

3. Operatoren

3.0 Motivation

Um das Grundkonzept der Quantenmechanik zu vervollständigen, benötigen wir jetzt die linearen Operatoren auf Hilberträumen. Das wird sofort deutlich, wenn man sich die grundlegenden Axiome der Quantenmechanik ansieht. In einer Formulierung (von vielen) lauten sie:

1) Der Raum der Zustände ist ein Hilbertraum H , auf dem ein selbstadjungierter Hamiltonoperator \hat{H} definiert ist. Das System wird zu jeder Zeit t durch einen Strahl im Hilbertraum beschrieben; ein Strahl $\psi(t)$ ist die Äquivalenzklasse von normierten Vektoren ψ mit $\langle \psi | \psi \rangle = 1$, wobei $\psi_1 \sim \psi_2$, falls $\psi_1 = e^{i\alpha} \psi_2$.

2) Die Zeitentwicklung wird durch die Schrödingergleichung

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(t) = \hat{H} \psi(t)$$

beschrieben.

3) Observable werden durch selbstadjungierte Operatoren \hat{A} beschrieben.

4) Die möglichen Ergebnisse einer Messung von \hat{A} sind die verschiedenen Eigenwerte λ_n von \hat{A} .

5) Die Wahrscheinlichkeit, dass als Messergebnis λ auftritt, ist

$$W(\lambda) = \sum_{\lambda_m = \lambda} |\langle \psi_m | \psi \rangle|^2.$$

Der Erwartungswert von \hat{A} im Zustand ψ ist $\langle \psi | \hat{A} | \psi \rangle$.

Uns werden die folgenden Klassen von Operatoren begegnen:

- Die selbstadjungierten Operatoren garantieren den Zusammenhang mit dem Experiment.

- Die inversen Operatoren spielen die Rolle von Resolventen, als formale Basis der Greenschen Funktionen.
- Die unitären Operatoren vermitteln Transformationen von Basissätzen des Hilbertraums und erweitern damit das Konzept der orthogonalen Transformationen in endlichdimensionalen Vektorräumen.
- Die Projektionsoperatoren erlauben es, den Hilbertraum in Teilräume zu segmentieren.
- Die Zeitentwicklungsoperatoren treten auf, wenn Quantensysteme eine nichttriviale Zeitentwicklung haben.

3.1 Definitionsbereich

Operatoren in der Quantenmechanik sind in der Regel Homomorphismen $\hat{A} : D_A \mapsto H$, wobei H der Hilbertraum des betrachteten Systems und $D_A \subseteq H$ ein dichter Unterraum von H ist. (Man sagt von einer Teilmenge, sie liegt dicht in einem metrischen Raum, wenn man jeden Punkt des Gesamtraums beliebig genau durch einen Punkt der Teilmenge approximieren kann.) Obwohl es natürlich wünschenswert wäre, Operatoren auf ganz H anwenden zu können, ist dies für viele praktisch interessante Operatoren nicht möglich; damit der Operatorbegriff sinnvoll bleibt, sollte allerdings zumindest D_A in H dicht sein.

Eine Abbildung $\hat{A} : |v\rangle \mapsto |w\rangle := \hat{A}|v\rangle$ heißt lineare Transformation oder linearer Operator, wenn gilt:

$$\hat{A}(\alpha_1 |v_1\rangle + \alpha_2 |v_2\rangle) = \alpha_1 \hat{A}|v_1\rangle + \alpha_2 \hat{A}|v_2\rangle$$

Unter den so definierten Operatoren sind zwei spezielle:

$$\text{Nulloperator } \mathbf{0} : \mathbf{0}|v\rangle = |0\rangle \quad \forall |v\rangle \in H$$

$$\text{Einsoperator } \mathbf{1} : \mathbf{1}|v\rangle = |v\rangle \quad \forall |v\rangle \in H$$

Beispiel:

Im Fall $H = L^2(\mathbb{R})$ lassen sich viele wichtige Operatoren ausdrücken als Polynome von x (der Operator, der die Funktion $\psi(x)$ mit x multipliziert) und $\frac{\partial}{\partial x}$. Ein wichtiges Beispiel ist der Impulsoperator $\hat{p} : \psi \mapsto -i\hbar \psi'$. Funktionen im Definitionsbereich müssen nicht nur differenzierbar sein, sondern ihre Abbildung muss außerdem quadratintegrierbar sein. Maximaler

Definitionsbereich von \hat{p} ist daher

$$D_p = \left\{ \phi \in L^2(\mathbb{R}) \mid \phi \text{ differenzierbar und } \phi' \in L^2(\mathbb{R}) \right\}$$

oder knapper

$$D_p = \left\{ \phi \in L^2(\mathbb{R}) \mid \int dx \left| \frac{\partial \phi(x)}{\partial x} \right|^2 < \infty \right\}$$

unter impliziter Forderung der Existenz von Ableitung und Integral.

Im Folgenden sei $\hat{A} : D_A \mapsto H$ ein linearer Operator mit Definitionsbereich $D_A \subseteq H$; der Definitionsbereich D_A sei ein dichter Unterraum von H , und H sei separabel.

Zwei Operatoren werden als gleich bezeichnet ($\hat{A} = \hat{B}$), wenn sie sowohl in ihren Werten wie in ihren Definitionsbereichen übereinstimmen:

$$D_A = D_B; \quad \hat{A}|v\rangle = \hat{B}|v\rangle \quad \forall |v\rangle \in D_A$$

3.2 Inverser Operator

Für einen Operator $\hat{A} : D_A \mapsto H$ nennen wir die Menge

$$R_A := \{ \hat{A}|v\rangle \mid |v\rangle \in D_A \}$$

das Bild des Operators \hat{A} (R von Englisch range). Wenn D_A ein Vektorraum ist, dann ist R_A auch ein Vektorraum.

