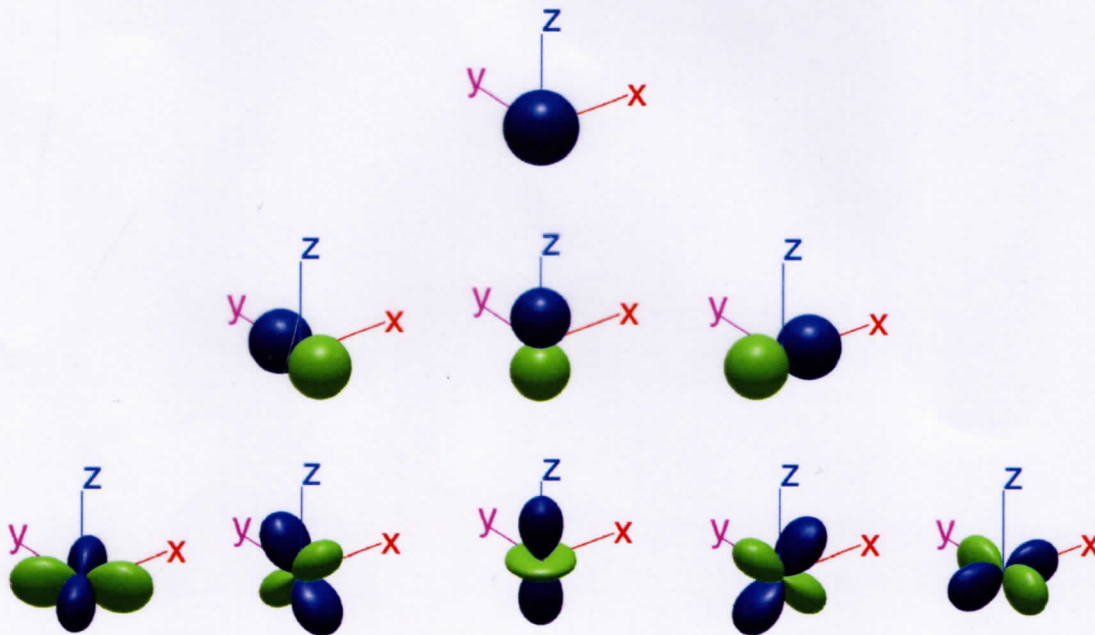


Abbildung A.8: Reelle Kugelflächenfunktionen Y_{lm} : s, p, und d Orbitale. Der Radius $r = \sqrt{x^2 + y^2 + z^2}$ der dargestellten Flächen ist proportional zu $|Y_{lm}|$, die Farben geben das Vorzeichen der Funktion wieder.

(Von <https://de.mathworks.com/matlabcentral/fileexchange/43856-real-complex-spherical-harmonic-transform-gaunt-coefficients-and-rotations>, 23.6.2019)

A.13.3 Radiale Aufenthaltswahrscheinlichkeiten

Zu den untersten Radialwellenfunktionen $R_{nl}(r)$ für Wasserstoff ($Z = 1$) aus Kap. 7.3.4 zeigt die Abbildung die Wahrscheinlichkeitsdichten $r^2 R^2(r)$, das Elektron beim Radius r zu finden. Man beachte die unterschiedlichen Skalen.

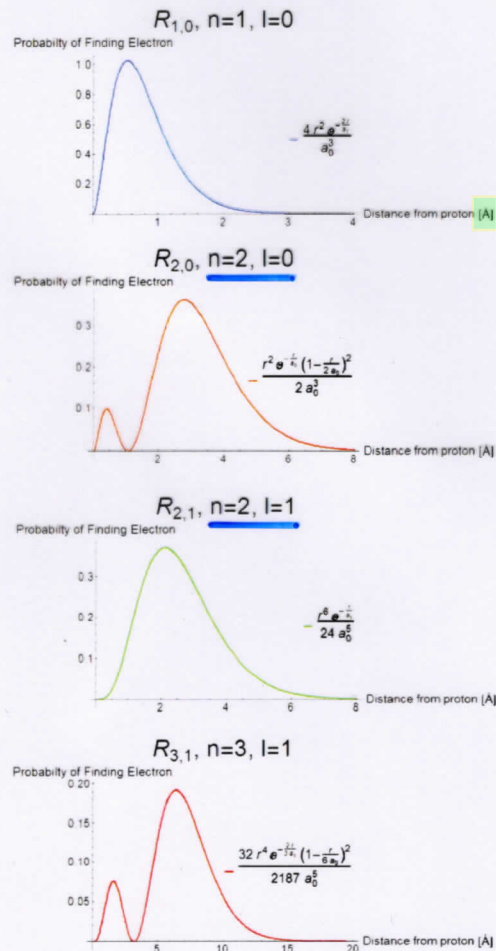


Abbildung A.9: Wahrscheinlichkeitsdichten $r^2 R^2(r)$, das Elektron im Wasserstoffatom beim Radius r zu finden.

(Von https://upload.wikimedia.org/wikipedia/commons/d/d7/Radial_Wave_function_Probability_for_Hydrogen_Atom.png, 23.6.2019)