

2. Grundlagen der Funktionalanalysis

Die Funktionalanalysis beschäftigt sich mit Vektorräumen und stetigen Abbildungen auf diesen. Wichtig ist dabei der Begriff des Funktionals, d.h. einer Abbildung von Vektoren auf Skalare (Beispiele: Norm, bestimmtes Integral) und des Operators, d.h. einer Abbildung von Vektoren auf Vektoren (Beispiele: Differentiation, unbestimmtes Integral). Man kann die Funktionalanalysis als eine Erweiterung der Linearen Algebra auffassen. Ein wichtiger Spezialfall der in der Funktionalanalysis untersuchten Vektorräume sind normierte Vektorräume, z.B. Hilberträume.

2.1 Vektorräume

Vektorräume sind in der Physik von besonderer Bedeutung, da sie oft die zugrundeliegende mathematische Struktur des physikalischen Problems widerspiegeln. Wir beginnen mit einer kurzen Wiederholung der grundlegenden Definitionen.

Definition 2.1 (Vektorraum). Es sei \mathbb{K} ein Körper (\mathbb{R} oder \mathbb{C}) und eine Menge V gegeben mit einer inneren Verknüpfung (Addition):

$$+ : V \times V \mapsto V, \quad (|v_1\rangle, |v_2\rangle) \mapsto |v_1\rangle + |v_2\rangle$$

und einer äußeren Verknüpfung (Multiplikation mit Skalaren),

$$\cdot : \mathbb{K} \times V \mapsto V, \quad (\alpha, |v\rangle) \mapsto \alpha \cdot |v\rangle,$$

dann heißt V Vektorraum über \mathbb{K} , wenn gilt:

V1: V zusammen mit der Addition $+$ ist eine Abelsche Gruppe.

V2: Für die Multiplikation mit Skalaren gilt

- Distributivität: $(\alpha + \beta) \cdot |v\rangle = \alpha \cdot |v\rangle + \beta \cdot |v\rangle$
- Distributivität: $\alpha \cdot (|v_1\rangle + |v_2\rangle) = \alpha \cdot |v_1\rangle + \alpha \cdot |v_2\rangle$
- Assoziativität: $\alpha \cdot (\beta |v\rangle) = (\alpha\beta) \cdot |v\rangle$

– Existenz eines neutralen Elements: $1 \cdot |v\rangle = |v\rangle$

$$\forall \alpha, \beta \in \mathbb{K} \text{ und } |v\rangle, |v_1\rangle, |v_2\rangle \in V.$$

Die Elemente $|v\rangle \in V$ heißen **Vektoren**. Als Schreibweise für Vektoren wählen wir $|v\rangle$, nach Dirac auch **ket** genannt.

Definition 2.2 (Untervektorraum). Sei V ein \mathbb{K} -Vektorraum. Die Teilmenge $W \in V$ heißt Untervektorraum von V , wenn gilt

UV1: $W \neq \emptyset$

UV2: Abgeschlossenheit bezüglich Addition : $|w_1\rangle, |w_2\rangle \in W \Rightarrow (|w_1\rangle + |w_2\rangle) \in W$

UV3: Abgeschlossenheit bezüglich Multiplikation mit Skalaren: $|w\rangle \in W, \alpha \in \mathbb{K} \Rightarrow (\alpha \cdot |w\rangle) \in W$

Dadurch wird in W eine Vektorraumstruktur induziert.

Beispiele:

- a) \mathbb{K}^n : Die Menge \mathbb{K}^n aller n -Tupel $|\alpha\rangle = (\alpha_1, \dots, \alpha_n)$, $\alpha_i \in \mathbb{K}$ (d.h. der gewohnte n -dimensionale \mathbb{K} -Vektorraum, $\mathbb{K} = \mathbb{R}$ oder $\mathbb{K} = \mathbb{C}$)
- b) l^p : Die Menge $l^p (1 \leq p < \infty)$ aller Folgen für die gilt $\sum_{n=1}^{\infty} |\alpha_n|^p < \infty$
- c) $C([a, b])$: Die Menge $C([a, b])$ aller auf dem Intervall $[a, b]$ stetigen Funktionen.
- d) $C^{(n)}([a, b])$: Die Menge $C^{(n)}([a, b])$ aller auf dem Intervall $[a, b]$ n -mal stetig differenzierbaren Funktionen.
- e) L^p : Die Menge $L^p (1 \leq p < \infty)$ aller auf dem Intervall $[a, b]$ messbaren Funktionen $f : t \mapsto f(t)$, für die das Integral $\int_a^b dt |f(t)|^p$ existiert.

2.2 Normierte Räume

In Form einer Norm führen wir eine Struktur in Vektorräumen ein; es wird sich zeigen, dass es viele verschiedene Realisierungen von Normen gibt. Normen quantifizieren den Begriff des Abstandes zwischen Vektoren.

Definition 2.3 (Norm). Es sei ein \mathbb{K} -Vektorraum V gegeben, auf dem eine Abbildung $\|\cdot\| : V \mapsto \mathbb{R}$ definiert sei. Diese Abbildung nennen wir **Norm**, wenn die folgenden Axiome gelten (wir verwenden die Schreibweise $\| |v\rangle \| \equiv \|v\|$):

N1: $\|\mathbf{v}\| \geq 0$, wobei $\|\mathbf{v}\| = 0 \Leftrightarrow |\mathbf{v}\rangle = 0$

N2: Homogenitätseigenschaft: $\|\alpha \cdot \mathbf{v}\| = |\alpha| \cdot \|\mathbf{v}\|$

N3: Dreiecksungleichung: $\|\mathbf{v}_1 + \mathbf{v}_2\| \leq \|\mathbf{v}_1\| + \|\mathbf{v}_2\|$

Einen Vektorraum mit einer Norm nennen wir **normierten Raum** und bezeichnen ihn mit $(\mathbf{V}, \|\cdot\|)$.