Inverser Operator: Ist \hat{A} injektiv, so existiert eine Umkehrung

$$\hat{A}^{-1} : R_A \mapsto D_A, \quad \hat{A}^{-1}\hat{A} = \mathbb{1}_{D_A}$$

Für alle $|w\rangle \in R_A$, $|w\rangle = \hat{A}|v\rangle$ gilt

$$\hat{A}\hat{A}^{-1}|w\rangle = \hat{A}\hat{A}^{-1}\hat{A}|v\rangle = \hat{A}|v\rangle = |w\rangle$$

und damit

$$\hat{A}\hat{A}^{-1} = \mathbb{1}_{R_A}$$

Der Operator \hat{A}^{-1} ist stets ein Isomorphismus, und fall \hat{A} isometrisch ist, so ist es auch \hat{A}^{-1} . Insbesondere gilt: unitäre Operatoren sind stets umkehrbar, und ihre Umkehrung ist wieder unitär. Im allgemeinen müsste man sogar zwischen rechts- und linksinversen Operatoren unterscheiden.

3.3 Adjungierter Operator

Wir stellen die Definition eines symmetrischen Operators voran:

Der Operator \hat{A} heißt symmetrisch, wenn gilt:

$$\forall_{|v_1\rangle, |v_2\rangle \in D_A} \langle v_1 | \hat{A} | v_2 \rangle = \langle v_2 | \hat{A} | v_1 \rangle^*$$

Bislang haben wir den Operator \hat{A} als etwas aufgefasst, das „nach rechts“ wirkt, also auf einen Vektor: $\hat{A} : |v\rangle \mapsto \hat{A}|v\rangle$. Für die Wahl des Definitionsbereichs $D_A \subseteq H$ ist es dabei entscheidend, dass die Wirkung von \hat{A} sinnvoll erklärt ist und das Ergebnis wieder in H liegt.

Da zu jedem Element $|v\rangle$ des Hilbertraums eine dazu duale Linearform (lineares Funktional) $\langle v|$ existiert, deren Wirkung durch das Skalarprodukt $\langle v| : H \mapsto \mathbb{C}$, $|u\rangle \mapsto \langle v|u\rangle$ erklärt ist, kann man auch die Wirkung des Operators „nach links“, also auf Linearformen, untersuchen:

$$\hat{A} : \langle v| \mapsto \langle v|\hat{A} \equiv \langle v| \circ \hat{A}$$

Wir definieren nun den **adjungierten** Operator \hat{A}^\dagger mit dem Definitionsbereich

$$D_{A^\dagger} := \left\{ |v\rangle \in H \mid \langle v|\hat{A} \text{ ist beschränkt auf } D_A \right\}$$

und mit der Wirkung

$$\hat{A}^\dagger : |v\rangle \mapsto \hat{A}^\dagger|v\rangle \quad \text{mit} \quad \left(\hat{A}^\dagger|v\rangle \right)^\dagger \Big|_{D_A} = \langle v|\hat{A}$$

Ab sofort verwenden wir das Symbol \dagger („dagger“) für die kanonische eindeutige Abbildung (vgl. Kap. 2.2) zwischen H und $H^* \equiv H^\dagger$:

$$|u\rangle^\dagger = \langle u|, \quad \langle u|^\dagger = |u\rangle$$

Die Schreibweise $\Big|_{D_A}$ bedeutet „eingeschränkt auf D_A “. Die Dichtheit von D_A in H garantiert dabei die Eindeutigkeit dieser Definition. Für Operatoren, die auf dem gesamten Hilbertraum definiert sind, also mit $D_A = H$, ist $\langle v|\hat{A}$ für beliebiges $\langle v|$ bereits eine wohldefinierte Linearform auf ganz H , und somit beschränkt; es gilt daher auch $D_{A^\dagger} = H$.

Wenn wir eine abzählbare orthonormierte Basis $\{|e_n\rangle\}$ von H mit $|e_n\rangle \in D_A$ kennen, dann können wir den Definitionsbereich alternativ formulieren. Dazu stellen wir fest, dass

$$\langle v|\hat{A} = \langle v|\hat{A}\mathbb{1}_{D_A} = \sum_n \langle v|\hat{A}|e_n\rangle \langle e_n| \Big|_{D_A}$$

für beliebiges $|\nu\rangle \in \mathbf{H}$ eine wohldefinierte Linearform auf \mathbf{D}_A ist. Ohne die Einschränkung auf \mathbf{D}_A ist $\sum_n \langle \nu | \hat{A} | e_n \rangle \langle e_n |$ eine wohldefinierte Linearform auf ganz \mathbf{H} , also ein bra, genau dann, wenn

$$\sum_n |\langle \nu | \hat{A} | e_n \rangle|^2 < \infty.$$

Folglich gilt:

$$\mathbf{D}_{A^\dagger} := \left\{ |\nu\rangle \in \mathbf{H} \mid \sum_n |\langle \nu | \hat{A} | e_n \rangle|^2 < \infty \right\}$$

Auch die Wirkung von \hat{A}^\dagger können wir mithilfe der Basis $\{|e_n\rangle\}$ angeben:

$$\hat{A}^\dagger |\nu\rangle = \sum_n |e_n\rangle \langle e_n | \hat{A}^\dagger |\nu\rangle = \sum_n \left((\hat{A}^\dagger |\nu\rangle)^\dagger |e_n\rangle \right)^* |e_n\rangle = \sum_n \langle \nu | \hat{A} | e_n \rangle^* |e_n\rangle \quad (3.1)$$

Eigenschaften

Definition 3.1. Die **Norm** eines Operators $\hat{A} : (\mathbf{V}, \|\cdot\|_{\mathbf{V}}) \mapsto (\mathbf{W}, \|\cdot\|_{\mathbf{W}})$ ist definiert durch

$$\|\hat{A}\| := \sup_{|\nu\rangle \neq 0} \frac{\|\hat{A}|\nu\rangle\|_{\mathbf{W}}}{\|\nu\rangle\|_{\mathbf{V}}} = \sup_{\|\nu\rangle\|_{\mathbf{V}}=1} \|\hat{A}|\nu\rangle\|_{\mathbf{W}} \quad (3.2)$$

Aus dieser Definition folgt sofort $\|\hat{A}|\nu\rangle\| \leq \|\hat{A}\| \cdot \|\nu\rangle\|$.

