III Grundlagen von Operator- & Spektraltheorie

Bereits Funktionenräume und Operatoren
a.f. Funktionen vorgestellt
→ Quantenmechanik (Wellenfunktion, Zeitentwicklung)

III.1 Hermitesche Operatoren

Betrachte VR V über Körper $K = \mathbb{C}$
mit Skalarprodukt $u, v \in V \rightarrow \langle u, v \rangle \in \mathbb{C}$

Betrachte lineare Abbildung $\varphi : u \in V \mapsto \varphi(u) \in V$
d.h. Abbildung des VR auf sich selbst
z.B. Zeitentwicklung eines Quantensystems

Def: $\varphi : V \rightarrow V \quad u \mapsto \varphi(u)$ heißt unitär
wenn gilt $\langle \varphi(u) | \varphi(v) \rangle = \langle u, v \rangle \quad \forall u, v \in V$

Da φ linear können wir die Abbildung im endlich dimensionalen VR
als Matrix darstellen

Sei $\{e_i\}$ eine ONB von V, d.h. $u, v \in V$

$$|v\rangle = v_i |e_i\rangle \qquad \text{mit} \quad v_i = \langle e_i | v \rangle$$
$$|u\rangle = u_j |e_j\rangle \qquad u_j = \langle e_j | u \rangle$$

$$\langle \varphi(u) | \varphi(v) \rangle = u_j^* v_i \langle \varphi(e_j) | \varphi(e_i) \rangle$$

dann gilt für φ unitär

$$\langle \varphi(e_j) | \varphi(e_i) \rangle = \langle e_j | e_i \rangle = \delta_{ij}$$

Betrachten wir nun die Matrixdarstellung

$$\langle e_i | \varphi(e_j)\rangle = \varphi_{ij}$$

Entwicklung in ONB — Abbildung des j-ten Basisvektors

So dass $|v\rangle = v_j |e_j\rangle$

$$|\varphi(v)\rangle = \varphi_{ij} \, v_j \, |e_i\rangle$$

dann ist

$$S_{ij} = \langle \varphi(e_i)|\varphi(e_j)\rangle = \langle \varphi(e_i)|\underbrace{e_k\rangle\langle e_k}_{\substack{\text{Vollständigkeitsrelation}\\ =\mathbb{1}}}|\varphi(e_j)\rangle$$

$$= (\varphi_{ki})^* \; \varphi_{kj}$$

$$= \varphi^\dagger_{ik} \; \varphi_{kj}$$

$\Rightarrow \quad \varphi^\dagger \varphi = \mathbb{1}$ Matrixschreibweise

D.h. <u>unitäre Abbildungen</u> φ werden in ONB durch <u>unitäre Matrizen</u> φ_{ik} dargestellt

Entsprechend für reelle VR entfällt die komplexe Konjugation, d.h.

$$\varphi^T \varphi = \mathbb{1}$$

D.h. <u>orthogonale Abbildungen</u> φ werden in ONB durch orthogonale Matrizen dargestellt

Die jeweiligen Matrizen bilden für $\dim(V)=n$ eine Gruppe

<u>orthogonale</u>: $O(n)$ $\qquad SO(n)$ falls $\det(\varphi)=1$

<u>unitäre</u>: $U(n)$ $\qquad SU(n)$ falls $\det(\varphi)=1$

Symmetriegruppen $SU(3)$ $Q(1)$, $SU(2)\times U(1)$ Elektroschwache WW
verwendet um Ladungserhaltung in theoretischen Beschreibung zu Gewährleisten

Def: Eine lineare Abbildung φ heißt hermitesch bzw. selbstadjungiert wenn gilt

$$\langle \varphi(u)|v\rangle = \langle u|\varphi(v)\rangle$$

Generell ist das nicht der Fall, sondern nur [illegible] es gilt

$$\langle \varphi^{\dagger}(u)|v\rangle = \langle u|\varphi(v)\rangle$$

Durch Matrixdarstellung ergibt sich

$$\langle \varphi(u)|v\rangle = u_i^* v_j \varphi_{ji}^*$$

$$\langle u|\varphi(v)\rangle = u_i^* v_j \varphi_{ij}$$

d.h. $\varphi_{ji}^* = \varphi_{ij}$ bzw. in Matrixschreibweise

$$\varphi^{\dagger} = \varphi$$

Daher für selbstadjungierte/hermitesche Abbildungen können wir in Dirac Notation schreiben

$$(\langle u|\hat{\varphi})|v\rangle = \langle u|\hat{\varphi}|v\rangle = \langle u|(\hat{\varphi}|v\rangle)$$

