2. Selbstadjungierte Operatoren

Literatur:
- *H. Triebel : Höhere Analysis*
- *O. Bratteli, D. W. Robinson: Operator Algebras and Quantum Statistical Mechanics1*

Wir betrachten folgend nur noch separable Hilberträume H !
Dann existiert in H ein CONS (vollständig orthonormiertes System) im Sinne der folgenden Definition:

2.1. Definition:
- ein $x \in H$ heißt normiert, wenn $\|x\| = 1$
- $x, y \in H$ sind orthogonal, wenn $\langle x | y \rangle = 0$
- eine Folge $(u_k)_{k=1}^N$ (möglich $N = +\infty, 1, 2, \ldots$) heißt orthonormales System (kurz: orthonormal), wenn deren Elemente normiert und paarweise orthogonal sind
- ein orthonormales System $(u_k)_{k=1}^N$ heißt vollständig (kurz: CONS), wenn jedes $x \in H$ sich in der Form $x = \sum_{k=1}^{N} \langle u_k | x \rangle u_k$ darstellen läßt.
- Dabei heißt $(\langle u_k | x \rangle)_{k=1}^N$ Folge der Fourierkoeffizienten von x bezüglich des CONS $(u_k)_{k=1}^N$ und *N* ist die (eindeutig bestimmte) Dimension von H – Schreibweise: $\dim H = N$

2.2.Bemerkung: In der Sprache der linearen Räume ist $(u_k)_{k=1}^N$ eine Basis in *H*.

Beispiele

1. $H = C^N$ **:**

- $u_k = e_k := \lfloor \delta_{k,1}, ..., \delta_{k,N} \rfloor$ *(k=1,...,N)*

  dabei bezeichnet $\delta_{k,j}$ das Kroneckersymbol.

- $\dim H = N$

2. $H = l_2$ **:**

- $u_k = \left(\delta_{k,j}\right)_{k=1}^{+\infty}$ *(k=1,2,...)*
- $\dim H = +\infty$

3. $H = L_2(\Omega)$ **,** Ω **abzählbar :**

- $u_k = \delta_{k,(.)}$ (k=1,2,...,*Anz*(Ω))
- $\dim H = Anz(\Omega)$

4. $H = L_2(R)$

- $(u_k)_{k=1}^{+\infty}$ - Folge der (normierten) Hermiteschen Polynome
  (siehe z.B. Triebel)
- $\dim H = +\infty$

Bei Modellen des Quantencomputing (z.B. Teleportation) und anderen später betrachteten Anwendungen benötigt man die Voraussetzung, daß die betrachteten Hilberträume endlich-dimensional sind.
Bei der nachfolgenden Betrachtungen beschränken wir uns deshalb zunächst auf den Fall, daß für den zugrunde liegende Hilbertraum $\dim H = N < +\infty$ **ist.**

Auf im unendlich-dimensionalen Fall sich ergebende Probleme und deren Lösungen wird dabei zunächst in Form von Bemerkungen eingegangen. Ausführlichere Betrachtungen erfolgen am Ende des Kapitels

2.3. Definition: Eine Abbildung $A: H \to H$ heißt (linearer) Operator auf *H*, wenn *A* linear ist, d.h.,

$$A(\alpha x + \beta y) = \alpha A(x) + \beta B(y) \quad (x, y \in H; \alpha, \beta \in C)$$

A^* heißt der zu A adjungierte Operator, wenn gilt

$$\left\langle A^*(x) \middle| y \right\rangle = \langle x | A(y) \rangle \quad (x, y \in H)$$

Ein Operator A heißt selbstadjungiert, wenn $A = A^*$ ist.

2.4. Der adjungierte Operator ist eindeutig bestimmt und es gelten:

2.4.1. $(\alpha A + \beta B)^* = \overline{\alpha} A^* + \overline{\beta} B^*$ $(\alpha, \beta \in C; A, B$ Operatoren)

2.4.2. $(AB)^* = B^* A^*$ $(A,B$ Operatoren)

Zum Beweis von 2.4. verwenden wir folgenden Hilfssatz

2.5. Jedes $x \in H$ ist durch $(\langle x | y \rangle)_{y \in H}$ eindeutig bestimmt.

Beweis: Mit $(\langle x | y \rangle)_{y \in H}$ kennen wir die Fourierkoeffizienten von *x* zu jedem CONS $\Rightarrow$

Beweis von 2.4.:

- zu Eindeutigkeit:

- zu 2.4.1

- zu 2.4.2.

