Hilbertraum und lineare Operatoren im Hilbertraum

Michael Zirpel (mzirpel@qlwi.de)

Im Folgenden ist mit dem Körper $(\mathbb{K},+,0,\cdot,1)$ stets entweder $\mathbb{K}=\mathbb{C}$, der *Körper der komplexen Zahlen*, oder $\mathbb{K}=\mathbb{R}$, der *Körper der reellen Zahlen* gemeint. Für komplexe Zahlen $z=x+iy\in\mathbb{C}$ mit $x,y\in\mathbb{R}$ bezeichnet $i=\sqrt{-1}$ die *imaginäre Einheit* und $z^*=x-iy$ die *konjugiert komplexe* Zahl.

1 Hilbertraum

1.1 Vektorraum

$(V,\oplus,\underline{0},\odot,\mathbb{K})$ ist ein *Vektorraum* über dem Körper $(\mathbb{K},+,0,\cdot,1)$ genau dann, wenn folgende Forderungen erfüllt sind:

1. Zwischen den Elementen von V, den *Vektoren,* ist eine Addition $\oplus: V\times V\to V$ definiert, sodass $(V,\oplus,\underline{0})$ eine *kommutative Gruppe* ist, d.h. für alle $\varphi,\chi,\psi\in V$ gilt

$$(\varphi\oplus\chi)\oplus\psi=\varphi\oplus(\chi\oplus\psi)$$
$$\varphi\oplus\chi=\chi\oplus\varphi$$
$$\varphi\oplus\underline{0}=\underline{0}\oplus\varphi=\varphi$$
$$\exists(-\varphi)\in V:\ (-\varphi)\oplus\varphi=\underline{0}$$

2. Zwischen den Vektoren und den Elementen von K, den *Skalaren,* ist eine Multiplikation $\odot: \mathbb{K}\times V\to V$ definiert, die für alle $\varphi,\psi\in V$ und alle $a,b\in\mathbb{K}$ folgende Bedingungen erfüllt

$$(a\cdot b)\odot\psi=a\cdot(b\odot\psi)$$
$$(a+b)\odot\psi=(a\odot\psi)\oplus(b\odot\psi)$$
$$a\odot(\psi\oplus\varphi)=(a\odot\psi)\oplus(a\odot\varphi)$$
$$1\odot\psi=\psi$$

In einem Vektorraum $(V,\oplus,\underline{0},\odot,\mathbb{K})$ gilt für alle $\varphi,\psi\in V$ und alle $a,b\in\mathbb{K}$ mit $b\neq 0$

$$0\odot\varphi=\underline{0}$$
$$(-1)\odot\varphi=(-\varphi)$$
$$a\odot\varphi+b\odot\psi=\underline{0}\Leftrightarrow\psi=-\frac{a}{b}\odot\varphi$$

Wir werden im Folgenden die Sonderzeichen $\oplus$, $\odot$, $\underline{0}$ weglassen und wie allgemein üblich einfach $+,\cdot$, 0 schreiben, also Vektorraum $(V,+,0,\cdot,\mathbb{K})$ und dabei in Kauf nehmen, dass der Unterschied zwischen Körperaddition und Vektoraddition typografisch nicht dargestellt wird.

Eine Teilmenge $T\subseteq V$ bezeichnet man als *Teilvektorraum* oder kürzer als *Teilraum* vom Vektorraum $(V,+,0,\cdot,\mathbb{K})$, wenn $(T,+,0,\cdot,\mathbb{K})$ selbst ein Vektorraum ist, wobei $+$ und $\cdot$ die entsprechenden Einschränkungen der Verknüpfungen von V auf T darstellen.

1.2 Skalarprodukt, Orthogonalität

Ein *Skalarprodukt* auf einem *komplexen* Vektorraum $(V,+,0,\cdot,\mathbb{C})$ ist eine Abbildung $\langle\,,\,\rangle : V\times V \to \mathbb{C}, (\varphi,\chi) \mapsto \langle\varphi,\chi\rangle$, die für alle $\varphi,\chi,\psi \in V$ und $a,b \in \mathbb{C}$ folgende Bedingungen erfüllt:

$$\langle\varphi, a\cdot\chi + b\cdot\psi\rangle = a\cdot\langle\varphi,\chi\rangle + b\cdot\langle\varphi,\psi\rangle \tag{1}$$

$$\langle\varphi,\psi\rangle = \langle\psi,\varphi\rangle^* \tag{2}$$

$$\langle\psi,\psi\rangle \geq 0 \tag{3}$$

$$\langle\psi,\psi\rangle = 0 \Rightarrow \psi = 0 \tag{4}$$

Auf einem *reellen* Vektorraum $(V,+,0,\cdot,\mathbb{R})$ wird (2) durch die Forderung der Kommutativität $\langle\varphi,\psi\rangle = \langle\psi,\varphi\rangle$ ersetzt.

Ein Vektorraum mit Skalarprodukt $(V,+,0,\cdot,\mathbb{K},\langle,\rangle)$ wird auch als *Prähilbertraum* bezeichnet bzw. im komplexen Fall als *unitärer Vektorraum*, im reellen Fall als *euklidischer* Vektorraum.

Mit Hilfe des Skalarprodukts kann man einerseits die *Orthogonalität* von Vektoren $\psi,\varphi \in V$ definieren durch

$$\psi \perp \varphi :\Leftrightarrow \langle\psi,\varphi\rangle = 0 \tag{5}$$

andererseits die *Länge* bzw. *Norm eines Vektors* $\psi \in V$ durch

$$\|\psi\| := \sqrt{\langle\psi,\psi\rangle} \tag{6}$$

1.3 Norm

Ist $(V,+,0,\cdot,\mathbb{K})$ ein Vektorraum über dem Körper $\mathbb{K}$. Dann heißt eine Funktion

$$\|\;\| : V \to \mathbb{R}, \varphi \mapsto \|\varphi\|$$

Norm und $(V,+,0,\cdot,\mathbb{K},\|\;\|)$ *normierter* Vektorraum gdw. für alle $\varphi,\psi \in V$, $c \in \mathbb{K}$ gilt

$$\|\varphi\| \geq 0 \tag{7}$$

$$\|\varphi\| = 0 \Leftrightarrow \varphi = 0 \tag{8}$$

$$\|c\varphi\| = |c|\,\|\varphi\| \tag{9}$$

$$\|\varphi+\psi\| \leq \|\varphi\| + \|\psi\| \tag{10}$$

Einen Vektor $\psi \in V$ mit $\|\psi\| = 1$ bezeichnet man als *normiert* bzw. als *Einheitsvektor*.