hermitescher Operator

d.h. es ist egal ob wir nach rechts oder nach links wirken

Eigenschaften hermitescher Operatoren

Eigenwerte & Eigenvektoren

$|v\rangle \neq 0$ ist Eigenvektor von φ mit Eigenwert λ genau dann wenn

$$\varphi(|v\rangle) = \lambda|v\rangle$$

Dann gilt für hermitesche Operatoren

$$\langle v|\hat{\varphi}|v\rangle = \langle v|\varphi(v)\rangle = \lambda\langle v|v\rangle$$

$$= \langle \varphi(v)|v\rangle = \lambda^*\langle v|v\rangle$$

$\Rightarrow$ $\lambda = \lambda^*$ d.h. Eigenwerte sind reell

Sei $|u\rangle, |v\rangle$ EVectoren mit $\lambda_u \neq \lambda_v$

$$\langle u|\hat{\varphi}|v\rangle = \lambda_v\langle u|v\rangle$$

$$= \lambda_u\langle u|v\rangle$$

$$\Rightarrow \underbrace{(\lambda_u - \lambda_v)}_{\neq 0}\langle u|v\rangle = 0 \Rightarrow \langle u|v\rangle = 0$$

D.h. Eigenvektoren mit unterschiedlichen Eigenwerten sind orthogonal (bei gleichen Eigenwerten Orthogonalisierung möglich mittels Gram-Schmidt)

Die Diagonalisierung von φ lässt sich mit einer unitären Transformation darstellen d.h. in Matrixdarstellung gilt

$$U^{+} \varphi U = \mathrm{Diag}(\lambda_1, \ldots, \lambda_n)$$

das heißt $U|e_i\rangle = |v_i\rangle$ also i-ter Eigenvektor von φ (mit Einheitsnormierung)

Dementsprechend gilt folgende Spektraldarstellung von hermiteschen Operatoren

$$\hat{\varphi} = \sum_i \lambda_i |v_i\rangle\langle v_i|$$

da wir einen beliebigen Vektor $|x\rangle$ zunächst in ONB der Eigenvektoren zerlegen können und anschließend die Wirkung des linearen Operators in der Eigenbasis durch die Multiplikation mit dem Eigenwert liefert

Ein wichtiges Beispiel sind Differentialoperatoren

$$\varphi = p(x)\frac{d}{dx} + q(x)$$

auf Funktionenräumen über $\mathbb{C}$ mit Skalarprodukt

$$\langle g|h\rangle = \int_a^b dx\, g^*(x)\, h(x)$$

Betrachten wir nun

$$\langle g|\varphi(h)\rangle = \int_a^b dx\, g^*(x)\left[p(x)\, h'(x) + q(x)\, h(x)\right]$$

$$\langle \varphi(g)|h\rangle = \int_a^b dx\, \left[p^*(x)\, g^{*\prime}(x) + q^*(x)\, g^*(x)\right] h(x)$$

Dann ist die Differenz

$$\langle g|\varphi(h)\rangle - \langle \varphi(g)|h\rangle = \int_a^b dx\, g^*(x)\, p(x)\, h'(x) - p^*(x)\, g^{*\prime}(x)\, h(x) + g^*(x)\left(q(x) - q^*(x)\right) h(x)$$

partielle Integration

$$= \int_a^b g^*(x)\left[\left(p(x) + p^*(x)\right)\frac{d}{dx} + p^{*\prime}(x) + q(x) - q^*(x)\right] h(x) + g^*(x)\, p^*(x)\, h(x)\Big|_a^b$$

D.h. der Operator ist hermitesch wenn die Funktionen des VR die Randbedingungen (Dirichlet) $h(a)=h(b)=0$ erfüllen

und $p(x) = -p^*(x) \Rightarrow p(x)$ ist rein komplex $\in i\mathbb{R}$

und $(p^{*\prime}(x))^* = q^*(x) - q(x)$ ...

für die Polynome gilt

Wichtige Beispiele aus QM

$L_1 = i\hbar \frac{d}{dt}$ Differentialoperator 1ster Ordnung

$i\hbar \frac{d}{dt} |\psi\rangle = \hat{H} |\psi\rangle$ Schrödinger Gleichung

---

$L_2 = \frac{-\hbar^2}{2m} \frac{\partial}{\partial x^2}$ Differentialoperator 2ter Ordnung

kinetische Energie eines nichtrelativistischen Punktteilchens

Die Spektraleigenschaften hängen vom zulässigen Funktionenraum ab, z.B. Punktteilchen in Box hat unterschiedliche Eigenwerte als freies Punktteilchen