Bemerkungen:

- Im Fall $H = C^N$ lassen sich die Operatoren mit Matrizen $A = (a_{k,j})_{k,j=1,\ldots,N}$ identifizieren.

Dabei ist $A^* = (\overline{a_{j,k}})_{k,j=1,\ldots,N}$.

- Im Fall $H = l_2$ kann man in formaler Analogie unendliche

Matrizen $A = (a_{k,j})_{k,j=1,2,\ldots}$ verwenden. Führt man jedoch die Multiplikation Matrix mal (unendlichen) Vektor aus, muß nicht wieder ein Element aus l_2 entstehen. Unter gewissen Einschränkungen betreffend die Matrix ist das jedoch gesichert, wenn man zunächst nur Folgen $(x_k)_{k=1}^{+\infty}$ mit nur endlich vielen von Null verschiedenen Gliedern betrachtet. Die Menge dieser Folgen ist aber dicht in l_2.

$\Rightarrow$ **Konzept der Einführung linearer Operatoren und deren Adjungierte im unendlich-dimensionalen Fall** (siehe Schluß des Kap.)

2.6. Definition: Sei $x \in H, \|x\| = 1$.

- $[x] := \{\alpha x \,/\, \alpha \in C\}$ heißt der durch x erzeugte (eindimensionale) Unterraum.
- Der Operator $|x\rangle\langle x|$, definiert durch

  $$|x\rangle\langle x|(y) := x\langle x \mid y\rangle \qquad (y \in H)$$

  heißt Projektor zum Unterraum $[x]$.

2.7. Seien $x \in H, \|x\| = 1$ und $y \in [x]$.

2.7.1 Es gelten stets $|x\rangle\langle x|(z) \in [x]$ und $|x\rangle\langle x|(y) := y$

2.7.2 Ist auch $\|y\| = 1$, so gilt $|x\rangle\langle x| = |y\rangle\langle y|$

2.7.3 Der Projektor ist selbstadjungiert.

Beweis:

2.8. Definition: Seien D ein abgeschlossener Unterraum von H und $(d_j)_{j=1}^{n}$ ein CONS in D. Der Projektor Pr_D ist definiert durch

$$\mathrm{Pr}_D := \sum_{j=1}^{n} |d_j\rangle\langle d_j|$$

2.9. Sei D ein abgeschlossener Unterraum von H . Dann gelten:

2.9.1 Die Definition von Pr_D hängt nicht von der Wahl des CONS ab

2.9.2 $\mathrm{Pr}_D(x) \in D \quad (x \in H)$ und $\mathrm{Pr}_D(x) = x \quad (x \in D)$

2.9.3 Der Projektor ist selbstadjungiert.

Beweis

2.10. Sei A ein selbstadjungierter Operator auf H (endlichdim.!). Dann existieren eindeutig bestimmte Folgen $(a_j)_{j=1}^n$ paarweise verschiedener reeller Zahlen und $(D_j)_{j=1}^n$ paarweise orthogonaler (endlichdim.) Unterräume, so daß gilt: $A = \sum_{j=1}^{n} a_j \operatorname{Pr}_{D_j}$

Dabei sind a_j die Eigenwerte und D_j die dazu gehörigen Eigenräume.

(Erläuterungen – Beweisskizze)

2.11.Bemerkung: Mit Definition 2.8. und 2.10. erhält man eine Darstellung $A = \sum_{k=1}^{N} b_k \left| x_k \right\rangle\left\langle x_k \right|$, wobei $(x_k)_{k=1}^N$ ein CONS und $(b_k)_{k=1}^N$ eine Folge (nicht notwendig verschiedener) Eigenwerte ist. Diese Darstellung wird in der Literatur „Schatten decomposition“ genannt. Sie ist nicht eindeutig bestimmt.