Definition 3.2. Wir betrachten einen Operator $\hat{A} : (\mathbf{V}, \|\cdot\|_{\mathbf{V}}) \mapsto (\mathbf{W}, \|\cdot\|_{\mathbf{W}})$. Wir nennen dann den Operator \hat{A} **beschränkt**, wenn ein $\lambda > 0$ existiert, sodass gilt $\|\hat{A}\| < \lambda$. Wir nennen den Operator **stetig** in $|\nu_0\rangle \in \mathbf{V}$, wenn aus $|\nu_n\rangle \xrightarrow{n \rightarrow \infty} |\nu_0\rangle$ folgt $\hat{A}|\nu_n\rangle \xrightarrow{n \rightarrow \infty} \hat{A}|\nu_0\rangle$. Wir nennen den Operator stetig, wenn er in allen Punkten $|\nu\rangle \in \mathbf{V}$ stetig ist.

Satz 3.1. Es sei ein linearer Operator $\hat{A} : (\mathbf{V}, \|\cdot\|_{\mathbf{V}}) \mapsto (\mathbf{W}, \|\cdot\|_{\mathbf{W}})$ gegeben, dann sind die folgenden Aussagen äquivalent:

- 1) \hat{A} ist stetig.
- 2) \hat{A} ist stetig in $|\nu_0\rangle \in \mathbf{V}$.
- 3) \hat{A} ist beschränkt.

Beweis:

1 \Rightarrow 2 ist offensichtlich.

2 \Rightarrow 3: OBdA nehmen wir \hat{A} stetig in $|\nu_0\rangle = 0$. Angenommen, \hat{A} ist unbeschränkt, dann existiert für jedes $n \in \mathbb{N}$ ein $|\nu_n\rangle \in \mathbf{D}_A$, sodass $\|\hat{A}|\nu_n\rangle\| > n\|\nu_n\rangle\|$. Daraus folgt, dass $|\nu_n\rangle \neq 0$; oBdA können wir annehmen, dass $\|\nu_n\rangle\| = \frac{1}{n}$; damit gilt $|\nu_n\rangle \xrightarrow{n \rightarrow \infty} 0$ und $\|\hat{A}|\nu_n\rangle\| > n \cdot \frac{1}{n} = 1$, in Widerspruch zur Stetigkeit in $|\nu_0\rangle = 0$

3 \Rightarrow 1: Wir nehmen an, dass \hat{A} beschränkt ist, d.h. $\|\hat{A}|\nu\rangle\| \leq \lambda\|\nu\rangle\|$ für alle $|\nu\rangle \in \mathbf{D}_A$. Wenn $|\nu\rangle \in \mathbf{D}_A$ ist und $(|\nu_n\rangle)_{n \in \mathbb{N}}$ eine Folge aus \mathbf{D}_A , sodass $|\nu_n\rangle \xrightarrow{n \rightarrow \infty} |\nu\rangle$, dann haben wir

$$\|\hat{A}|\nu_n\rangle - \hat{A}|\nu\rangle\| = \|\hat{A}(|\nu_n\rangle - |\nu\rangle)\| \leq \lambda\|\nu_n\rangle - |\nu\rangle\| \xrightarrow{n \rightarrow \infty} 0$$

d.h. $\hat{A}|\nu_n\rangle \xrightarrow{n \rightarrow \infty} \hat{A}|\nu\rangle$, womit die Stetigkeit von \hat{A} bewiesen ist.

Wegen dieses Satzes wird in gängigen Darstellungen mal Stetigkeit, mal Beschränktheit von linearen Operatoren diskutiert, wobei es um gleichwertige Eigenschaften geht.

Satz 3.2. Es sei ein linearer Operator $\hat{A} : (\mathbf{V}, \|\cdot\|_{\mathbf{V}}) \mapsto (\mathbf{W}, \|\cdot\|_{\mathbf{W}})$ gegeben mit der Dimension $\dim \mathbf{V} = n_{\mathbf{V}} < \infty$, dann ist \hat{A} beschränkt.

Für unendlichdimensionale Räume gilt dieser Satz allerdings nicht, und in der Quantenmechanik sind viele physikalische Operatoren nicht beschränkt (nicht stetig). Die Unstetigkeit eines linearen Operators $\hat{A} : \mathbf{D}_A = \mathbf{V} \mapsto \mathbf{H}$, der auf einem Teilraum \mathbf{V} des Hilbertraums \mathbf{H} definiert ist, kann wie folgt interpretiert werden: Es existiert eine Folge von normierten Vektoren $(|e_n\rangle)_{n \in \mathbb{N}_0}$, sodass die Folge $(\alpha_n)_{n \in \mathbb{N}_0}$, gegeben durch $\alpha_n := \|\hat{A}|e_n\rangle\|$ unbeschränkt ist.

Beispiel:

Wir betrachten den Hamiltonoperator

$$\mathbf{H} := -\frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{x^2}{2}$$

auf dem Unterraum \mathbf{U} vom Hilbertraum L^2 der quadratintegrablen Funktionen

$$\mathbf{U} := \left\{ f \in C^2(\mathbb{R}) \cap L^2(\mathbb{R}) \mid x \mapsto f(x) = g(x) \sum_{j=0}^n c_j x^j, c_j \in \mathbb{R}, n \in \mathbb{N}_0, g(x) = e^{-\frac{x^2}{2}} \right\}$$

Wenn wir dann als Folge $(|e_n\rangle)_{n \in \mathbb{N}_0}$ die normierten Hermitefunktionen wählen, dann gilt $\alpha_n := \|He_n\| = n + \frac{1}{2}$ mit $n \in \mathbb{N}$; diese Folge ist offensichtlich nicht beschränkt, sodass H kein stetiger Operator ist.

Satz 3.3. Für beschränkte oder symmetrische Operatoren \hat{A} gilt stets: $D_{A^\dagger} \supseteq D_A$.

Definition 3.3 (selbstadjungierter Operator). Ist $\hat{A} = \hat{A}^\dagger$, also insbesondere $D_{A^\dagger} = D_A$ und D_A liegt dicht in H , so heißt \hat{A} **selbstadjungiert**. Selbstadjungierte Operatoren sind stets symmetrisch.

Definition 3.4 (Hermitizität). Ein beschränkter selbstadjungierter Operator heißt **hermitesch**.