Lemma 2.1. Sei $\|\cdot\|$ eine Norm auf \mathbf{V} , dann gilt für alle $|\mathbf{v}_1\rangle, |\mathbf{v}_2\rangle \in \mathbf{V}$:

$$\|\mathbf{v}_1 \pm \mathbf{v}_2\| \geq \left| \|\mathbf{v}_1\| - \|\mathbf{v}_2\| \right|.$$

Wir betrachten jetzt Folgen in Vektorräumen. Unter dem Limes der Folge $|\mathbf{v}_n\rangle \xrightarrow{n \rightarrow \infty} |\mathbf{v}\rangle$ verstehen wir, dass gilt: $\|\mathbf{v}_n - \mathbf{v}\| \xrightarrow{n \rightarrow \infty} 0$.

Normierte Räume haben die folgenden Stetigkeitseigenschaften:

Satz 2.1. Es sei ein normierter Raum $(\mathbf{V}, \|\cdot\|)$ gegeben mit den Folgen $|\mathbf{v}_n\rangle, |\mathbf{v}'_n\rangle \in \mathbf{V}$ und $\alpha_n \in \mathbb{K}$ und den Konvergenzeigenschaften $|\mathbf{v}_n\rangle \xrightarrow{n \rightarrow \infty} |\mathbf{v}\rangle, |\mathbf{v}'_n\rangle \xrightarrow{n \rightarrow \infty} |\mathbf{v}'\rangle, \alpha_n \xrightarrow{n \rightarrow \infty} \alpha$, dann gilt:

$$1) |\mathbf{v}_n\rangle + |\mathbf{v}'_n\rangle \xrightarrow{n \rightarrow \infty} |\mathbf{v}\rangle + |\mathbf{v}'\rangle.$$

$$2) \alpha_n |\mathbf{v}_n\rangle \xrightarrow{n \rightarrow \infty} \alpha |\mathbf{v}\rangle$$

$$3) \|\mathbf{v}_n\| \xrightarrow{n \rightarrow \infty} \|\mathbf{v}\|$$

Das beweist man mit den Normeigenschaften (N1)-(N3), z.B. für 1)

$$\|\mathbf{v}_n + \mathbf{v}'_n - (\mathbf{v} + \mathbf{v}')\| = \|\mathbf{v}_n - \mathbf{v} + \mathbf{v}'_n - \mathbf{v}'\| \leq \|\mathbf{v}_n - \mathbf{v}\| + \|\mathbf{v}'_n - \mathbf{v}'\| \xrightarrow{n \rightarrow \infty} 0$$

Beispiele:

Aus den Vektorraumbeispielen lassen sich z.B. mit folgenden Normen normierte Vektorräume konstruieren:

a) Euklidische Norm $\|\cdot\|_2$:

$$(\mathbb{K}^n, \|\cdot\|_2) : \|\alpha\|_2 := \sqrt{\sum_{l=1}^n |\alpha_l|^2}, \quad |\alpha\rangle \equiv |\alpha_1, \dots, \alpha_n\rangle \in \mathbb{K}^n$$

$$(C([a, b]), \|\cdot\|_2) : \|f\|_2 := \sqrt{\int_a^b dt |f(t)|^2}, \quad |f\rangle \in C([a, b])$$

b) p -Norm $\|\cdot\|_p, (1 \leq p < \infty)$:

$$(\mathbb{K}^n, \|\cdot\|_p) : \|\alpha\|_p := \left(\sum_{l=1}^n |\alpha_l|^p \right)^{1/p}, \quad |\alpha\rangle \equiv |\alpha_1, \dots, \alpha_n, \dots\rangle \in \mathbb{K}^n$$

$$(L^p([a, b]), \|\cdot\|_p) : \|f\|_p := \left(\int_a^b dt |f(t)|^p \right)^{1/p}, \quad |f\rangle \in L^p([a, b])$$

Die Vektorräume \mathbb{K}^p und L^p , insbesondere \mathbb{K}^2 und L^2 spielen eine wichtige Rolle in der Quantenmechanik.

Skalarprodukt

Eng verbunden mit der Norm ist das Skalarprodukt in Vektorräumen.

Definition 2.4 (Skalarprodukt). Es sei ein \mathbb{K} -Vektorraum gegeben, auf dem eine Abbildung $\langle \cdot | \cdot \rangle : \mathbf{V} \times \mathbf{V} \mapsto \mathbb{K}$ (\mathbb{R} oder \mathbb{C}) definiert sei. Wir nennen diese Abbildung **Skalarprodukt**, wenn folgende Axiome für alle $|\mathbf{v}\rangle, |\mathbf{v}_1\rangle, |\mathbf{v}_2\rangle \in \mathbf{V}$ und $\alpha \in \mathbb{K}$ gelten:

S1: $\langle \mathbf{v} | \mathbf{v} \rangle \geq 0$, wobei $\langle \mathbf{v} | \mathbf{v} \rangle = 0 \Leftrightarrow |\mathbf{v}\rangle = 0$ (Skalarprodukt ist positiv definit)

$$\mathbf{S2}: \langle \mathbf{v}_1 | \alpha \mathbf{v}_2 \rangle = \alpha \langle \mathbf{v}_1 | \mathbf{v}_2 \rangle$$

$$\mathbf{S3}: \langle \mathbf{v} | \mathbf{v}_1 + \mathbf{v}_2 \rangle = \langle \mathbf{v} | \mathbf{v}_1 \rangle + \langle \mathbf{v} | \mathbf{v}_2 \rangle$$

$$\mathbf{S4}: \langle \mathbf{v}_1 | \mathbf{v}_2 \rangle = (\langle \mathbf{v}_2 | \mathbf{v}_1 \rangle)^* \text{ (Skalarprodukt ist Hermitesch)}$$

Gilt $\langle \mathbf{v}_1 | \mathbf{v}_2 \rangle = 0$, so heißen die Vektoren $|\mathbf{v}_1\rangle$ und $|\mathbf{v}_2\rangle$ **orthogonal** zueinander.

Aus diesen Definitionen folgt, dass mit $\|\mathbf{v}\| = \sqrt{\langle \mathbf{v} | \mathbf{v} \rangle}, |\mathbf{v}\rangle \in \mathbf{V}$ eine Norm auf \mathbf{V} erklärt wird, die **kanonische Norm** auf \mathbf{V} genannt wird. Die Normaxiome (N1)-(N3) folgen dann aus (S1)-(S3).