Jeder Vektorraum mit Skalarprodukt $(V,+,0,\cdot,\mathbb{K},\langle,\rangle)$ ist normiert mit der Norm $\|\psi\| = \sqrt{\langle\psi,\psi\rangle}$; es gilt dabei die *Cauchy-Schwarzsche Ungleichung* für alle $\varphi,\psi \in V$

$$|\langle\varphi,\psi\rangle| \leq \|\varphi\|\,\|\psi\| \tag{11}$$

Eine Norm $\|\;\| : V \to \mathbb{R}$ auf einem komplexen Vektorraum $(V,+,0,\cdot,\mathbb{C})$ ist genau dann durch ein Skalarprodukt gegeben, wenn für alle $\psi,\varphi \in V$ die *Parallelogrammidentität* gilt

$$\|\psi+\varphi\|^2 + \|\psi-\varphi\|^2 = 2\,\|\psi\|^2 + 2\,\|\varphi\|^2 \tag{12}$$

Für das zugehörige Skalarprodukt $\langle\,,\,\rangle : V\times V \to \mathbb{C}$ gilt dann die *Polarisationsidentität*

$$\langle\psi,\varphi\rangle = \frac{1}{4}(\|\psi+\varphi\|^2 - \|\psi-\varphi\|^2 + i\,\|\psi-i\varphi\|^2 - i\,\|\psi+i\varphi\|^2 \tag{13}$$

1.4 Vollständigkeit, Banachraum, Hilbertraum

Ist $\left(V,+,0,\cdot,\mathbb{K},\|\ \|\right)$ ein normierter Vektorraum, so wird durch $\|\varphi-\chi\|$ ein *Abstand* zwischen Vektoren (eine *Metrik*) definiert. Mit Hilfe des Abstands kann wiederum die *Konvergenz* von Vektorfolgen definiert werden: Ein Folge von Vektoren $(\varphi_k\in V)_{k\in\mathbb{N}}$ *konvergiert* (*in der Norm*) gegen den Vektor $\varphi\in V$ genau dann, wenn

$$\lim_{k\to\infty}\|\varphi_k-\varphi\|=0 \tag{14}$$

d.h. wenn die Folge der Abstände zu φ in den reellen Zahlen gegen 0 konvergiert. Man schreibt dann auch $\lim\limits_{k\to\infty}\varphi_k=\varphi$.

Ein normierter Vektorraum V ist *vollständig* (man sagt dann auch *normvollständig*) wenn jede *Cauchy-Folge* von Vektoren aus V gegen einen *Grenzwert* in V konvergiert, d.h. wenn für jede Folge $(\varphi_k\in V)_{k\in\mathbb{N}}$ gilt

$$\lim_{j,k\to\infty}\left\|\varphi_k-\varphi_j\right\|=0\Rightarrow\exists\varphi\in V:\lim_{k\to\infty}\varphi_k=\varphi \tag{15}$$

Einen vollständigen, normierten Vektorraum bezeichnet man auch als *Banachraum.* Ist ein reeller bzw. komplexer Vektorraum mit Skalarprodukt bzgl. der durch das Skalarprodukt definierten Norm vollständig, also ein Banachraum, so bezeichnet man ihn als *reellen* bzw. *komplexen Hilbertraum* $(\mathscr{H},+,0,\cdot,\mathbb{R},\langle\ ,\ \rangle)$ bzw.$(\mathscr{H},+,0,\cdot,\mathbb{C},\langle\ ,\ \rangle)$.

1.5 Beispiele für Hilberträume

1.5.1 Unitärer Vektorraum $\mathbb{C}^n$

Der endlich-dimensionale Vektorraum $\mathbb{C}^n$ ist ein Hilbertraum. Er besteht aus n-Tupeln von komplexen Zahlen $(c_1,...,c_n)$, $c_1,...,c_n\in\mathbb{C}$, für die komponentenweise eine Addition und eine Multiplikation mit Skalaren definiert ist

$$(c_1,...,c_n)+(d_1,...,d_n):=(c_1+d_1,...,c_n+d_n) \tag{16}$$

$$a(c_1,...,c_n):=(ac_1,...,ac_n) \tag{17}$$

$$0:=(0,...,0) \tag{18}$$

Ein Skalarprodukt ist gegeben durch

$$\big\langle(c_1,...,c_n),(d_1,...,d_n)\big\rangle=\sum_{k=1}^{n}c_k^*d_k \tag{19}$$

1.5.2 Hilbertscher Folgenraum l^2

Den Vektorraum der komplexwertigen Zahlenfolgen $(c_k\in\mathbb{C})_{k\in\mathbb{N}}$ kann man als Fortsetzung $\mathbb{C}^\infty$ von $\mathbb{C}^n$ begreifen; die Addition, die Multiplikation mit Skalaren und der Nullvektor werden ebenso gliedweise definiert

$$(c_k)_{k\in\mathbb{N}}+(d_k)_{k\in\mathbb{N}}:=(c_k+d_k)_{k\in\mathbb{N}} \tag{20}$$

$$a(c_k)_{k\in\mathbb{N}}:=(ac_k)_{k\in\mathbb{N}} \tag{21}$$

$$0:=(0,0,...) \tag{22}$$

Mit dem "Skalarprodukt"

$$\big\langle(c_k)_{k\in\mathbb{N}},(d_k)_{k\in\mathbb{N}}\big\rangle=\sum_{k=1}^{\infty}c_k^*d_k:=\lim_{n\to\infty}\sum_{k=1}^{n}c_k^*d_k \tag{23}$$

gibt es allerdings das Problem, dass die unendliche Summe nicht immer konvergiert. Beschränkt man sich aber auf Folgen, bei denen die Summe der Betragsquadrate konvergiert d.h.

$$\sum_{k=1}^{\infty} |c_k|^2 < \infty \tag{24}$$

so ist auch das Skalarprodukt wohldefiniert und man erhält den *Hilbertschen Folgenraum* l^2, einen komplexen Hilbertraum. Dieser Raum lag implizit der Matrizenmechanik von Heisenberg, Born und Jordan zugrunde.

1.5.3 Hilbertraum der quadratintegrablen Funktionen $\mathscr{L}^2(\mathbb{R}^n)$

Die Funktionen der Form

$$\psi : \mathbb{R}^n \to \mathbb{C}, (x_1,...,x_n) \mapsto \psi(x_1,...,x_n) \tag{25}$$

deren Betragsquadrat integrierbar ist, d.h.

$$\int_{\mathbb{R}^n} |\psi(x_1,...,x_n)|^2 \mathrm{dx}^n < \infty \tag{26}$$

bilden einen Vektorraum über den komplexen Zahlen $\mathbb{C}$, wenn man definiert

$$(\psi_1 + \psi_2)(x_1,...,x_n) := \psi_1(x_1,...,x_n) + \psi_2(x_1,...,x_n) \tag{27}$$

$$(c\ \psi)(x_1,...,x_n) := c\psi(x_1,...,x_n) \tag{28}$$

$$0 := 0(x_1,...,x_n) \tag{29}$$

Ein (Pseudo-)Skalarprodukt wird definiert durch

$$\langle \psi_1, \psi_2 \rangle := \int_{\mathbb{R}^n} \psi_1^*(x_1,...,x_n)\psi_2(x_1,...,x_n)\mathrm{dx}^n \tag{30}$$

Dabei tritt das Problem auf, dass es von 0 verschiedene Funktionen gibt, deren Betragsquadrat 0 ergibt. Erst eine Äquivalenzklassenbildung ergibt ein echtes Skalarprodukt und führt zum Hilbertraum $\mathscr{L}^2(\mathbb{R}^n)$:

$$\psi_1 \sim \psi_2 :\Longleftrightarrow \int_{\mathbb{R}^n} |\psi_1(x_1,...,x_n) - \psi_2(x_1,...,x_n)|^2 \mathrm{dx}^n = 0 \tag{31}$$

Der Raum $\mathscr{L}^2(\mathbb{R}^n)$ lag implizit der Schrödingerschen Wellenmechanik zugrunde.