Matrizelemente: Für $|\phi\rangle \in D_{A^\dagger}$ und $|\psi\rangle \in D_A$ gilt:

$$\langle \psi | \hat{A}^\dagger | \phi \rangle = \langle \phi | \hat{A} | \psi \rangle^*$$

Für die Matrizen gilt dann:

$$A^\dagger = A^{*T}$$

3.4 Unitäre Operatoren

Für unitäre Operatoren \hat{U} mit $D_U = H$ ist auch $D_{U^\dagger} = H$; ferner gilt für alle $|v_1\rangle, |v_2\rangle \in H$:

$$(\hat{U}^\dagger \hat{U} |v_1\rangle)^\dagger |v_2\rangle \stackrel{\text{Definition}}{=} (\hat{U} |v_1\rangle)^\dagger \hat{U} |v_2\rangle \stackrel{\text{Isometrie}}{=} (|v_1\rangle)^\dagger |v_2\rangle$$

und damit $\hat{U}^\dagger \hat{U} = \mathbb{1}$, also $\hat{U}^\dagger = \hat{U}^{-1}$ und auch $\hat{U} \hat{U}^\dagger = \mathbb{1}$.

Die Umkehrung gilt ebenfalls und ergibt einen Test auf Unitarität: Sei $\hat{A} : H \mapsto H$ ein Operator mit $\hat{A} \hat{A}^\dagger = \mathbb{1}$. Dann gilt für alle $|v_1\rangle, |v_2\rangle \in H$:

$$(\hat{A}^\dagger |v_1\rangle)^\dagger \hat{A}^\dagger |v_2\rangle = \langle v_1 | \hat{A} \hat{A}^\dagger |v_2\rangle = \langle v_1 | v_2 \rangle$$

\hat{A}^\dagger ist also isometrisch und damit insbesondere injektiv, da normerhaltend. Gilt zusätzlich $\hat{A}^\dagger \hat{A} = \mathbb{1}$, so ist \hat{A}^\dagger auch surjektiv, also ein isometrischer Isomorphismus, also unitär; \hat{A} muss dann ebenfalls unitär sein.

Es ist wichtig, tatsächlich beide Voraussetzungen, $\hat{A} \hat{A}^\dagger = \mathbb{1}$ und $\hat{A}^\dagger \hat{A} = \mathbb{1}$, zu prüfen, wie das folgende kanonische Gegenbeispiel zeigt:

Beispiel:

Hilbert's Hotel: Sei H ein separabler Hilbertraum mit orthonormierter Basis $\{|e_n\rangle\}$. Sei $\hat{A} : H \mapsto H$ ein Operator mit der Wirkung

$$\hat{A}|e_n\rangle = |e_{n+1}\rangle.$$

Dieser Operator eignet sich als Lösung des Problems: Was tut man in einem Hotel mit abzählbar vielen Zimmern, wenn alle Zimmer belegt sind und ein weiterer Gast eintrifft? Der Operator setzt den Bewohner von Zimmer 1 nach Zimmer 2 um, den von Zimmer 2 nach Zimmer 3 usw., und der neue Gast kann in Zimmer 1 einziehen; das ist eine Lösung, die in einem Hotel mit nur endlich vielen bereits besetzten Zimmern nicht funktioniert hätte. Der dazu adjungierte Operator \hat{A}^\dagger ist dann nach Gl. (3.1):

$$\begin{aligned} \hat{A}^\dagger &= \sum_{n'=1}^{\infty} \langle e_n | \hat{A} | e_{n'} \rangle^* | e_{n'} \rangle = \langle e_n | e_{n'+1} \rangle^* | e_{n'} \rangle = \sum_{n'=1}^{\infty} \delta_{n, n'+1} | e_{n'} \rangle \\ &= \begin{cases} 0 & \text{falls } n = 1 \\ \sum_{n''=2}^{\infty} \delta_{n, n''} | e_{n''-1} \rangle & \text{sonst} \end{cases} = \begin{cases} 0 & \text{falls } n = 1 \\ | e_{n-1} \rangle & \text{sonst} \end{cases} \end{aligned}$$

Offenbar ist $\hat{A}^\dagger \hat{A} = \mathbb{1}$, aber \hat{A} ist nicht unitär, da $\hat{A} \hat{A}^\dagger \neq \mathbb{1}$. Der Operator \hat{A} ist also injektiv, aber nicht surjektiv; andererseits ist \hat{A}^\dagger surjektiv, aber nicht injektiv.

Eine praktische Anwendung unitärer Operatoren ist die vielbenutzte unitäre Basistransformation. Für die Vektoren eines vollständigen diskreten Orthonormalsystems $\{|e_n\rangle\}$ gilt bei Einwirkung eines unitären Operators:

$$|\tilde{e}_n\rangle = \hat{U}|e_n\rangle = \sum_m |e_m\rangle \langle e_m | \hat{U} | e_n \rangle \quad (3.3)$$

Die transformierten Vektoren erfüllen die Relationen

$$\begin{aligned} \langle \tilde{e}_n | \tilde{e}_m \rangle &= \langle e_n | \hat{U}^\dagger \hat{U} | e_m \rangle = \langle e_n | e_m \rangle = \delta_{mn}, \\ \sum_n |\tilde{e}_n\rangle \langle \tilde{e}_n| &= \sum_n \hat{U} | e_n \rangle \langle e_n | \hat{U}^\dagger = \hat{U} \hat{U}^\dagger = \mathbb{1}. \end{aligned} \quad (3.4)$$

Die transformierten Vektoren sind also orthonormal und vollständig. Sie stellen ebenfalls eine Basis des Hilbertraums dar. Hat man eine beliebige (diskrete) Matrixdarstellung $\langle e_m | \hat{A} | e_n \rangle$ eines Operators \hat{A} , so kann man eine unitäre Basistransformation benutzen, um eine Eigendarstellung

$$\langle \tilde{e}_m | \hat{A} | \tilde{e}_n \rangle = a_n \delta_{mn}$$

zu finden. Das ist für eine unendlichdimensionale Matrixdarstellung im allgemeinen nicht möglich, aber die Methode der unitären Basistransformationen wird für Näherungen bei der Berechnung von Energiespektren komplexer Systeme verwendet.

3.5 Grundlagen der Spektraltheorie

In folgenden diskutieren wir wichtige Begriffe der Spektraltheorie, die für die Quantenmechanik von besonderer Bedeutung ist.