Beispiele:

$$\mathbf{a)} (\mathbb{K}^2, \|\cdot\|_2) : \langle \alpha | \beta \rangle := \sum_{n=1}^{\infty} \alpha_n^* \beta_n, \quad |\alpha\rangle \equiv |\alpha_1, \dots, \alpha_n, \dots\rangle, |\beta\rangle \equiv |\beta_1, \dots, \beta_n, \dots\rangle \in \mathbb{K}^2$$

Das so definierte Skalarprodukt erzeugt die Euklidische Norm $\|\cdot\|_2$ als kanonische Norm. Man vergewissert sich leicht, dass es sich bei $\langle \alpha | \beta \rangle$ um ein Skalarprodukt handelt:

$$1) \langle \alpha | \alpha \rangle = \sum_n \alpha_n^* \alpha_n = \sum_n |\alpha_n|^2 \geq 0, \text{ und } \sum_n |\alpha_n|^2 = 0 \Leftrightarrow \alpha_n = 0 \forall n \Leftrightarrow |\alpha\rangle = |0\rangle.$$

$$2) \langle \alpha | c\beta \rangle = \sum_n \alpha_n^* (c\beta_n) = c \sum_n \alpha_n^* \beta_n = c \langle \alpha | \beta \rangle.$$

$$3) \langle \alpha | \beta + \gamma \rangle = \sum_n \alpha_n^* (\beta_n + \gamma_n) = \sum_n \alpha_n^* \beta_n + \sum_n \alpha_n^* \gamma_n = \langle \alpha | \beta \rangle + \langle \alpha | \gamma \rangle.$$

$$4) \langle \alpha | \beta \rangle = \sum_n \alpha_n^* \beta_n = \sum_n (\beta_n^* \alpha_n)^* = \langle \beta | \alpha \rangle^*.$$

$$b) (C([a, b]), \|\cdot\|_2): \quad \langle f | g \rangle := \int_a^b dt f(t)^* g(t), \quad |f\rangle, |g\rangle \in C([a, b])$$

Auch in diesem Fall erzeugt die Euklidische Norm $\|\cdot\|_2$ die kanonische Norm.

$$c) (C([a, b]), \|\cdot\|_2^w): \quad \langle f | g \rangle := \int_a^b dt w(t) \cdot f(t)^* g(t), \quad |f\rangle, |g\rangle \in C([a, b])$$

mit einer Gewichtsfunktion $w(t) \in C([a, b])$, für die $w(t) > 0$ gilt.

Einen Vektorraum mit einem Skalarprodukt nennt man auch einen **Prä-Hilbertraum**.

Eine Norm, die durch ein Skalarprodukt erzeugt wird, hat folgende Eigenschaften:

Satz 2.2. Sei ein \mathbb{K} -Vektorraum gegeben mit $|v_1\rangle, |v_2\rangle \in V$, $\alpha \in \mathbb{K}$, mit einer kanonischen Norm $\|\cdot\|$, die durch das Skalarprodukt $\langle \cdot | \cdot \rangle$ erzeugt wird, dann gilt:

$$1) \text{ Schwarzsche Ungleichung: } |\langle v_1 | v_2 \rangle| \leq \|v_1\| \|v_2\|.$$

$$2) \|v_1 + v_2\| = \|v_1\| + \|v_2\| \Leftrightarrow \exists \alpha \geq 0 \text{ mit } |v_1\rangle = \alpha |v_2\rangle \text{ oder } |v_2\rangle = \alpha |v_1\rangle.$$

$$3) \text{ Parallelogrammidentität: } \|v_1 + v_2\|^2 + \|v_1 - v_2\|^2 = 2(\|v_1\|^2 + \|v_2\|^2).$$

4) Polarisierungsidentität

$$a) \mathbb{K} = \mathbb{R} \quad \langle v_1 | v_2 \rangle = \frac{1}{4} (\|v_1 + v_2\|^2 - \|v_1 - v_2\|^2).$$

$$b) \mathbb{K} = \mathbb{C} \quad \langle v_1 | v_2 \rangle = \frac{1}{4} (\|v_1 + v_2\|^2 - \|v_1 - v_2\|^2 + i\|v_1 - iv_2\|^2 - i\|v_1 + iv_2\|^2).$$

Duale Vektoren und Dualräume

Wir untersuchen nun die Linearitätseigenschaften des Skalarproduktes. Wir beginnen mit dem zweiten Argument des Skalarprodukts und setzen

$$|v_1\rangle = \alpha |v_2\rangle + \beta |v_3\rangle.$$

Dann ist nach (S2), (S3)

$$\langle v | v_1 \rangle = \langle v | (\alpha |v_2\rangle + \beta |v_3\rangle) = \alpha \langle v | v_2 \rangle + \beta \langle v | v_3 \rangle,$$

d.h. $\langle v | v_1 \rangle$ ist eine lineare Funktion von α und β , das Skalarprodukt ist linear im zweiten Argument.

Jetzt wenden wir uns dem ersten Argument zu und setzen

$$|v\rangle = \alpha |v_2\rangle + \beta |v_3\rangle.$$

Wir bilden dasselbe Skalarprodukt (unter Verwendung von (S2)-(S4)):

$$\begin{aligned} \langle v | v_1 \rangle &= \langle v_1 | v \rangle^* = (\alpha \langle v_1 | v_2 \rangle + \beta \langle v_1 | v_3 \rangle)^* = \alpha^* \langle v_1 | v_2 \rangle^* + \beta^* \langle v_1 | v_3 \rangle^* \\ &= \alpha^* \langle v_2 | v_1 \rangle + \beta^* \langle v_3 | v_1 \rangle. \end{aligned} \tag{2.1}$$

Wir finden also, dass $\langle v | v_1 \rangle$ im ersten Argument keine lineare Funktion von α und β ist. Man nennt das Skalarprodukt **antilinear** im ersten Argument. Die durch das Skalarprodukt definierte Form ist daher nicht bilinear sondern **sesquilinear**.