1.6 Abgeschlossener Teilraum, Orthonormalbasis, Dimension

Einen Teilraum $T \subseteq V$ eines vollständigen, normierten Vektorraums $\big(V,+,0,\cdot,\mathbb{K},\|\ \|\big)$ bezeichnet man als *abgeschlossen*, wenn für jede konvergente Folge von Vektoren $(\varphi_k \in T)_{k\in\mathbb{N}}$ mit $\lim\limits_{k\to\infty} \varphi_k = \varphi \in \mathscr{H}$ der Grenzwert ebenfalls in T liegt: $\varphi \in T$. Dies ist gleichbedeutend damit, dass auch $\big(T,+,0,\cdot,\mathbb{K},\|\ \|\big)$ ein vollständiger, normierter Vektorraum ist.

Die Schnittmenge einer Menge abgeschlossener Teilräume ist selbst wieder ein abgeschlossener Teilraum. Zur jeder Teilmenge $M \subseteq V$ bezeichnen wir die Schnittmenge aller abgeschlossenen Teilräume, die M enthalten, mit $[M]$. Statt $[\{\varphi,\chi,...\}]$ schreiben wir kürzer $[\varphi,\chi,...]$. $[M]$ enthält neben allen

Linearkombinationen von Vektoren aus M auch die Grenzwerte von konvergenten Folgen dieser Linearkombinationen.

In einem Hilbertraums $\mathscr{H}$ bezeichnet man eine Menge $O \subset \mathscr{H}$ als *Orthonormalbasis* von $\mathscr{H}$ gdw. sie aus paarweise orthogonalen Einheitsvektoren besteht d.h.

$$\varphi \in O \Rightarrow \left\|\varphi\right\| = \sqrt{\left\langle \varphi, \varphi \right\rangle} = 1 \tag{32}$$

$$\varphi, \psi \in O, \varphi \neq \psi \Rightarrow \left\langle \varphi, \psi \right\rangle = 0 \tag{33}$$

und $[O] = \mathscr{H}$.

Jeder Hilbertraum hat eine Orthonormalbasis. Alle Orthonormalbasen eines Hilbertraums haben die gleiche Kardinalität, man bezeichnet diese als *Dimension* des Hilbertraums $\dim \mathscr{H} = \left|O\right|$.

1.7 Separabilität, abzählbare Orthonormalbasis

Ein Banachraum $\left(V, +, 0, \cdot, \mathbb{K}, \left\|.\right\|\right)$ ist *separabel* genau dann, wenn es eine abzählbar-unendliche Menge $M \subseteq V$ gibt, die *dicht in V liegt,* d.h. für jedes Element $\varphi \in V$ und jede reelle Zahl $\varepsilon > 0$ gibt es ein Element $\chi \in M$, sodass $\|\varphi - \chi\| < \varepsilon$.

Ein Hilbertraum $(\mathscr{H}, +, 0, \cdot, \mathbb{K}, \langle\ ,\ \rangle)$ ist genau dann separabel, wenn es eine abzählbare (d.h. endliche oder abzählbar-unendliche) Orthonormalbasis gibt. Die Hilberträume l^2 und $\mathscr{L}^2(\mathbb{R}^n)$ sind separabel.

In einem separablen Hilbertraum gibt es also eine Menge von Vektoren $O = \{\beta_j \in \mathscr{H}\}_{j \in I_d}$ mit einer Indexmenge $I_d = \{1, ..., \dim\mathscr{H}\}$ oder $I_d = \mathbb{N}$, sodass einerseits $[O] = \mathscr{H}$ und andererseits für alle $j, k \in I_d$ gilt

$$\left\langle \beta_j, \beta_k \right\rangle = \delta_{j,k} \tag{34}$$

wobei das *Kroneckersymbol* $\delta_{j,k}$ genau dann den Wert 1 hat, wenn $j = k$ ist, und sonst den Wert 0. Dabei gilt $\left|I_d\right| = \dim\mathscr{H}$.

Dies bedeutet, jeder Vektor $\psi \in \mathscr{H}$ kann entweder als Linearkombination

$$\psi = \sum_{j=1}^{n} c_j \beta_j$$

oder als Grenzwert einer Folge von Linearkombinationen der Vektoren aus O dargestellt werden

$$\psi = \lim_{n \to \infty} \sum_{j=1}^{n} c_j \beta_j = \sum_{j=1}^{\infty} c_j \beta_j$$

mit $\beta_j \in O, c_j \in \mathbb{K}$ für alle $j \in \mathbb{N}$. Um sowohl die endlich-dimensionalen als auch unendlich-dimensionalen Hilberträume zu umfassen, schreiben wir im Folgenden einfach $\sum_j$ und meinen damit entweder $\sum_{j=1}^{\dim\mathscr{H}}$ oder $\sum_{j=1}^{\infty}$.

Die Koeffizienten c_j ergeben sich durch das Skalarprodukt mit den Basisvektoren, es gilt für alle $j \in I_d$

$$\left\langle \beta_j, \psi \right\rangle = \left\langle \beta_j, \sum_k c_k \beta_k \right\rangle = \sum_k c_k \left\langle \beta_j, \beta_k \right\rangle = \sum_k c_k \delta_{j,k} = c_j \tag{35}$$

Daher kann man auch schreiben

$$\psi = \sum_j \left\langle \beta_j, \psi \right\rangle \beta_j$$

Dabei gilt

$$\left\|\psi\right\|^2 = \sum_j \left\|\left\langle \beta_j, \psi \right\rangle\right\|^2$$

1.8 Tensorprodukt

Das *Tensorprodukt* $\mathscr{H} = \mathscr{H}_1 \otimes \mathscr{H}_2$ zweier Hilberträume $\mathscr{H}_1, \mathscr{H}_2$ ist ein Hilbertraum, der folgende Bedingungen erfüllt:

1. Es gibt eine Abbildung (das *Tensorprodukt von Vektoren*)

$$\otimes : \mathscr{H}_1 \times \mathscr{H}_2 \to \mathscr{H}, (\varphi, \chi) \mapsto \varphi \otimes \chi \tag{36}$$

bei der für alle $\varphi, \varphi_1, \varphi_2 \in \mathscr{H}_1$, $\chi, \chi_1, \chi_2 \in \mathscr{H}_2, c \in \mathbb{K}$ gilt

$$(c \cdot \varphi) \otimes \chi = \varphi \otimes (c \cdot \chi) = c \cdot (\varphi \otimes \chi) \tag{37}$$

$$(\varphi_1 + \varphi_2) \otimes \chi = (\varphi_1 \otimes \chi) + (\varphi_2 \otimes \chi) \tag{38}$$

$$\varphi \otimes (\chi_1 + \chi_2) = (\varphi \otimes \chi_1) + (\varphi \otimes \chi_2) \tag{39}$$

$$\langle \varphi_1 \otimes \chi_1, \varphi_2 \otimes \chi_2 \rangle = \langle \varphi_1, \varphi_2 \rangle \cdot \langle \chi_1, \chi_2 \rangle \tag{40}$$

2. Sind $O_1 \subset \mathscr{H}_1$, $O_2 \subset \mathscr{H}_2$ Orthonormalbasen der Hilberträume $\mathscr{H}_1, \mathscr{H}_2$, so ist $\{\alpha \otimes \beta | \alpha \in O_1, \beta \in O_2\}$ eine Orthonormalbasis von $\mathscr{H}$.