Definition 3.5. Sei $H = \langle V, \|\cdot\| \rangle$ ein Hilbertraum, sowie ein (im allgemeinen unbeschränkter) Operator $\hat{A} : V \rightarrow W$ gegeben, dann nennen wir $z \in \mathbb{K}$ den **Eigenwert** von \hat{A} , wenn ein $|v\rangle \in D_A$, ($|v\rangle \neq 0$) existiert, das die **Eigenwertgleichung**

$$\hat{A}|v\rangle = z|v\rangle$$

erfüllt.

In diesem Fall ist der Operator $z\mathbb{1} - \hat{A}$ nicht injektiv, da

$$(z\mathbb{1} - \hat{A})|v\rangle = 0,$$

und man nennt den Kern, d.h. die Vektoren, die vom Operator $z\mathbb{1} - \hat{A}$ auf 0 abgebildet werden, $K(z\mathbb{1} - \hat{A}) \neq \{0\}$ den **Eigenraum**, und seine Dimension $\dim K(z\mathbb{1} - \hat{A})$ ist die **Vielfachheit** (Entartungsgrad) des Eigenwertes z . Den Vektor $|v\rangle$ nennt man den **Eigenvektor** zum Eigenwert z . Nun zum Fall, dass z kein Eigenwert von \hat{A} ist. Wenn es einen auf einer dichten Teilmenge des Raumes H definierten, beschränkten Operator $\hat{R}(z, \hat{A})$ gibt mit

$$\hat{R}(z, \hat{A})(\hat{A} - z\mathbb{1}) = (\hat{A} - z\mathbb{1})\hat{R}(z, \hat{A}) = \mathbb{1}$$

dann ist z Element der sog. **Resolventenmenge** von \hat{A} , d.h. der Menge

$$\rho(\hat{A}) := \{z \in \mathbb{K} \mid (z\mathbb{1} - \hat{A}) \text{ invertierbar}\}.$$

Den Operator $\hat{R}(z, \hat{A})$ definiert durch

$$\rho(\hat{A}) \rightarrow L(V), \quad z \rightarrow \hat{R}(z, \hat{A}) := (z\mathbb{1} - \hat{A})^{-1}$$

(mit dem normierten Raum $(L(V), \|\cdot\|_{\text{op}})$ der linearen Abbildungen $V \rightarrow V$) nennt man die **Resolvente** von \hat{A} im Punkt z . Die Menge

$$\sigma(\hat{A}) := \mathbb{K} \setminus \rho(\hat{A}),$$

also das Komplement der Resolventenmenge, heißt das **Spektrum** von \hat{A} .

Das Spektrum kann man jetzt einteilen, indem man verschiedene Gründe der Nichtexistenz einer beschränkten Resolvente zugrundelegt:

a) Die Menge der Eigenwerte von \hat{A} nennt man auch das **Punktspektrum** (oder **diskretes Spektrum** oder **Eigenwertspektrum**) $\sigma_p(\hat{A}) \subset \sigma(\hat{A})$:

$$\sigma_p(\hat{A}) := \{z \in \mathbb{K} \mid (z\mathbb{1} - \hat{A}) \text{ nicht injektiv}\}.$$

Diese Menge ist abzählbar, d.h. im Zusammenhang mit Eigenwerten treten Summen auf. Wenn H endlichdimensional ist, dann besteht das Spektrum von \hat{A} nur aus Eigenwerten.

b) Die Menge $\sigma_c(\hat{A}) \subset \sigma(\hat{A})$, für die $\hat{R}(z, \hat{A})$ existiert und das Bild $B(z\mathbb{1} - \hat{A})$ in H dicht ist, nennen wir das **kontinuierliche Spektrum**. Dies entspricht dem Fall, dass der Operator $z\mathbb{1} - \hat{A}$ injektiv, jedoch nicht surjektiv ist, aber ein dichtes Bild besitzt, das heißt es existiert ein Inverses, das nur auf einem dichten Teilraum des Hilbertraumes H definiert ist:

$$\sigma_c(\hat{A}) := \{z \in \mathbb{K} \mid (z\mathbb{1} - \hat{A}) \text{ injektiv, } B(z\mathbb{1} - \hat{A}) \text{ dicht in } H\}.$$

Dieser kontinuierliche Anteil des Spektrums ist eine in der Regel überabzählbar große Menge, und es treten statt der Summen beim diskreten Spektrum (Lebesgue-)Integrale auf. Das Spektrum selbstadjungierter Operatoren auf abzählbar-unendlichdimensionalen Hilberträumen besteht aus einem diskreten und einem kontinuierlichen Anteil, wobei σ_p oder σ_c leer sein können, aber nicht beide. Eine zusätzliche Komplikation besteht darin, dass wichtige Operatoren der Quantenmechanik wie Orts- und Impuls-Operator ein rein kontinuierliches Spektrum mit verallgemeinerten Eigenfunktionen besitzen, die nicht quadratintegrierbar sind. Für die kontinuierlichen Eigenwerte $z \in \sigma_c(\hat{A})$ wird die Eigenwertgleichung

$$\hat{A}|v\rangle = z|v\rangle$$

durch Distributionen $|v\rangle$ erfüllt. In der Physik bezeichnet man die Resolvente häufig als Greensche Funktion.

Satz 3.4. Es sei H ein \mathbb{C} -Hilbertraum und $\hat{A} : D_A \subseteq H \rightarrow H$ ein selbstadjungierter Operator. Falls \hat{A} Eigenwerte besitzt, so sind diese reell. Falls \hat{A} mindestens zwei verschiedene Eigenwerte besitzt, so sind die zugehörigen Eigenvektoren paarweise orthogonal:

$$\langle a_n | a_m \rangle = \delta_{nm}, \quad \langle a | a' \rangle = \delta(a - a')$$

Beweis:

Es seien $|\mathbf{u}\rangle, |\mathbf{v}\rangle$ Eigenvektoren von \hat{A} zu den Eigenwerten λ, μ :

$$\hat{A}|\mathbf{u}\rangle = \lambda|\mathbf{u}\rangle, \quad \hat{A}|\mathbf{v}\rangle = \mu|\mathbf{v}\rangle$$