Um diese Asymmetrie bezüglich erstem und zweitem Argument des Skalarprodukts aufzulösen, interpretieren wir die sogenannten **bra-Vektoren** $\langle \cdot |$ als Elemente eines anderen Vektorraums. Dabei gibt es eine direkte Korrespondenz zwischen Vektoren beider Räume. Es gibt also einen Raum der kets und einen dazu **dualen Raum** der bras. $\langle v |$ heißt dann der zu $|v\rangle$ **duale Vektor**; sie tragen den identischen Namen v . Die Multiplikation eines bra mit einem ket wird jetzt durch

$$\langle v_1 | \cdot |v_2\rangle \equiv \langle v_1 | v_2 \rangle$$

erklärt. Wenn wir

$$\langle v | = \langle v_2 | \alpha^* + \langle v_3 | \beta^*$$

setzen, finden wir

$$\langle v | v_1 \rangle = \alpha^* \langle v_2 | v_1 \rangle + \beta^* \langle v_3 | v_1 \rangle,$$

d.h. dasselbe Resultat wie in (2.1). Somit ist $\langle v | = \langle v_2 | \alpha^* + \langle v_3 | \beta^*$ der zu $|v\rangle = \alpha |v_2\rangle + \beta |v_3\rangle$ **duale Vektor**. Unser Skalarprodukt ist also ausschließlich zwischen bras und kets, d.h. zwischen Elementen zweier unterschiedlicher aber eng verwandter Vektorräume definiert.

Die mathematische Grundlage für die Diracsche Bra-Ket-Notation ist der Zusammenhang des Skalarprodukts auf normierten Vektorräumen (später dann Hilberträumen) mit linearen Abbildungen oder **linearen Funktionalen** auf diesen:

Zu jedem linearen Vektorraum V existiert ein sogenannter **Dualraum** linearer Funktionale auf V . Ein Funktional weist jedem Vektor $|v\rangle \in V$ einen skalaren Wert $\alpha \in \mathbb{K}$ zu. Ein lineares Funktional erfüllt zusätzlich:

$$F(\alpha|v\rangle + \beta|w\rangle) = \alpha F(|v\rangle) + \beta F(|w\rangle) \quad \forall \alpha, \beta \in \mathbb{K} \text{ und } |v\rangle, |w\rangle \in V. \quad (2.2)$$

(Beispiel für ein lineares Funktional: das bestimmte Integral; es weist jeder Funktion f einen Skalar zu und ist linear.)

Die Menge aller linearen Funktionale bilden einen Vektorraum V^* (den **Dualraum**), wenn wir auch die Summe definieren:

$$(F_1 + F_2)(|v\rangle) = F_1(|v\rangle) + F_2(|v\rangle). \quad (2.3)$$

Der folgende Satz stellt jetzt die eindeutige Beziehung zwischen Vektorraum und zugehörigem Dualraum her:

Satz 2.3 (Riesz'sches Theorem). V und V^* sind isomorph, d.h. es gibt eine eineindeutige Beziehung zwischen den linearen Funktionalen F in V^* und den Vektoren $|w\rangle$ in V . Alle linearen Funktionale haben die Form $F(|v\rangle) = \langle w|v\rangle$, wobei $|w\rangle$ ein fester Vektor und $|v\rangle$ ein beliebiger Vektor ist.

Deshalb können wir ein Funktional F mit einem bra-Vektor $\langle w| \in V^*$ identifizieren, der auf einen Vektor $|v\rangle \in V$ wirkt, mit der Schreibweise $\langle w|v\rangle$. Man darf dabei nie die Antilinearität aus dem Auge verlieren: der Vektor (ket) $\alpha|v\rangle$ korrespondiert zum Funktional (bra) $\alpha^*\langle v|$.

2.3 Hilberträume

Hilberträume sind von zentraler Bedeutung in der Quantenmechanik. Zu ihrer Definition brauchen wir zunächst den Begriff der **Cauchyfolge**:

Definition 2.5 (Cauchyfolge). Es sei ein normierter Raum $(V, \|\cdot\|)$ gegeben mit einer Folge $|v_n\rangle \in V$, $n \in \mathbb{N}$. Diese Folge heißt Cauchyfolge, wenn zu jedem $\epsilon > 0$ ein $n_0 \in \mathbb{N}$ existiert, sodass für alle $n, n' > n_0$ gilt: $\|v_n - v_{n'}\| \leq \epsilon$. Wir schreiben dafür kurz: $\|v_n - v_{n'}\| \xrightarrow{n, n' \rightarrow \infty} 0$.

Wir sagen $|v_n\rangle \in V$ **konvergiert**, wenn gilt: $\|v_n - v\| \xrightarrow{n \rightarrow \infty} 0$ und $|v\rangle \in V$. Man macht sich leicht klar, dass es höchstens ein solches Element in V gibt, denn falls es ein weiteres Element $|v'\rangle \in V$ gäbe, würde nach der Dreiecksungleichung (N3) gelten: $\|v - v'\| \leq \|v - v_n\| + \|v_n - v'\| \rightarrow 0$ und zusammen mit (N1) $|v\rangle = |v'\rangle$.

Lemma 2.2. Jede konvergente Folge ist eine Cauchyfolge.

Beweis: Es konvergiere $|v_n\rangle$ gegen $|v\rangle$, dann gilt:

$$\|v_n - v_{n'}\| \leq \|v_n - v\| + \|v - v_{n'}\| \xrightarrow{n, n' \rightarrow \infty} 0.$$

Für den Hilbertraum benötigen wir den Begriff der **Vollständigkeit**:

Definition 2.6. Ein normierter Raum $(V, \|\cdot\|)$ heißt **vollständig**, wenn in ihm jede Cauchyfolge konvergiert.

Das ist nicht selbstverständlich, denn es gibt ja z.B. im Körper der rationalen Zahlen Cauchyfolgen, die nicht gegen eine rationale Zahl konvergieren; erst die Erweiterung des Körpers auf nichtrationale Zahlen - die reellen Zahlen - macht ihn vollständig.

Nun haben wir alles parat für die Definition des Hilbertraums:

Definition 2.7 (Hilbertraum). Einen normierten Raum $(V, \|\cdot\|)$ mit einem Skalarprodukt $\langle \cdot | \cdot \rangle$ (Prähilbertraum), der vollständig ist, nennen wir **Hilbertraum** und bezeichnen ihn mit $H \equiv \langle V, \|\cdot\| \rangle$.