Wegen (40) sind die Tensorprodukte der Vektoren der Orthonormalbasen von $\mathscr{H}_1, \mathscr{H}_2$ ebenfalls orthogonal und normiert. Die 2. Bedingung gewährleistet, dass sie den ganzen Raum $\mathscr{H}$ aufspannen.

Mit Hilfe der Produkte der Vektoren der Orthonormalbasis kann man den Produktraum konstruieren, indem man alle Linearkombinationen und Cauchy-konvergenten Folgen derselben betrachtet.

Für endlich-dimensionale Hilberträume $\mathscr{H}_1, \mathscr{H}_2$ gilt

$$\dim \mathscr{H}_1 \otimes \mathscr{H}_2 = \dim \mathscr{H}_1 \cdot \dim \mathscr{H}_2$$

Das Tensorprodukt separabler Hilberträume ist separabel.

Nicht jeder Vektor $\psi \in \mathscr{H} = \mathscr{H}_1 \otimes \mathscr{H}_2$ ist ein Produktvektor, z.B. lässt sich eine Linearkombinationen aus Produkten wie $\psi = c_1 \varphi_1 \otimes \chi_1 + c_2 \varphi_2 \otimes \chi_2$ im Allgemeinen nicht in Faktoren zerlegen.

Den Hilbertraum $\mathscr{L}^2(\mathbb{R}^n)$ kann man als Tensorprodukt auffassen: Für alle $n, m \in \mathbb{N}$ gilt $\mathscr{L}^2(\mathbb{R}^{n+m}) = \mathscr{L}^2(\mathbb{R}^n) \otimes \mathscr{L}^2(\mathbb{R}^m)$.

2 Lineare Operatoren im Hilbertraum

Im Folgenden ist $(\mathscr{H}, +, 0, \cdot, \mathbb{C}, \langle \, , \, \rangle)$ ein komplexer, separabler Hilbertraum, $\|\varphi\| = \sqrt{\langle \varphi, \varphi \rangle}$ für $\varphi \in \mathscr{H}$ die vom Skalarprodukt induzierte Norm.

2.1 Linearer Operator

Ein *linearer Operator A in* $\mathscr{H}$ ist eine Abbildung, die auf einer Teilmenge $\mathscr{D}(A) \subseteq \mathscr{H}$, dem *Definitionsbereich* bzw. der *Domäne* von A, definiert ist

$$A : \mathscr{D}(A) \to \mathscr{H}, \varphi \mapsto A\varphi \tag{41}$$

und *linear* ist, d.h. für alle $\varphi, \psi \in \mathscr{D}(A)$ und alle $a, b \in \mathbb{C}$ gilt

$$A(a\varphi + b\psi) = aA\varphi + bA\psi \tag{42}$$

Es ist zu beachten, dass zwei lineare Operatoren A, B in $\mathscr{H}$ nur dann gleich sind, wenn sie den gleichen Definitionsbereich und für alle $\varphi \in \mathscr{D}(A) = \mathscr{D}(B)$ gilt, dass $A\varphi = B\varphi$. Gilt $\mathscr{D}(A) \subseteq \mathscr{D}(B)$ und für alle $\varphi \in \mathscr{D}(A)$ $A\varphi = B\varphi$, so bezeichnet B als *Fortsetzung* von A in $\mathscr{D}(B)$.

Ein linearer Operator in $\mathscr{H}$ ist *dicht definiert* gdw. $\mathscr{D}(A)$ in $\mathscr{H}$ dicht liegt, d.h.

$$\forall \varphi \in \mathscr{H} \forall \varepsilon \in \mathbb{R}, \varepsilon > 0 \; \exists \psi \in \mathscr{D}(A) : \|\varphi - \psi\| < \varepsilon \tag{43}$$

Die Menge der dicht definierten linearen Operatoren in $\mathscr{H}$ bezeichnen wir mit $\mathscr{D}(\mathscr{H})$.

2.2 Überall definierte lineare Operatoren

Mit $\mathscr{L}(\mathscr{H}) \subseteq \mathscr{D}(\mathscr{H})$ bezeichnen wir die Menge der überall auf $\mathscr{H}$ definierten linearen Operatoren, d.h. $A \in \mathscr{L}(\mathscr{H}) \Leftrightarrow \mathscr{D}(A) = \mathscr{H}$. (Es handelt sich dabei gerade um die *beschränkten* Operatoren *auf* $\mathscr{H}$, s.u.).

Diese Operatoren bilden selbst wieder einen *Vektorraum*, wenn man Addition und Multiplikation mit Skalaren folgendermaßen definiert: Für alle $c \in \mathbb{C}, A, B \in \mathscr{L}(\mathscr{H})$

$$(A+B) : \mathscr{H} \to \mathscr{H}, \varphi \mapsto (A+B)\varphi = A\varphi + B\varphi \tag{44}$$

$$(cA) : \mathscr{H} \to \mathscr{H}, \varphi \mapsto (cA)\varphi = cA\varphi \tag{45}$$

Zwischen linearen Operatoren $A, B \in \mathscr{L}(\mathscr{H})$ kann man außerdem eine Multiplikation definieren durch

$$(AB) : \mathscr{H} \to \mathscr{H}, \varphi \mapsto A(B\varphi) \tag{46}$$

und erhält eine *Algebra*.

Eine *Algebra* $(\mathscr{A}, +, 0, \cdot, \mathbb{K}, \circ)$ über dem Körper $\mathbb{K}$ ist ein Vektorraum $(\mathscr{A}, +, 0, \cdot, \mathbb{K})$ über dem Körper $\mathbb{K}$, in dem zusätzlich eine Multiplikation $\circ$ definiert ist, sodass für alle $X, Y, Z \in \mathscr{A}$ und $c \in \mathbb{K}$ gilt

$$(X \circ Y) \circ Z = X \circ (Y \circ Z) \tag{47}$$

$$X \circ (Y + Z) = X \circ Y + X \circ Z \tag{48}$$

$$(X + Y) \circ Z = X \circ Z + Y \circ Z \tag{49}$$

$$X \circ (c\,Y) = c\,(X \circ Y) \tag{50}$$

Gilt für alle $X, Y \in \mathscr{A}$ das Kommutativgesetz

$$X \circ Y = Y \circ X \tag{51}$$

so bezeichnet man die Algebra als *kommutativ*. Ein Element $E \in \mathscr{A}$ bezeichnet man als *Einselement*, wenn für alle $X \in \mathscr{A}$ gilt

$$E \circ X = X \circ E = X \tag{52}$$

Man schreibt dann auch einfach 1. Existiert ein Einselement $1 \in \mathscr{A}$, spricht man von einer *Algebra mit Einselement* (“unital algebra”)$(\mathscr{A}, +, 0, \cdot, \mathbb{K}, \circ, 1)$.