(Erläuterungen)

2.12.Definition: Seien A ein selbstadjungierter Operator, gegeben in der Darstellung unter 2.10., und $f : R \to R$. Der Operator $f(A)$ ist definiert durch : $f(A) := \sum_{j=1}^{n} f(a_j) \operatorname{Pr}_{D_j}$

(Erläuterung betreffend selbstadjungiert)

2.13. Seien A, B selbstadjungierte Operatoren. Dann sind folgende Aussagen gleichwertig:
2.13.1 Das Produkt AB ist selbstadjungiert
2.13.2 A und B kommutieren ($AB = BA$)
2.13.3 Es existieren Funktionen $f, g : R \to R$ und ein selbstadjungierter Operator K, so daß gelten:

$$A = f(K) \text{ und } B = g(K)$$

(Erläuterungen-Beweisskizze)

2.14. Seien A, B selbstadjungierte Operatoren und a,b reelle Zahlen. Dann ist auch $aA + bB$ ein selbstadjungierter Operator.
Beweis:

2.15 Definition (Norm eines Operators)
Sei A ein linearer Operator. Wir setzen

$$w(A) := \left\{ a \in R \middle| A(x) \leq a\|x\| \forall x \in H \right\}$$

$$\|A\| := \inf w(A)$$

2.16. Ist $A = \sum_{j=1}^{n} a_j \Pr_{D_j}$ ein selbstadjungierter Operator (Darstellung nach 2.10.) so gilt $\|A\| = \sup\left\{ |a_j| \,\middle|\, j = 1,.., n \right\}$

Postulat II:
Jede Messung an einem Quantensystem (bzw.das entsprechendes Meßgerät) kann mit einem selbstadjungierten Operator auf einem (geeigneten) Hilbertraum identifiziert werden und umgekehrt. Dabei entsprechen die Eigenwerte des Operators den möglichen Meßwerten.*(Erläuterungen speziell zur Bedeutung von 2.13.)*

Zum Fall unendlich-dimemsionaler Hilberträume

Bemerkung: Im unendlich-dim. Fall gibt es beschränkte und unbeschränkte Operatoren. Weiter hat man zwischen selbstadjungierten Operatoren mit kontinuierlichem und solchen mit diskretem Spektrum zu unterscheiden. Nur für Letztere ist eine Darstellung entsprechend 2.10. möglich, wobei $n = +\infty$ sein kann.
Gültig bleibt 2.13..

Die Problematik am Beispiel

$H = L_2(R^+)$ $\approx$ ein Teilchen im Raum $R^+ = [0,+\infty)$
$\hat{H}$ = linearer Raum aller meßbaren komplexen Funktionen auf R^+
$\Rightarrow$ H ist linearer Unterraum von $\hat{H}$
Für jedes $f \in \hat{H}$ ist eine lineare Abbildung O_f von $\hat{H}$ in $\hat{H}$ definiert durch

$$O_f\, g = fg \qquad (g \in \hat{H})$$

2.17. Bemerkung:
Ist f beschränkt, so ist die Einschränkung von O_f auf H ein linearer Operator auf H.
Ist f nicht beschränkt, so ist i.a. **nicht** $O_f\, g \in H$ für alle $g \in H$.
Spezialfälle: f=I – identische Abbildung, f= $\chi_Y \Leftrightarrow O_f$ Projektor

Wir betrachten nun für $n,m \geq 1$ Zerlegungen $Z^{n,m} = (Z_k^{n,m})_{k=1}^{n2^m}$ von R^+ definiert durch

$$Z_k^{n,m} := \left[\frac{k}{2^m}, \frac{k+1}{2^m}\right) \quad (k=0,1,..,n2^m-1)$$

$$Z_{n2^m}^{n,m} := [n,+\infty)$$

Weiter betrachten wir (beschränkte) Funktionen auf R^+ definiert durch

$$f^{n,m} := \sum_{k=0}^{n2^m} \frac{k}{2^m} \chi_{Z_k^{n,m}} \quad (n,m \geq 1)$$