Beispiele:

- 1) Der Prähilbertraum $(\mathcal{L}^2, \|\cdot\|_2)$ mit Skalarprodukt $\langle \alpha | \beta \rangle = \sum_n \alpha_n^* \beta_n$, $|\alpha\rangle, |\beta\rangle \in \mathcal{L}^2$ ist ein Hilbertraum. Er wird auch der **Hilbertsche Folgenraum** genannt. Der Beweis der Vollständigkeit ist ein wenig knifflig (\rightarrow Literatur).
- 2) Der Prähilbertraum $(L^2, \|\cdot\|_2)$ mit Skalarprodukt $\langle f | g \rangle = \int_a^b dx f^*(x)g(x)$, $|f\rangle, |g\rangle \in L^2$ ist ein Hilbertraum. Er wird auch der **Hilbertsche Funktionenraum** genannt.

Auch hier ist der Beweis der Vollständigkeit nicht ganz einfach; schon für die Positiv-Definitheit des Skalarprodukts muß man vom Riemann-Integral zum Lebesgue-Integral übergehen; dieses konvergiert im Mittel auch für Funktionen mit endlich vielen Unstetigkeitsstellen.

Der Hilbertraum ist dann der Raum aller Lebesgue-integrierbaren Funktionen, wobei wir Funktionen identifizieren, die sich nur auf einer Menge

vom Maß Null unterscheiden; das Skalarprodukt ist auf diesem Quotientenraum eindeutig definiert und positiv-definit. Dieser Raum heißt **Lebesgueraum** und ist definiert durch

$$L([a, b]) \equiv \hat{L}^2([a, b]) := L^2([a, b]) / \mathcal{N}([a, b]) \quad (2.4)$$

mit der Nullmenge $\mathcal{N}([a, b]) := \{f \in L^2([a, b]) \mid \langle f|f \rangle = 0\}$. Dies bildet eine Äquivalenzklasse in $L^2([a, b])$, bei der Funktionen zur gleichen Klasse gehören, wenn sie fast überall übereinstimmen.

2.4 Orthogonalität

Definition 2.8. Sei H ein Hilbertraum mit Unterräumen $W, W' \subset H$. Die Vektoren $|v\rangle, |v'\rangle \in H$ heißen **orthogonal** ($|v\rangle \perp |v'\rangle$), wenn gilt: $\langle v|v'\rangle = 0$. Wir schreiben $|v\rangle \perp W$, wenn $\langle v|w\rangle = 0 \forall |w\rangle \in W$. Zwei Unterräume $W, W' \subset H$ heißen orthogonal, wenn $\langle w|w'\rangle = 0 \forall |w\rangle \in W, |w'\rangle \in W'$. Den Unterraum $W^\perp := \{|v\rangle \in H \mid |v\rangle \perp W\}$ nennen wir **Orthogonalraum** von W .

Wir bezeichnen mit $W + W' := \{|w\rangle + |w'\rangle \mid |w\rangle \in W, |w'\rangle \in W', W \cap W' = \{0\}\}$ die **direkte Summe** zweier Unterräume und nennen sie **orthogonale Summe**, falls die Unterräume auch noch orthogonal sind ($W \perp W'$) und schreiben dafür $W \oplus W'$. Für den durch die Vektoren $\{|w_i\rangle\}$, $|w_i\rangle \in W$ aufgespannten Unterraum schreiben wir auch $\langle |w_1\rangle, |w_2\rangle, \dots \rangle$. Die abzählbare Teilmenge $|v_i\rangle_{i=1,2,\dots} \subset H$ nennen wir ein **Orthogonalsystem**, wenn paarweise gilt: $|v_i\rangle \perp |v_j\rangle, i \neq j$. Gilt zusätzlich $\langle v_i|v_j\rangle = \delta_{ij}$, so nennen wir dies ein **Orthonormalsystem** (ONS).

Viele der folgenden Sätze und Definitionen sind aus der linearen Algebra bekannt:

Definition 2.9 (Lineare Unabhängigkeit). Eine Menge von Vektoren $|v_i\rangle, i = 1, \dots, n$ heißt **linear unabhängig**, wenn gilt:

$$\sum_{i=1}^n \alpha_i |v_i\rangle = |0\rangle \Leftrightarrow \alpha_i \equiv 0 \quad (2.5)$$

Ansonsten heißen sie **linear abhängig**.

Lemma 2.3. Jede Teilmenge eines Orthogonalsystems ist linear unabhängig.

Beweis: Sei eine beliebige Teilmenge eines ONS gegeben: $\{|v_{i_1}\rangle, |v_{i_2}\rangle, \dots, |v_{i_n}\rangle\}$, dann folgt aus $0 = \sum_{i=1}^n \alpha_i |v_{i_i}\rangle, \alpha_i \in \mathbb{K}$

$$0 = \langle v_{i_k} \mid \sum_{l=1}^n \alpha_l v_{i_l} \rangle = \sum_{l=1}^n \alpha_l \langle v_{i_k} | v_{i_l} \rangle = \sum_{l=1}^n \alpha_l \delta_{kl} = \alpha_k$$

d.h. die Koeffizienten müssen alle null sein.

Definition 2.10 (Dimension). Ein Vektorraum hat die **Dimension n** , wenn es in ihm maximal n linear unabhängige Vektoren gibt.

Die Dimension eines Vektorraums ist unabhängig von der Wahl der Basis. In der Quantenmechanik haben wir es oft mit unendlich-dimensionalen Vektorräumen zu tun.