In $\mathscr{L}(\mathscr{H})$ definiert die identische Abbildung

$$1 : \mathscr{H} \to \mathscr{H}, \varphi \mapsto 1(\varphi) = \varphi \tag{53}$$

ein Einselement und$(\mathscr{L}(\mathscr{H}),+,0,\cdot,\mathbb{C},\circ,1)$ ist eine *Algebra mit Einselement über den komplexen Zahlen*. Die Multiplikation ist i.A. nicht kommutativ. Zwei Operatoren $A,B \in \mathscr{L}(\mathscr{H})$ *kommutieren* gdw. $AB = BA$, man bezeichnet

$$[A,B] := AB - BA$$

als den Kommutator von A und B.

Für Operatoren $A,B \in \mathscr{D}(\mathscr{H})$, die nicht überall definiert ist, kann man i.A. keine Addition oder Multiplikation definieren. Haben sie den gleichen Definitionsbereich, ist immerhin die Addition definiert, sodass man einen einen Vektorraum erhält: Man schreibt dann auch $C = aA + bB$ mit $\mathscr{D}(C) = \mathscr{D}(A) = \mathscr{D}(B)$ für beliebige $a,b \in \mathbb{C}$. Eine Multiplikation zwischen den Operatoren ist aber auch in diesem Fall meist nicht möglich, da i.A. $B\varphi \notin \mathscr{D}(A)$[1].

2.3 Abgeschlossenheit und Stetigkeit

Ein linearer Operator $A \in \mathscr{D}(\mathscr{H})$ ist *abgeschlossen*, wenn für jede konvergente Folge von Vektoren $(\varphi_k \in \mathscr{D}(A))_{k\in\mathbb{N}}$ mit $\lim\limits_{k\to\infty} \varphi_k = \varphi \in \mathscr{H}$, bei der auch die Bilder konvergieren $\lim\limits_{k\to\infty} A\varphi_k = \psi \in \mathscr{H}$, der Grenzwert φ zum Definitionsbereich gehört $\varphi \in \mathscr{D}(A)$ und $\psi = A\varphi$ gilt.

Jeder Operator $A \in \mathscr{L}(\mathscr{H})$ ist *stetig* (und daher auch abgeschlossen): Konvergiert eine Folge $(\varphi_k \in \mathscr{H})_{k\in\mathbb{N}}$ gegen einen Grenzwert $\lim\limits_{k\to\infty} \varphi_k = \varphi \in \mathscr{H}$, so konvergieren die Bilder gegen das Bild des Grenzwertes $\lim\limits_{k\to\infty} A\varphi_k = A\varphi$.

2.4 Matrixdarstellung eines linearen Operators

Gilt für Operatoren $A,B \in \mathscr{D}(\mathscr{H})$ mit gleichem Definitionsbereich für alle $\varphi, \psi \in \mathscr{D}(A) = \mathscr{D}(B)$

$$\langle \varphi, A\psi \rangle = \langle \varphi, B\psi \rangle \tag{54}$$

so folgt $A = B$. Dies ermöglicht die Definition von linearen Operatoren mit Hilfe der Skalarprodukte.

Mit einer Orthonormalbasis $\{\beta_j \in \mathscr{H}\}_{j\in I_d} \subseteq \mathscr{D}(A)$ im Definitionsbereich des Operators $A \in \mathscr{D}(\mathscr{H})$, kann man dem Operator eine quadratische *Matrix* zuordnen durch

$$(a_{j,k}) = \langle \beta_j, A\beta_k \rangle \tag{55}$$

Die Zuordnung ist injektiv: Gilt für alle $k, j \in I_d$

$$(a_{j,k}) = \langle \beta_j, A\beta_k \rangle = (b_{j,k}) = \langle \beta_j, B\beta_k \rangle \tag{56}$$

so ist $A = B$. Die *Matrixelemente* $a_{j,k}$ hängen allerdings von der gewählten Orthonormalbasis $\{\beta_j \in \mathscr{H}\}_{j\in I_d}$ ab.

Die Anwendung des Operators A auf einen beliebigen Vektor $\varphi \in \mathscr{D}(A)$ in $\psi = A\varphi$ kann mittels der Basisdarstellung

$$\varphi = \sum_k c_k \beta_k, \psi = \sum_k d_j \beta_j$$

durch

$$d_j = \sum_k a_{j,k} c_k \tag{57}$$

beschrieben werden. Für die Multiplikation von Operatoren $A,B \in \mathscr{L}(\mathscr{H})$ in $C = AB$ergibt sich

$$(c_{j,n}) = \sum_k a_{j,k} b_{k,n} \tag{58}$$

Dies sind gerade die üblichen Regeln der Matrixmultiplikation.

[1] Man benötigt daher auch eine andere Definition für das “Kommutieren” zweier Operatoren (s.u.).

2.5 Adjunktion, selbstadjungierte und normale Operatoren

Gilt für die linearen Operatoren A, B in $\mathscr{H}$ für alle $\psi \in \mathscr{D}(A), \varphi \in \mathscr{D}(B)$

$$\langle \varphi, A\psi \rangle = \langle B\varphi, \psi \rangle \tag{59}$$

so bezeichnet man B als *adjungierten* Operator zu A. Ist $A \in \mathscr{D}(\mathscr{H})$, so ist der adjungierte Operator B eindeutig bestimmt und man schreibt $B = A^\dagger$ (bzw. $B = A^*$)

Ein Operator $A \in \mathscr{D}(\mathscr{H})$ ist genau dann abgeschlossen, wenn $A^{\dagger\dagger} = A$ und damit $\mathscr{D}(A) = \mathscr{D}(A^\dagger)$. Gilt bei einem abgeschlossenen Operator $A \in \mathscr{D}(\mathscr{H})$ $A^\dagger A\varphi = AA^\dagger\varphi$ für alle $\varphi \in \mathscr{D}(A)$, so bezeichnet man ihn als *normal*.

Ein Operator linearer Operator in $\mathscr{H}$ ist *selbstadjungiert*, wenn $A \in \mathscr{D}(\mathscr{H})$ und $A = A^\dagger$. Jeder selbstadjungierte Operator ist normal und abgeschlossen. Die Menge der selbstadjungierten Operatoren $\mathscr{O}(\mathscr{H})$ wird in der Quantenmechanik zur Darstellung der Observablen verwendet.