Dann gilt einerseits

$$\langle \mathbf{u} | \hat{A} \mathbf{v} \rangle = \langle \mathbf{u} | \mu \mathbf{v} \rangle = \mu \langle \mathbf{u} | \mathbf{v} \rangle \quad (3.5)$$

und andererseits wegen $|\mathbf{u}\rangle, |\mathbf{v}\rangle \in \mathcal{D}_A = \mathcal{D}_{A^\dagger}$ und $\forall |\mathbf{w}\rangle \in \mathcal{D}_A$ $\hat{A}|\mathbf{w}\rangle = \hat{A}^\dagger|\mathbf{w}\rangle$:

$$\langle \mathbf{u} | \hat{A} \mathbf{v} \rangle = \langle \hat{A}^\dagger \mathbf{u} | \mathbf{v} \rangle = (\hat{A}|\mathbf{u}\rangle)^\dagger |\mathbf{v}\rangle = (\lambda|\mathbf{u}\rangle)^\dagger |\mathbf{v}\rangle = \lambda^* \langle \mathbf{u} | \mathbf{v} \rangle$$

Falls $|\mathbf{u}\rangle = |\mathbf{v}\rangle$ und $\lambda = \mu$, dann folgt daraus $\lambda = \lambda^*$, d.h. λ ist reell. Damit wissen wir also, dass es sich bei λ und μ um reelle Zahlen handelt, und wir können anstelle der letzten Gleichung schreiben

$$\langle \mathbf{u} | \hat{A} \mathbf{v} \rangle = \lambda \langle \mathbf{u} | \mathbf{v} \rangle$$

und durch Subtraktion von Gl. (3.5) folgt

$$(\lambda - \mu) \langle \mathbf{u} | \mathbf{v} \rangle = 0 \quad (3.6)$$

Also muss wegen $\lambda \neq \mu$ gelten: $|\mathbf{u}\rangle \perp |\mathbf{v}\rangle$.

Wegen dieses Satzes können wir also die Eigenwerte selbstadjungierter Operatoren mit Messwerten identifizieren. Der selbstadjungierte Operator selbst repräsentiert die Messgröße und wird **Observable** genannt. Der Zustand des Systems während der Messung wird mit einem Vektor des Hilbertraums identifiziert, der im Definitionsbereich des Operators liegt. Zugänglich sind im Prinzip nur **Erwartungswerte** eines Operators \hat{A} , gegeben durch

$$\langle \hat{A} \rangle := \langle \mathbf{v} | \hat{A} | \mathbf{v} \rangle$$

Der folgende Satz garantiert, dass die Eigenvektoren eines selbstadjungierten Operators \hat{A} den ganzen Hilbertraum aufspannen:

Satz 3.5. Die Eigenvektoren eines selbstadjungierten Operators \hat{A} auf einem endlichdimensionalen Hilbertraum sind vollständig.

Die Verallgemeinerung dieses Satzes auf unendlich viele Dimensionen machen den eigentlichen Kern der Hilbertraumtheorie aus. Wir erhalten damit

eine **Spektralzerlegung der Eins**, d.h. eine Zerlegung der Eins in der Eigenbasis des Operators \hat{A} :

$$\mathbb{1} = \sum_{\mathbf{a}_n \in \sigma_p} |\mathbf{a}_n\rangle \langle \mathbf{a}_n| + \int_{\sigma_c} d\mathbf{a} |\mathbf{a}\rangle \langle \mathbf{a}| \quad (3.7)$$

Wir schreiben für die Eins auch $\mathbb{1} = \mathbb{1}_A$, um zu betonen, dass es sich um die Zerlegung in der Eigenbasis des Operators \hat{A} handelt. Mit den Eigenwertgleichungen $\hat{A}|\mathbf{a}_n\rangle = \mathbf{a}_n|\mathbf{a}_n\rangle$ und $\hat{A}|\mathbf{a}\rangle = \mathbf{a}|\mathbf{a}\rangle$ erklärt man aus Gl. (3.7) die Spektralzerlegung von \hat{A} , d.h. die Darstellung des Operators \hat{A} in der Eigenbasis:

$$\hat{A} = \hat{A} \mathbb{1}_A = \sum_n \mathbf{a}_n |\mathbf{a}_n\rangle \langle \mathbf{a}_n| + \int d\mathbf{a} \mathbf{a} |\mathbf{a}\rangle \langle \mathbf{a}| \quad (3.8)$$

Komponentendarstellung von kets

Mit der Vollständigkeitsrelation erhält man auch die Spektralzerlegung jedes Hilbertraumvektors $|\psi\rangle$:

$$|\psi\rangle = \mathbb{1}_A |\psi\rangle = \sum_n \psi_n |\mathbf{a}_n\rangle + \int d\mathbf{a} \psi(\mathbf{a}) |\mathbf{a}\rangle \quad (3.9)$$

mit den Komponenten $\psi_n := \langle \mathbf{a}_n | \psi \rangle$ und $\psi(\mathbf{a}) := \langle \mathbf{a} | \psi \rangle$.

Wenn man den Vektor $|\psi\rangle$ in der Eigenbasis als Tupel

$$|\psi\rangle = \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \\ \vdots \\ \psi(\mathbf{a}) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \langle \mathbf{a}_1 | \psi \rangle \\ \langle \mathbf{a}_2 | \psi \rangle \\ \vdots \\ \langle \mathbf{a} | \psi \rangle \end{pmatrix}$$

schreibt, sieht man besonders deutlich, dass kets basisunabhängig sind, während Tupel und Funktionen von der Basis abhängen.

Matrixdarstellung von Operatoren

Mit der Vollständigkeitsrelation erhält man auch die Spektralzerlegung jedes Operators \hat{B} :

$$\hat{B} = \mathbb{1}_A \hat{B} \mathbb{1}_A = \sum_{nm} B_{nm} |\mathbf{a}_n\rangle \langle \mathbf{a}_m| + \int d\mathbf{a} \int d\mathbf{a}' B(\mathbf{a}, \mathbf{a}') |\mathbf{a}\rangle \langle \mathbf{a}'| \quad (3.10)$$

mit den Matrixelementen $B_{nm} := \langle \mathbf{a}_n | \hat{B} | \mathbf{a}_m \rangle$ und $B(\mathbf{a}, \mathbf{a}') = \langle \mathbf{a} | \hat{B} | \mathbf{a}' \rangle$. Diese Darstellung des Operators \hat{B} nennt man Matrixdarstellung des Operators \hat{B} ; auch sie ist basisabhängig.