Es gilt die Verallgemeinerung des Satzes von Pythagoras:

Lemma 2.4 (Pythagoras). Sei $|v_i\rangle_{i=1,2,\dots,n}$ ein Orthogonalsystem in H und $\|\cdot\|$ die kanonische Norm, dann gilt:

$$\left\| \sum_{i=1}^n v_i \right\|^2 = \sum_{i=1}^n \|v_i\|^2$$

$$\text{Beweis: } \left\| \sum_i v_i \right\|^2 = \langle \sum_i v_i \mid \sum_j v_j \rangle = \sum_{ij} \langle v_i | v_j \rangle = \sum_{ij} \delta_{ij} \|v_i\|^2 = \sum_i \|v_i\|^2$$

Beispiele:

a) **Trigonometrisches Orthonormalsystem:**

Sei $H = \langle L([a, b]), \|\cdot\|_2 \rangle$, dann ist

$$f_n(t) := \frac{1}{\sqrt{b-a}} \exp\left(i \frac{2\pi n}{b-a} t\right), \quad n \in \mathbb{Z} \quad (2.6)$$

ein ONS, da gilt:

$$\langle f_n | f_{n'} \rangle = \frac{1}{b-a} \int_a^b dt \exp\left(i \frac{2\pi(n-n')}{b-a} t\right) = \delta_{nn'}$$

b) **Legendrefunktionen:** Sei $H = \langle L^2([-1, 1]), \|\cdot\|_2 \rangle$, dann führen die Legendreschen Polynome

$$P_n(t) := \frac{1}{2^n n!} \frac{d^n}{dt^n} (t^2 - 1)^n, \quad n \in \mathbb{N}_0 \quad (2.7)$$

(d.h. die ersten fünf sind $P_0(t) = 1$, $P_1(t) = t$, $P_2(t) = \frac{1}{2}(3t^2 - 1)$, $P_3(t) = \frac{1}{2}(5t^3 - 3t)$, $P_4(t) = \frac{1}{8}(35t^4 - 30t^2 + 3)$) auf das Orthonormalsystem der Legendreschen Funktionen

$$\eta_n(t) := \sqrt{n + \frac{1}{2}} P_n(t). \quad (2.8)$$

Die Legendrefunktionen treten beispielsweise auf, wenn man die Laplacegleichung $\Delta\varphi = 0$ in Kugelkoordinaten löst.

c) **Hermitefunktionen:** Sei $H = \langle L^2(\mathbb{R}), \|\cdot\|_2^w \rangle$ mit $w(t) = e^{-t^2}$, d.h.

$$\|f(t)\|_2^w = \sqrt{\int_{-\infty}^{\infty} dt w(t) |f(t)|^2},$$

dann führen die Hermiteischen Polynome

$$H_n(t) := (-1)^n e^{t^2} \frac{d^n}{dt^n} e^{-t^2}, \quad n \in \mathbb{N}_0 \quad (2.9)$$

(d.h. die ersten fünf sind $H_0(t) = 1$, $H_1(t) = 2t$, $H_2(t) = 4t^2 - 2$, $H_3(t) = 8t^3 - 12t$, $H_4(t) = 16t^4 - 48t^2 + 12$) auf das ONS der Hermiteischen Funktionen

$$\psi_n(t) := \frac{e^{-\frac{t^2}{2}}}{\sqrt{2^n n! \sqrt{\pi}}} H_n(t). \quad (2.10)$$

Diese Funktionen treten als Eigenfunktionen des harmonischen Oszillators auf.

d) **Laguerrefunktionen:** Sei $H = \langle L^2([0, \infty]), \|\cdot\|_2^w \rangle$ mit $w(t) = e^{-t^2}$, dann führen die Laguerreschen Polynome

$$L_n(t) := e^t \frac{d^n}{dt^n} (t^n e^{-t}), \quad n \in \mathbb{N}_0 \quad (2.11)$$

auf das ONS der Laguerreschen Funktionen

$$\phi_n(t) := \frac{e^{-\frac{t}{2}}}{n!} L_n(t). \quad (2.12)$$

Die Laguerreschen Funktionen gehen in die Eigenfunktionen des Wasserstoffatoms ein.

Als nächstes müssen wir die Frage beantworten, wie man in einem gegebenen Hilbertraum ein Orthonormalsystem konstruiert.

Satz 2.4 (Gram-Schmidtsches Orthonormalisierungsverfahren). Es sei ein System $\{|v_1\rangle, \dots, |v_n\rangle\}$ linear unabhängiger Elemente aus H gegeben, dann gibt es ein Orthonormalsystem $\{|e_1\rangle, \dots, |e_n\rangle\}$ mit

$$\langle |v_1\rangle, \dots, |v_n\rangle \rangle = \langle |e_1\rangle, \dots, |e_n\rangle \rangle$$

(d.h. von den $|v_i\rangle$ und den $|e_i\rangle$ wird derselbe Unterraum aufgespannt).

Beweis: Wir setzen

$$|e_1\rangle := \frac{|v_1\rangle}{\|v_1\|}$$

und führen den konstruktiven Beweis durch Induktion. Sei nun ein ONS $\{|e_i\rangle\}_{i=1, \dots, l < n}$ schon bestimmt, sodass gilt: $\langle |v_1\rangle, \dots, |v_l\rangle \rangle = \langle |e_1\rangle, \dots, |e_l\rangle \rangle$. Dann setzen wir

$$|\tilde{e}_{l+1}\rangle := |v_{l+1}\rangle - \sum_{i=1}^l |e_i\rangle \langle e_i | v_{l+1} \rangle \quad (2.13)$$

und zeigen, dass dieser Vektor orthogonal zu allen Vektoren $\{|e_1\rangle, \dots, |e_l\rangle\}$ ist:

$$\langle e_j | \tilde{e}_{l+1} \rangle = \langle e_j | v_{l+1} \rangle - \sum_{i=1}^l \langle e_j | e_i \rangle \langle e_i | v_{l+1} \rangle = \langle e_j | v_{l+1} \rangle - \sum_{i=1}^l \delta_{ij} \langle e_i | v_{l+1} \rangle = 0$$

für alle $j = 1, \dots, l$. Da $|v_{l+1}\rangle$ linear unabhängig ist, ist $|\tilde{e}_{l+1}\rangle \neq 0$. Nun setzen wir

$$|e_{l+1}\rangle := \frac{|\tilde{e}_{l+1}\rangle}{\|\tilde{e}_{l+1}\|}$$

und erhalten das ONS $\{|e_1\rangle, \dots, |e_{l+1}\rangle\}$.

Beispiel:

Wir betrachten den Hilbertraum $H = \langle L([-1, 1]), \|\cdot\| \rangle$, und den Unterraum der linear unabhängigen Polynome $\{|v_n\rangle = t^n\}_{n=0,1,\dots}$. Dann ergibt das Gram-Schmidtsche Orthonormalisierungsverfahren das ONS der Legendrefunktionen.