Eine *Involution* in einer Algebra $(\mathscr{A}, +, 0, \cdot, \mathbb{K}, \circ)$ ist eine bijektive Abbildung

$$^* : \mathscr{A} \to \mathscr{A}, X \mapsto X^*$$

bei der für alle $X, Y \in \mathscr{A}$ und $c \in K$ gilt

$$X^{**} = X \tag{60}$$

$$(X+Y)^* = X^* + Y^* \tag{61}$$

$$(X\,Y)^* = Y^* X^* \tag{62}$$

$$(c \cdot X)^* = c^* X^* \tag{63}$$

Dabei bezeichnet c^*die konjugiert komplexe Zahl zu c, bei reellen Zahlen gilt $c^* = c$.
In einer Algebra $(\mathscr{A}, +, 0, \cdot, \mathbb{K}, \circ, 1)$ mit Involution $^* : \mathscr{A} \to \mathscr{A}$ bezeichnet man Elemente $X \in \mathscr{A}$ als

- *normal* gdw. XX^*=X^*X,
- *unitär* gdw. XX^*=X^*X=1,
- *hermitesch* gdw. $X = X^*$,
- *Projektor* gdw. $X = X^2 = X^*$,
- *positiv* gdw. $\exists Y \in \mathscr{A} : X = YY^* = Y^*Y$

Man schreibt bei einem positiven Element $X \in \mathscr{A}$ auch $X \geq 0$. Mit Hilfe der Positivität kann man in $\mathscr{A}$ eine *partielle Ordnungsrelation* definieren, für alle $X, Y \in \mathscr{A}$

$$X \leq Y :\Leftrightarrow Y - X \geq 0 \tag{64}$$

Die Involution $^* : \mathscr{A} \to \mathscr{A}$ kann als Verallgemeinerung der Konjugation komplexer Zahlen betrachtet werden. Die hermiteschen Elemente übernehmen die Rolle der reellen Zahlen. Dies zeigt auch folgender Zusammenhang: Zu jedem Element $Z \in \mathscr{A}$ existieren hermitesche Elemente $X, Y \in \mathscr{A}$, sodass gilt

$$Z = X + iY \tag{65}$$

nämlich $X = \frac{1}{2}(Z^* + Z)$,$Y = \frac{1}{2}i(Z^* - Z)$. Dabei ist $Z^* = X - iY$. Ist Z normal, so gilt $XY = YX$ und $ZZ^* = X^2 + Y^2$ ist positiv. Ist Z hermitesch, so ist Z^2 positiv.

In der Algebra $(\mathscr{L}(\mathscr{H}),+,0,\cdot,\mathbb{C},\circ,1)$ der beschränkten Operatoren im Hilbertraum $\mathscr{H}$ ist die *Adjunktion*

$$^\dagger:\mathscr{L}(\mathscr{H})\rightarrow\mathscr{L}(\mathscr{H}),A\mapsto A^\dagger$$

eine Involution, die selbstadjungierten Operatoren sind darin die hermiteschen Elemente.

Die Darstellung (65) kann aber auch auf abgeschlossene Operatoren im Hilbertraum verallgemeinert werden: Zu jedem abgeschlossenen Operator $Z\in\mathscr{D}(\mathscr{H})$ existieren selbstadjungierte Operatoren $X,Y\in\mathscr{D}(\mathscr{H})$ mit $\mathscr{D}(X)=\mathscr{D}(Y)=\mathscr{D}(Z)$, sodass gilt

$$Z=X+iY \tag{66}$$

nämlich $X=\frac{1}{2}(Z^\dagger+Z),Y=\frac{1}{2}i(Z^\dagger-Z)$.

2.6 Beschränkte lineare Operatoren, Norm

Ein linearer Operator $A\in\mathscr{D}(\mathscr{H})$ ist beschränkt gdw. es eine reelle Zahl $s>0$ gibt, sodass für alle $\varphi\in\mathscr{D}(A)$ gilt

$$\|A\varphi\|\leq s\|\varphi\| \tag{67}$$

Für beschränkte Operatoren $A\in\mathscr{D}(\mathscr{H})$ kann man eine *Operatornorm* als kleinste obere Schranke definieren

$$\|A\|:=\inf\{s\in\mathbb{R}|s>0,\forall\varphi\in\mathscr{D}(A):\|A\varphi\|\leq s\|\varphi\|\} \tag{68}$$

Jeder Operator $A\in\mathscr{L}(\mathscr{H})$ ist beschränkt. Zu jedem beschränkten Operator $A\in\mathscr{D}(\mathscr{H})$ gibt es genau einen Operator $\tilde{A}\in\mathscr{L}(\mathscr{H})$, der eine Fortsetzung von A in $\mathscr{H}$ ist, sodass für alle $\varphi\in\mathscr{D}(A)$ gilt $\tilde{A}\varphi=A\varphi$ und $\|A\|=\|\tilde{A}\|$. Man identifiziert $\tilde{A}$ daher einfach mit A.

$\mathscr{L}(\mathscr{H})$ wird oftmals als die Menge der *beschränkten Operatoren auf $\mathscr{H}$* definiert und ist mit der obigen Operatornorm ein normierter Vektorraum $\left(\mathscr{L}(\mathscr{H}),+,0,\cdot,\mathbb{C},\|.\|\right)$ und sogar ein Banachraum.

In einem endlich-dimensionalen Hilbertraum sind alle linearen Operatoren beschränkt.

2.7 C^*-Algebra der beschränkten linearen Operatoren

Ist in einer Algebra $(\mathscr{A},+,0,\cdot,\mathbb{K},\circ)$ eine Norm $\|\ \|:\mathscr{A}\rightarrow\mathbb{R},\mathrm{X}\mapsto\|X\|$ definiert, sodass $\left(\mathscr{A},+,0,\cdot,K,\|\ \|\right)$ ein Banachraum ist, und gilt für alle $X,Y\in\mathscr{A}$

$$\|XY\|\leq\|X\|\|Y\| \tag{69}$$

so bezeichnet man $(\mathscr{A},+,0,\cdot,\mathbb{K},\circ,\|\ \|)$ *Banachalgebra.* Ist in einer Banachalgebra$(\mathscr{A},+,0,\cdot,K,\circ,\|\ \|)$ eine Involution $^*:\mathscr{A}\rightarrow\mathscr{A}$ definiert und gilt für alle $X\in\mathscr{A}$

$$\|X^*\|=\|X\| \tag{70}$$

$$\|X^*X\|=\|X\|^2 \tag{71}$$

so bezeichnet man $(\mathscr{A},+,0,\cdot,\mathbb{K},\circ,\|\ \|,{}^*)$ als *C^*-Algebra* bzw. falls ein Einselement existiert $(\mathscr{A},+,0,\cdot,\mathbb{K},\circ,1,\|\ \|,{}^*)$ als *C^*-Algebra mit Einselement*.

Die beschränkten Operatoren $\mathscr{L}(\mathscr{H})$ auf einem Hilbertraum $\mathscr{H}$ bilden eine C^*-Algebra mit Einselement $\left(\mathscr{L}(\mathscr{H}),+,0,\cdot,\mathbb{C},\circ,1,\|.\|,{}^\dagger\right)$.

In einer C^*-Algebra $(\mathscr{A}, +, 0, \cdot, \mathbb{K}, \circ, \| \, \|, ^*)$ ist aufgrund der Norm die Konvergenz von Folgen definiert und man kann *Funktionen* von Operatoren durch Potenzreihen definieren, wie z.B. die Exponentialfunktion

$$\exp(X) = \sum_{k=1}^{\infty} \frac{1}{k!} X^k = \lim_{n\to\infty} \sum_{k=1}^{n} \frac{1}{k!} X^k \tag{72}$$

Dabei hilft der Satz: Konvergiert für eine Folge komplexer Zahlen $\{c_k \in \mathbb{C}\}_{k\in\mathbb{N}}$ die Potenzreihe

$$f(x) = \sum_{k=1}^{\infty} c_k x^k \tag{73}$$

für alle $x \in \mathbb{C}$ mit $|x| \leq r > 0$ (man bezeichnet r als *Konvergenzradius*), so konvergiert auch die entsprechende Operatorreihe

$$f(X) = \sum_{k=1}^{\infty} c_k X^k \tag{74}$$

für alle $X \in \mathscr{A}$ mit $\|X\| \leq r$. Bei der Potenzreihe der Exponentialfunktion im Beispiel ist der Konvergenzradius ∞, die Reihe konvergiert daher für alle $X \in \mathscr{A}$.