3.6 Orts- und Impulsdarstellung

Der Ortsoperator hat ein rein kontinuierliches Spektrum und daher die Spektralzerlegung

$$\hat{q} = \int dx x|x\rangle\langle x|. \quad (3.11)$$

Die Spektralzerlegung eines ket $|\psi\rangle$ in der Ortsbasis lautet dann

$$|\psi\rangle = \mathbb{1}_q|\psi\rangle = \int dx \psi(x)|x\rangle \quad (3.12)$$

mit den Ortskomponenten $\psi(x) = \langle x|\psi\rangle$. Die Darstellung von $|\psi\rangle = \langle x|\psi\rangle$ nennt man **Ortsdarstellung** von $|\psi\rangle$. Offenbar ist

$$\langle x|\hat{q}|\psi\rangle = x\langle x|\psi\rangle = x\psi(x),$$

d.h. die Abbildungsvorschrift des Ortsoperators im Ortsbild ist die Multiplikation der Ortsfunktion mit ihrem Argument:

$$\langle x|\hat{q} = x\langle x|$$

Der Impulsoperator \hat{p} hat ebenfalls ein rein kontinuierliches Spektrum und lässt sich also schreiben als

$$\hat{p} = \int dp p|p\rangle\langle p|. \quad (3.13)$$

Die Spektralzerlegung eines ket $|\psi\rangle$ in der Impulsbasis lautet dann

$$|\psi\rangle = \mathbb{1}_p|\psi\rangle = \int dp \tilde{\psi}(p)|p\rangle \quad (3.14)$$

mit den Impulskomponenten $\tilde{\psi}(p) = \langle p|\psi\rangle$. Die Darstellung von $|\psi\rangle = \langle p|\psi\rangle$ nennt man **Impulsdarstellung** von $|\psi\rangle$. Nun braucht man noch eine Vorschrift zum Wechsel von einer Darstellung zur anderen. Das wird durch die Transformationselemente

$$\langle x|p\rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{ipx} \quad (3.15)$$

geleistet. Damit erhält man

$$\tilde{\psi}(p) = \langle p|\psi\rangle = \langle p|\mathbb{1}_q|\psi\rangle = \int dx \langle p|x\rangle\langle x|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-ipx} \psi(x),$$

d.h. die Impulsdarstellung ist gerade die **Fouriertransformierte** der Ortsdarstellung. Umgekehrt gilt:

$$\psi(x) = \langle x|\psi\rangle = \langle x|\mathbb{1}_p|\psi\rangle = \int dp \langle x|p\rangle\langle p|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{ipx} \tilde{\psi}(p),$$

d.h. die Ortsdarstellung erhält man aus der Impulsdarstellung durch **inverse Fouriertransformation**. Die Abbildungsvorschrift für den Impulsoperator im Ortsraum ist

$$\begin{aligned} \langle x|\hat{p}|\psi\rangle &= \int dp p \langle x|p\rangle\langle p|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int dp p e^{ipx} \tilde{\psi}(p) \\ &= \left(-i \frac{\partial}{\partial x}\right) \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int dp e^{ipx} \tilde{\psi}(p) = \left(-i \frac{\partial}{\partial x}\right) \psi(x) \end{aligned}$$

d.h. die Abbildungsvorschrift des Impulsoperators im Ortsbild ist die Ableitung der Ortsfunktion nach ihrem Argument:

$$\langle x|\hat{p} = -i \frac{\partial}{\partial x} \langle x|. \quad (3.16)$$

3.7 Greensche Funktionen in der Quantenmechanik

Die Greensche Funktion zu einem Hamiltonoperator \hat{H} wird definiert als

$$\mathbb{1} = (z\mathbb{1} - \hat{H})G(z) = G(z)(z\mathbb{1} - \hat{H}) \quad (3.17)$$

wobei wir, wie in der Literatur üblich, in der Schreibweise von $G(z)$ nicht ausdrücklich auf den Operator \hat{H} verweisen, obwohl natürlich \hat{H} und $G(z)$ einander zugeordnet sind. Die Spektraldarstellung der Greenschen Funktion ist

$$G(z) = \sum_i \frac{|\psi_i\rangle\langle\psi_i|}{z - E_i} \quad (3.18)$$

wenn E_i und ψ_i die Eigenwertgleichung $\hat{H}|\psi_i\rangle = E_i|\psi_i\rangle$ erfüllen. Das folgt aus

$$G(z) = \frac{1}{z\mathbb{1} - \hat{H}} = \frac{1}{z\mathbb{1} - \hat{H}} \sum_i |\psi_i\rangle\langle\psi_i| = \sum_i \frac{1}{z\mathbb{1} - \hat{H}} |\psi_i\rangle\langle\psi_i| = \sum_i \frac{|\psi_i\rangle\langle\psi_i|}{z - E_i}$$

wobei der letzte Schritt auf die allgemeine Relation für eine beliebige Funktion eines Operators

$$F(\hat{A})|\phi_n\rangle = F(\lambda_n)|\phi_n\rangle \quad \text{falls } \hat{A}|\phi_n\rangle = \lambda_n|\phi_n\rangle \quad (3.19)$$

zurückgreift. In der Ortsdarstellung lautet die Greensche Funktion

$$G(\mathbf{x}, \mathbf{x}'; z) = \langle \mathbf{x} | G(z) | \mathbf{x}' \rangle \quad (3.20)$$

und damit in Kombination mit der Spektraldarstellung

$$\langle \mathbf{x} | G(z) | \mathbf{x}' \rangle = \sum_i \frac{\langle \mathbf{x} | \psi_i \rangle \langle \psi_i | \mathbf{x}' \rangle}{z - E_i} \quad (3.21)$$

Wir zeigen nun, dass $G(z)$ in der Spektraldarstellung tatsächlich Gl. (3.17) erfüllt:

$$(z\mathbb{1} - \hat{H})G(z) = \sum_i (z\mathbb{1} - \hat{H}) \frac{|\psi_i\rangle\langle\psi_i|}{z - E_i} = \sum_i (z - E_i) \mathbb{1} \frac{|\psi_i\rangle\langle\psi_i|}{z - E_i} = \sum_i |\psi_i\rangle\langle\psi_i| = \mathbb{1}$$

wobei wir die Spektralzerlegung der Eins verwendet haben.