Die ersten Schritte der Orthonormierung (wir beginnen mit Index 0 statt 1 im Satz 2.4):

$$|v_0\rangle = 1, |v_1\rangle = t, |v_2\rangle = t^2. \quad \langle v_0 | v_0 \rangle = \int_{-1}^1 dt = [t]_{-1}^1 = 2 \Rightarrow |e_0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \checkmark$$

$$|\tilde{e}_1\rangle = |v_1\rangle - |e_0\rangle \langle e_0 | v_1 \rangle = t - \frac{1}{2} \int_{-1}^1 dt t = t \quad \langle \tilde{e}_1 | \tilde{e}_1 \rangle = \int_{-1}^1 dt t^2 = \frac{2}{3} \Rightarrow |e_1\rangle = \sqrt{\frac{3}{2}} t \checkmark$$

$$\begin{aligned} |\bar{e}_2\rangle &= |v_2\rangle - |e_0\rangle\langle e_0|v_2\rangle - |e_1\rangle\langle e_1|v_2\rangle = t^2 - \frac{1}{2}\int_{-1}^1 dt t^2 - \frac{3}{2}\underbrace{\int_{-1}^1 dt t^3}_{=0} = t^2 - \frac{1}{3} \\ \langle \bar{e}_2|\bar{e}_2\rangle &= \int_{-1}^1 dt \left(t^2 - \frac{1}{3}\right)^2 = \int_{-1}^1 dt \left(t^4 - \frac{2}{3}t^2 + \frac{1}{9}\right) = \frac{2}{5} - \frac{4}{9} + \frac{2}{9} = \frac{8}{45} \\ \Rightarrow |e_2\rangle &= \sqrt{\frac{45}{8}}\left(t^2 - \frac{1}{3}\right) = \sqrt{\frac{5}{2}}\frac{1}{2}(3t^2 - 1) \checkmark \end{aligned}$$

Die folgende Ungleichung besagt, dass die Norm eines Vektors mindestens so groß ist wie die einer beliebigen Projektion auf einen Unterraum:

Lemma 2.5 (Besselungleichung). Es sei $\{|e_1\rangle, |e_2\rangle, \dots\}$ ein (nicht notwendig vollständiges) ONS in H , dann gilt für alle $|v\rangle \in H$:

$$\|v\|^2 \geq \sum_i |\langle e_i|v\rangle|^2 \quad (2.14)$$

Das Gleichheitszeichen gilt genau dann, wenn

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \left\| v - \sum_{i=1}^n \langle e_i|v\rangle e_i \right\|^2 = 0$$

(wobei wie üblich die ket-Klammern unter der Norm weggelassen sind).

Beweis: Wir spalten $\|v\|^2$ in zwei zueinander orthogonale Anteile auf und verwenden Lemma 2.4 (Pythagoras):

$$\|v\|^2 = \left\| v - \sum_{i=1}^n e_i \langle e_i|v\rangle + \sum_{i=1}^n e_i \langle e_i|v\rangle \right\|^2 = \left\| v - \sum_{i=1}^n e_i \langle e_i|v\rangle \right\|^2 + \sum_{i=1}^n |\langle e_i|v\rangle|^2 \geq 0$$

und damit folgt die Behauptung.

Definition 2.11 (Orthonormalbasis). Ein gegebenes Orthonormalsystem $\{|e_1\rangle, |e_2\rangle, \dots\}$ heißt **vollständig** oder eine **Orthonormalbasis** (ONB), wenn für alle $|v\rangle \in H$ die **Parsevalsche Gleichung** gilt:

$$\|v\|^2 = \sum_n |\langle v|e_n\rangle|^2 \quad (2.15)$$

Lemma 2.6. Ein ONS $\{|e_1\rangle, |e_2\rangle, \dots\}$ in H ist genau dann vollständig, wenn aus $\langle e_i|v\rangle = 0 \forall i$ folgt, dass $|v\rangle = 0$ ist.

Lemma 2.7. Jeder Vektor $|v\rangle$ in einem n -dimensionalen Vektorraum kann als Linearkombination von n linear unabhängigen Vektoren $|e_i\rangle$, $i = 1, \dots, n$ geschrieben werden:

$$|v\rangle = \sum_{i=1}^n \alpha_i |e_i\rangle \quad (2.16)$$

Die Entwicklungskoeffizienten α_i heißen auch Koordinaten des Vektors in der gewählten Basis.

Lemma 2.8. Die Entwicklung eines Vektors in einer linear unabhängigen Basis ist eindeutig.

$|v\rangle$ ist die abstrakte Notation eines Vektors. Erst in einer gewählten Basis wird der Vektor durch konkrete Koeffizienten spezifiziert. In den Komponenten gelten die vertrauten Rechenregeln:

$$|v\rangle = \sum_{i=1}^n \alpha_i |e_i\rangle, \quad |w\rangle = \sum_{i=1}^n \beta_i |e_i\rangle \Rightarrow |v\rangle + |w\rangle = \sum_{i=1}^n (\alpha_i + \beta_i) |e_i\rangle$$

Für das Skalarprodukt in einer ONB gilt $\langle v|w\rangle$ wie oben):

$$\langle v|w\rangle = \sum_{ij} \alpha_i^* \beta_j \langle e_i|e_j\rangle = \sum_{ij} \alpha_i^* \beta_j \delta_{ij} = \sum_i \alpha_i^* \beta_i$$

Diese Form hat das Skalarprodukt in jeder ONB; während die Koeffizienten α_i, β_i von der Basis abhängen, ist $\sum_i \alpha_i^* \beta_i$ basisunabhängig.

Entwicklung in einer Orthonormalbasis: Ausgehend von der Darstellung des Vektors $|v\rangle$ in einer ONB $\{|e_i\rangle\}$

$$|v\rangle = \sum_{i=1}^n \alpha_i |e_i\rangle$$

berechnen wir die Koeffizienten α_i in dieser Basis durch Multiplikation mit den bras $\langle e_j|$:

$$\langle e_j|v\rangle = \langle e_j| \left(\sum_{i=1}^n \alpha_i |e_i\rangle \right) = \sum_{i=1}^n \alpha_i \langle e_j|e_i\rangle = \sum_{i=1}^n \alpha_i \delta_{ij} = \alpha_j$$

d.h. $\alpha_j = \langle e_j|v\rangle$, die Entwicklungskoeffizienten ergeben sich als Skalarprodukte mit den Basisvektoren.