Für unbeschränkte Operatoren $\mathscr{D}(\mathscr{H})$ benötigt man Konvergenzbegriffe, die über die *Normkonvergenz* hinausgehen. Eine Folge von Operatoren $(A_k \in \mathscr{D}(\mathscr{H}))_{k\in\mathbb{N}}$ konvergiert gegen den Operator $A \in \mathscr{D}(\mathscr{H})$

stark, wenn für alle $\varphi \in \mathscr{D}(A)$

$$\lim_{k\to\infty} \|A_k\varphi - A\varphi\| = 0 \tag{75}$$

schwach, wenn für alle $\varphi \in \mathscr{D}(A)$ und $\psi \in \mathscr{H}$

$$\lim_{k\to\infty} \langle A_k\varphi, \psi \rangle = \langle A\varphi, \psi \rangle \tag{76}$$

Die starke Konvergenz impliziert die Schwache. Für Folgen beschränkter Operatoren impliziert die Normkonvergenz die Starke und die Schwache.

2.8 Besondere Operatoren

In der C^*-Algebra $\left(\mathscr{L}(\mathscr{H}), +, 0, \cdot, \mathbb{C}, \circ, 1, \|.\|, ^\dagger\right)$ der beschränkten Operatoren sind positive Operatoren, Projektoren und unitäre Operatoren bereits definiert. Die Definitionen dieser Operatoren auf einem Hilbertraum können jedoch formal auf $\mathscr{D}(\mathscr{H})$ ausgedehnt werden, wobei Projektoren und unitäre Operatoren immer beschränkt sind. Alle diese Operatoren haben aber auch gewisse Eigenschaften in der Wirkung auf die Vektoren des Hilbertraums, die hier angesprochen werden sollen.

2.8.1 Positive Operatoren, Partielle Ordnung, Effektoperatoren

Ein Operator $A \in \mathscr{D}(\mathscr{H})$ ist *positiv* (*positiv semidefinit*), man schreibt auch $A \geq 0$, gdw. $A = A^\dagger$ und für alle $\varphi \in \mathscr{D}(A)$ gilt

$$\langle \varphi, A\varphi \rangle \geq 0 \tag{77}$$

Für jeden normalen Operator $B \in \mathscr{D}(\mathscr{H})$ gilt $B^\dagger B = BB^\dagger \geq 0$. Ein Operator $A \in \mathscr{L}(\mathscr{H})$ ist genau dann positiv, wenn es einen Operator $B \in \mathscr{L}(\mathscr{H})$ gibt, für den gilt

$$A = BB^\dagger = B^\dagger B \tag{78}$$

Mit Hilfe der Positivität kann man für Operatoren $A, B \in \mathscr{L}(\mathscr{H})$ eine *partielle Ordnungsrelation* definieren

$$A \leq B :\Leftrightarrow B - A \geq 0 \tag{79}$$

Für alle $A, B \in \mathscr{L}(\mathscr{H})$ gilt

$$A \leq B \Rightarrow \|A\| \leq \|B\| \tag{80}$$

Einen Operator $F \in \mathscr{D}(\mathscr{H})$ bezeichnet man als *Effektoperator* gdw.

$$0 \leq F \leq 1 \tag{81}$$

und die Menge der Effektoperatoren auf $\mathscr{H}$ mit $\mathscr{F}(\mathscr{H})$. Es gilt $\mathscr{F}(\mathscr{H}) \subseteq \mathscr{L}(\mathscr{H})$. Mit $F \in \mathscr{F}(\mathscr{H})$ ist also auch $1 - F \in \mathscr{F}(\mathscr{H})$.

Mit $F_1, F_2 \in \mathscr{F}(\mathscr{H})$ ist auch jede konvexe Linearkombination $F = p_1F_1 + p_2F_2$ mit $p_1, p_2 \geq 0$ und $p_1 + p_2 \leq 1$ ein Effektoperator $F \in \mathscr{F}(\mathscr{H})$.

2.8.2 Projektionsoperatoren

Ein linearer Operator $P \in \mathscr{D}(\mathscr{H})$ ist ein *Projektionsoperator* oder *Projektor* gdw. er selbstadjungiert und *idempotent* ist d.h.

$$P = P^\dagger = P^2 \tag{82}$$

Die Menge der Projektionsoperatoren auf $\mathscr{H}$ wollen wir mit $\mathscr{P}(\mathscr{H})$ bezeichnen. Es gilt $\mathscr{P}(\mathscr{H}) \subseteq \mathscr{L}(\mathscr{H})$. Mit $P \in \mathscr{P}(\mathscr{H})$ ist auch $1 - P \in \mathscr{P}(\mathscr{H})$. Da jeder Projektionsoperator positiv ist, gilt

$$0 \leq P \leq 1 \tag{83}$$

Somit ist jeder Projektionsoperator auch ein Effektoperator. Ist $P \neq 0$ gilt $\|P\| = 1$.

Zu jedem Projektionsoperator $P \in \mathscr{P}(\mathscr{H})$ gehört umkehrbar eindeutig ein abgeschlossener Teilraum von $\mathscr{H}$

$$T_P = \{P\varphi | \varphi \in \mathscr{H}\} \tag{84}$$

sodass für alle $\psi \in \mathscr{H}$ gilt

$$\psi \in T_P \Leftrightarrow P\psi = \psi \tag{85}$$

Ist der zum Projektionsoperator $P \in \mathscr{P}(\mathscr{H})$ gehörige Teilraum T_P eindimensional, so gilt mit einem Einheitsvektor $\varphi \in T_P$ für alle $\psi \in \mathscr{H}$

$$P\psi = \langle \varphi, \psi \rangle \varphi \tag{86}$$

Wir schreiben dann $P_{[\varphi]}$. In der *Diracnotation* wird auch $P_{[\varphi]} = |\varphi\rangle\langle\varphi|$ geschrieben, was dann elegant zum Skalarprodukt $P_{[\varphi]}|\psi\rangle = |\varphi\rangle\langle\varphi|\psi\rangle$ führt.