2.18 Bemerkung

Sei $n,m \geq 1$. Dann ist $O_{f^{n,m}}$ ein beschränkter Operator auf *H* und es gilt

$$O_{f^{n,m}} = \sum_{k=0}^{n2^m} \frac{k}{2^m} \mathrm{Pr}_{H_k^{n,m}}$$

Dabei sind für $k=0,1,..,n2^m$ durch $\frac{k}{2^m}$ die Eigenwerte gegeben mit den dazu gehörigen Eigenräumen

$$H_k^{n,m} = \left\{ g \in H \,\middle|\, g\chi_{Z_k^{n,m}} = g \right\}$$

Ferner ist $\left\| O_{f^{n,m}} \right\| = n$ und im Sinne von Def. 2.12. gilt für $n_2 \geq n_1, m_2 \geq m_1$ stets

$$f^{n_1,m_1}(O_{f^{n_2,m_2}}) = O_{f^{n_1,m_1}}$$

Deutung/Interpretation

Grenzbetrachtungen

- $O_{f^{n,m}} \xrightarrow[n\to+\infty]{}$ *unbeschränkter Operator mit in H dichtem*

Definitionsbereich – es ergibt sich eine Darstellung als unendliche Linearkombination von Projektoren

- $O_{f^{n,m}} \xrightarrow[m\to+\infty]{}$ *beschränkter Operator* – die Darstellung als Linearkombination von Projektoren geht verloren
- $O_{f^{n,m}} \xrightarrow[n,m\to+\infty]{} O_I$ - *unbeschränkter Operator mit in H dichtem Definitionsbereich* – es gibt keine Darstellung als Linearkombination von Projektoren
- Im Sinne einer allgemeineren Begriffsbildung sind alle betrachteten Operatoren selbstadjungiert und unter Verwendung der „Spektraltheorie“ kann man zeigen, daß stets gilt

$$O_{f^{n,m}} = f^{n,m}(O_I)$$

- Diskussion aus Sicht von Messungen (Beispiel und allgemeiner Fall von selbstadjungierten Operatoren)

- die Rolle der endlich-dimensionalen Räume und reale Messungen

Bemerkung: Im allgemeinen Fall separabler Hilberträume unterscheidet man symmetrische und selbstadjungierte Operatoren. Dabei ist ein Operator A nach Def. symmetrisch $\Leftrightarrow \langle Ax | y \rangle = \langle x | Ay \rangle \quad (x, y \in D(A))$

Ist A ein beschränkter Operator, so ist (analog zum endlich-dim. Fall) A selbstadjungiert $\Leftrightarrow \langle Ax | y \rangle = \langle x | Ay \rangle \quad (x, y \in H) \Leftrightarrow A$ symmetrisch

Allgemein haben wir nur: A selbstadjungiert$\Rightarrow A$ symmetrisch

(*Für Details siehe Seminarvortrag zu selbstadjungierten Operatoren)*

Beispiele für selbstadjungierte Operatoren im Fall *H*= $L_2(R^d)$

(ein Teilchen im Raum R^d*)*

- O_{f_k} mit $f_k(x_1,..,x_d) = x_k$ - k-te Komponente des Ortes

  unbeschränkter Operator

- $a\frac{\partial}{\partial x_k}$ - k-te Komponente der Geschwindigkeit / Impuls

  unbeschränkter Operator

- $b\Delta := b\sum_{k=1}^{d}\frac{\partial^2}{\partial x_k^2}$ - kinetische Energie

  unbeschränkter Operator

- $b\Delta + O_u$ - Hamiltonoperatoren

  unbeschränkter Operator

- Integraloperatoren *K* mit gegebenem Kern $k : R^d \times R^d \to C$ mit

  $k(x,y) = \bar{k}(y,x)$ *und* $\int |k(x,y)|^2 l(dx)l(dy) < +\infty$

$Kg(x) := \int k(x,y)g(y)l(dy)$ $(x\in R^d, g \in H)$ - beschränkter Operator

Spezialfälle: eindim. Projektor, Fall unter 2.11

Bemerkung: Im Fall unbeschränkter Operatoren wird dem jeweiligen formalen Ansatz der maximale Definitionsbereich zugeordnet.
Bei beschränkten Operatoren ist das der gesamte Hilbertraum

Beispiel: Die Operatoren O_f und $\frac{d}{dx}$ kommutieren nicht und deren Produkt ist nicht selbstadjungiert. *(Deutung-Bedeutung)*