Aus der Greenschen Funktion kann man dann messbare Größen wie die Spektralfunktion

$$A(\mathbf{x}, \mathbf{x}'; E) = -\frac{1}{\pi} \lim_{\eta \rightarrow 0} \text{Im} G(\mathbf{x}, \mathbf{x}'; E + i\eta) \quad (3.22)$$

berechnen, allerdings wegen der Singularitäten auf der reellen Achse ($\text{Im} z = 0$) nur unter Zuhilfenahme von funktionentheoretischen Hilfsmitteln. Die Spektralfunktion bzw. genauer ihre Fouriertransformierte $A(\vec{k}, E)$ wird in Festkörpern durch winkelaufgelöste Photoemissionsspektroskopie (ARPES) gemessen, die Zustandsdichte

$$N(E) = \int d\mathbf{x} A(\mathbf{x}, \mathbf{x}; E) \quad (3.23)$$

durch gewöhnliche (winkelintegrierte) Photoemissionsspektroskopie. Die Ladungsdichte ergibt sich als

$$\rho(\mathbf{x}) = \int_{-\infty}^{E_F} dE A(\mathbf{x}, \mathbf{x}; E), \quad (3.24)$$

und kann an Oberflächen zum Beispiel durch Rastertunnelspektroskopie gemessen werden. Die Greensche Funktion eignet sich besonders gut für Störungstheorie. Außerdem sind Greensche Funktionen nützlich, um bei Randwertproblemen bei gewöhnlichen linearen Differentialgleichungen Lösungen zu konstruieren, die die Randbedingungen erfüllen.

Beispiel:

Greensche Funktion zum Operator $\hat{H} = -\nabla_{\vec{x}}^2$: Dieser Operator erfüllt die Eigenwertgleichung

$$\hat{H}\phi_n(\mathbf{x}) = \lambda_n \phi_n(\mathbf{x}) \quad (3.25)$$

mit den Eigenfunktionen und Eigenwerten

$$\phi_n(\mathbf{x}) = \frac{1}{\sqrt{\Omega}} e^{i\vec{k}\vec{x}}, \quad \lambda_n = \vec{k}^2, \quad (3.26)$$

wobei Ω das Volumen ist, auf dem \vec{x} definiert ist; die Komponenten des Vektors \vec{k} sind reell. Also ist das Spektrum kontinuierlich und läuft von 0 bis ∞ . Die Greensche Funktion erhält man entweder als Lösung der Gleichung

$$(z + \nabla_{\vec{x}}^2)G(\vec{x}, \vec{x}'; z) = \delta(\vec{x} - \vec{x}') \quad (3.27)$$

oder aus der Spektralzerlegung

$$G(\vec{x}, \vec{x}'; z) = \sum_{\vec{k}} \frac{\langle \vec{x} | \vec{k} \rangle \langle \vec{k} | \vec{x}' \rangle}{z - k^2} = \int \frac{d\vec{k}}{(2\pi)^d} \frac{e^{i\vec{k}(\vec{x} - \vec{x}')}}{z - k^2} \quad (3.28)$$

mit der Dimensionalität d und unter Verwendung von

$$\langle \vec{x} | \vec{k} \rangle = \frac{1}{\sqrt{\Omega}} e^{i\vec{k}\vec{x}}$$

und der Beziehung

$$\sum_{\vec{k}} \xrightarrow{\Omega \rightarrow \infty} \frac{\Omega}{(2\pi)^d} \int d\vec{k}.$$

Dreidimensionaler Fall ($d = 3$):

Mit $\vec{r} = \vec{x} - \vec{x}'$, $r = |\vec{x} - \vec{x}'|$, und $\vartheta = \angle(\vec{k}, \vec{r})$ finden wir für Gl. (3.28)

$$\begin{aligned} G(\vec{x}, \vec{x}'; z) &= \frac{1}{4\pi^2} \int_0^\infty dk \frac{k^2}{z - k^2} \int_0^\pi d\vartheta \sin \vartheta e^{i\mathbf{k}\mathbf{r} \cos \vartheta} \\ &= \frac{1}{4\pi^2} \int_0^\infty dk \frac{k^2}{z - k^2} \frac{e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} - e^{-i\mathbf{k}\mathbf{r}}}{i\mathbf{k}\mathbf{r}} \\ &= \frac{1}{4\pi^2 i r} \int_{-\infty}^\infty dk \frac{ke^{i\mathbf{k}\mathbf{r}}}{z - k^2} \end{aligned}$$

Durch Kontourintegration in der komplexen Ebene findet man dafür (außer wenn z reell und $z > 0$)

$$G(\vec{x}, \vec{x}'; z) = -\frac{e^{i\sqrt{z}|\vec{x}-\vec{x}'|}}{4\pi|\vec{x}-\vec{x}'|} \quad \text{für } \operatorname{Im}\sqrt{z} > 0 \quad (3.29)$$

Falls $z = \lambda$ mit $\lambda \geq 0$, d.h. wenn z mit den Eigenwerten von $\hat{H} = -\nabla_{\vec{x}}^2$ übereinstimmt, dann sind nur die Grenzwerte

$$G^{\pm}(\vec{x}, \vec{x}'; \lambda) = \lim_{\eta \rightarrow 0^+} G(\vec{x}, \vec{x}'; \lambda \pm i\eta) = -\frac{e^{\pm i\sqrt{\lambda}|\vec{x}-\vec{x}'|}}{4\pi|\vec{x}-\vec{x}'|} \quad \text{für } \sqrt{\lambda}, \lambda \geq 0 \quad (3.30)$$

wohldefiniert. Im speziellen Fall $z = 0$ finden wir

$$G(\vec{x}, \vec{x}'; 0) = -\frac{1}{4\pi|\vec{x}-\vec{x}'|} \quad (3.31)$$

d.h. die Greensche Funktion der Poissongleichung für eine Punktquelle $\nabla_{\vec{x}} G(\vec{x}, \vec{x}'; 0) = \delta(\vec{x} - \vec{x}')$.