Lemma 2.9 (Vollständigkeitsrelation). Sei $\{|e_1\rangle, |e_2\rangle, \dots\}$ eine Orthonormalbasis im Hilbertraum H , dann gilt für alle $|v\rangle, |v'\rangle \in H$ die Parsevalsche Gleichung für das Skalarprodukt:

$$\langle v|v'\rangle = \sum_i \langle v|e_i\rangle \langle e_i|v'\rangle \quad (2.17)$$

Beweis: Der Beweis folgt aus der Stetigkeit des Skalarprodukts, zusammen mit $|v\rangle = \sum_i |e_i\rangle \langle e_i|v\rangle$ und $|v'\rangle = \sum_i |e_i\rangle \langle e_i|v'\rangle$, denn:

$$\langle v|v'\rangle = \lim_{n \rightarrow \infty} \sum_{i=1}^n \langle e_i|\langle e_i|v\rangle^* \cdot \sum_{i'=1}^n |e_{i'}\rangle \langle e_{i'}|v'\rangle = \sum_i \langle v|e_i\rangle \langle e_i|v'\rangle$$

Die nächste wichtige Eigenschaft von normierten Räumen ist die Separabilität; wenn ein Hilbertraum separabel ist, dann ist er im wesentlichen abzählbar-unendlichdimensional.

Definition 2.12 (Separabilität). Ein normierter Raum $(V, \|\cdot\|)$ heißt separabel, wenn es in V eine abzählbare dichte Teilmenge W gibt, d.h. für alle $\varepsilon > 0$ und $|v\rangle \in V$ existiert ein $|v_\varepsilon\rangle \in W$ mit $\|v - v_\varepsilon\| < \varepsilon$.

In der Quantenmechanik haben wir es fast immer mit separablen Hilberträumen zu tun.

Beispiele:

- a) $(\mathbb{K}^n, \|\cdot\|_2)$ ($\mathbb{K} = \mathbb{R}, \mathbb{C}$) ist separabel, da die Menge \mathbb{Q} abzählbar dicht in \mathbb{R} liegt.
- b) $(\mathbb{R}^2, \|\cdot\|_2)$ ist separabel.
- c) $L(\mathbb{R})$ ist separabel.
- d) $(L^p([a, b]), \|\cdot\|_p)$, $1 \leq p < \infty$ ist separabel.

Das Besondere an separablen Hilberträumen gibt das folgende Lemma wieder:

Lemma 2.10. In jedem separablen Hilbertraum H existiert eine Orthonormalbasis.

Damit kann man also jeden Vektor eines separablen Hilbertraums in eine Reihe, d.h. eine abzählbare Summe entwickeln.

An dieser Stelle klären wir einige Begriffe, die wir auch im folgenden Kapitel benötigen:

Definition 2.13 (Homomorphismus). Eine Abbildung $f : V \mapsto W$ zwischen zwei Vektorräumen V und W heißt **Homomorphismus**, wenn sie linear ist, d.h. additiv

$$\forall_{|v_1\rangle, |v_2\rangle \in V} f(|v_1\rangle + |v_2\rangle) = f(|v_1\rangle) + f(|v_2\rangle)$$

und homogen

$$\forall_{|v\rangle \in V, \alpha \in \mathbb{K}} f(\alpha|v\rangle) = \alpha f(|v\rangle)$$

Homomorphismen heißen auch lineare Operatoren.

Ein **Endomorphismus** ist ein Homomorphismus $V \mapsto V$.

Ein **Isomorphismus** ist ein bijektiver (d.h. injektiver und surjektiver) Homomorphismus. Die zwei Räume V und W heißen **isomorph**, wenn zwischen ihnen ein Isomorphismus existiert.

Ein **Automorphismus** ist ein isomorpher Endomorphismus.

Definition 2.14 (Normisomorphismus). Ein normerhaltender Isomorphismus $f : V \mapsto W$ zwischen zwei normierten Räumen V und W , d.h.

$$\forall_{|v\rangle \in V} \|f(|v\rangle)\| = \|v\|$$

heißt **Normisomorphismus**. Zwei Räume heißen **normisomorph**, wenn zwischen ihnen ein Normisomorphismus existiert.

Definition 2.15 (Isometrie). Ein Homomorphismus zwischen zwei Räumen V und W mit Skalarprodukt, der das Skalarprodukt erhält, d.h.

$$\forall_{|v_1\rangle, |v_2\rangle \in V} \langle f(|v_1\rangle) | f(|v_2\rangle) \rangle = \langle v_1 | v_2 \rangle$$

heißt Isometrie.

Eine **unitäre Abbildung** ist ein isometrischer Isomorphismus.

Mit diesen Begriffen wird die Tragweite des folgenden Satzes deutlich:

Satz 2.5 (Isomorphiesatz separabler Hilberträume). Es sei H ein unendlichdimensionaler \mathbb{C} -Hilbertraum mit Skalarprodukt $\langle \cdot | \cdot \rangle_H$. Falls es eine höchstens abzählbare Menge gibt, die dicht in H liegt, so existiert eine bijektive lineare Abbildung $T : H \rightarrow \mathbb{R}^2$, sodass für alle $|u\rangle, |v\rangle \in H$ gilt:

$$\langle v|v\rangle_H = \langle Tv|Tv\rangle$$

wobei $\langle \cdot | \cdot \rangle$ das Standardskalarprodukt im \mathbb{R}^2 bedeutet.

Der Satz besagt also, dass jeder separable unendlichdimensionale \mathbb{C} -Hilbertraum normisomorph zu \mathfrak{l}^2 ist.

Für die Quantenmechanik bedeutet das, dass das Studium der Schrödinger-Gleichung sowohl im $L^2(\mathbb{R})$ durchgeführt werden kann (Schrödingersche Wellenmechanik) also auch im \mathfrak{l}^2 (Heisenbergsche Matrizenmechanik).