Zwei Projektoren $P, Q \in \mathscr{P}(\mathscr{H})$ sind *orthogonal* zueinander gdw. $PQ = 0$. Es gilt dann

$$PQ = 0 \Leftrightarrow \forall \psi \in T_P, \varphi \in T_Q : \langle \psi, \varphi \rangle = 0 \tag{87}$$

2.8.3 Unitäre Operatoren, unitäre Transformationen

Ein linearer Operator $U \in \mathscr{D}(\mathscr{H})$ ist *unitär* gdw. für alle $\varphi, \psi \in \mathscr{D}(U)$ gilt

$$\langle U\varphi, U\psi\rangle = \langle \varphi, \psi\rangle \tag{88}$$

Ein unitärer Operator $U\in \mathscr{D}(\mathscr{H})$ ist daher normal und beschränkt. Es gibt somit eine eindeutige Fortsetzung $U \in \mathscr{L}(\mathscr{H})$ mit $U^\dagger = U^{-1}$. Ein linearer Operator $U\in \mathscr{L}(\mathscr{H})$ ist unitär gdw.

$$U\,U^\dagger = U^\dagger U = 1 \tag{89}$$

Es folgt, dass $U^\dagger = U^{-1}$ und $\left\|U\right\| = 1$.

Eine *unitäre Transformation* $\varphi \to U\varphi$ erhält das Skalarprodukt und damit die Orthogonalitätsbeziehungen ebenso wie die Norm.

Durch eine unitäre Transformation $U \in \mathscr{L}(\mathscr{H})$ werden Orthonormalbasen in Orthonormalbasen überführt: Gilt für alle $j,k \in I$ und $\beta_j \in \mathscr{H}$ dass $\left\langle \beta_j, \beta_k \right\rangle = \delta_{j,k}$ so gilt dies auch für alle $\beta'_k = U\,\beta_k$: $\left\langle \beta'_j, \beta'{}_k \right\rangle = \delta_{j,k}$. Gilt für $\psi, \varphi \in \mathscr{H}$ und $A \in \mathscr{L}(\mathscr{H})$

$$\psi = A\varphi \tag{90}$$

so gilt mit einer unitären Transformation U der Vektoren $\psi, \varphi \to \psi' = U\psi, \varphi' = U\varphi$ wegen $U\psi = U\,A\,U^{-1}\,U\,\varphi$ mit dem *transformierten Operator* $A' = U\,A\,U^{-1}$ die Beziehung

$$\psi' = A'\varphi' \tag{91}$$

Gibt es daher zu zwei Operatoren $A, B \in \mathscr{D}(\mathscr{H})$ eine unitäre Transformation $U \in \mathscr{L}(\mathscr{H})$ sodass

$$B = U\,A\,U^{-1} \tag{92}$$

so bezeichnet man A und B als *unitär äquivalent.*

2.9 Tensorprodukt von Operatoren

Sei $\mathscr{H} = \mathscr{H}_1 \otimes \mathscr{H}_2$ das Tensorprodukt zweier separabler Hilberträume. Es gibt zu je zwei linearen Operatoren $A \in \mathscr{D}(\mathscr{H}_1)$,$B \in \mathscr{D}(\mathscr{H}_2)$ einen linearen Operator C in $\mathscr{H}$, so dass für alle $\varphi \in \mathscr{D}(A)$,$\chi \in \mathscr{D}(B)$ gilt

$$C(\varphi \otimes \chi) = (A\varphi) \otimes (B\chi) \tag{93}$$

Man bezeichnet man C als das Tensorprodukt von A und B und schreibt

$$C = A \otimes B \tag{94}$$

Für alle $X, Y \in \mathscr{D}(\mathscr{H}_1)$, $V, W \in \mathscr{D}(\mathscr{H}_2)$ und $c \in \mathbb{C}$ gilt:

$$X \otimes V \in \mathscr{D}(\mathscr{H}) \tag{95}$$

$$c \cdot (X \otimes V) = (c \cdot X) \otimes V = X \otimes (c \cdot V) \tag{96}$$

$$(X + Y) \otimes V = (X \otimes V) + (Y \otimes V) \tag{97}$$

$$X \otimes (V + W) = (X \otimes V) + (X \otimes W) \tag{98}$$

$$(X \otimes V)^\dagger = (X^\dagger \otimes V^\dagger) \tag{99}$$

und für alle $X, Y \in \mathscr{L}(\mathscr{H}_1)$, $V, W \in \mathscr{L}(\mathscr{H}_2)$ und $c \in \mathbb{C}$

$$X \otimes V \in \mathscr{L}(\mathscr{H}) \tag{100}$$

$$(X \otimes V)(Y \otimes W) = (X\,Y) \otimes (V\,W) \tag{101}$$

$$\|X \otimes V\| = \|X\|\|V\| \tag{102}$$

Daher sind die Tensorprodukte von selbstadjungierten Operatoren selbstadjungiert, die von unitären Operatoren unitär, und die von Projektionsoperatoren Projektionsoperatoren.

Man kann jeden Operator $X \in \mathscr{L}(\mathscr{H}_1 \otimes \mathscr{H}_2)$ als Summe von Tensorprodukten schreiben, d.h.

$$X = \sum_{j \in I_1} \sum_{k \in I_2} c_{j,k} A_j \otimes B_k \tag{103}$$

mit $A_j \in \mathscr{L}(\mathscr{H}_1)$, $B_j \in \mathscr{L}(\mathscr{H}_2)$ und $c_{j,k} \in \mathbb{C}$ für alle $j \in I_1, k \in I_2$ und abzählbaren Indexmengen I_1, I_2 .

2.10 Spektrum und Spektraldarstellung

2.10.1 Eigenwerte und Eigenvektoren eines Operators

Gilt für einen Operator $A \in \mathscr{D}(\mathscr{H})$ mit einem $a \in \mathbb{C}$ und einem $\varphi \in \mathscr{H}$ mit $\varphi \neq 0$

$$A\varphi = a\varphi \tag{104}$$

so bezeichnet man φ als *Eigenvektor* von A zum *Eigenwert* a.

Sind $\varphi, \chi \in \mathscr{H}$ Eigenvektoren von A zum gleichen Eigenwert a, so ist auch jede Linearkombination $c\varphi + d\chi$ mit $c, d \in \mathbb{C}$ (und $c\varphi + d\chi \neq 0$) ein Eigenvektor zum Eigenwert a.

Bei einem abgeschlossenen Operator $A \in \mathscr{D}(\mathscr{H})$ gehört zu jedem Eigenwert ein abgeschlossener Teilraum von Eigenvektoren (und dem Nullvektor), der *Eigenraum* $T_a \in \mathscr{T}(\mathscr{H})$. Die Dimension des Eigenraums $\dim T_a$ bezeichnet man als *Vielfachheit* bzw. *Multiplizität* des Eigenwerts. Mit dem Projektionsoperator $P_a \in P(\mathscr{H})$ auf den Eigenraum zum Eigenwert a gilt für alle $\varphi \in \mathscr{H}$

$$AP_a\varphi = aP_a\varphi \tag{105}$$

Für abgeschlossene Operatoren folgt aus (104)

$$A^\dagger\varphi = a^*\varphi \tag{106}$$

Die Eigenwerte eines selbstadjungierten Operators sind daher alle reell ($a = a^*$).

Bei jedem normalen Operator $A \in \mathscr{D}(\mathscr{H})$ sind Eigenvektoren $\varphi, \chi \in \mathscr{H}$ zu verschiedenen Eigenwerten $a, b \in \mathbb{C}$ orthogonal. Denn wegen $\langle \chi, A^\dagger A\varphi \rangle = \langle \chi, AA^\dagger\varphi \rangle = a^*a\langle \chi, \varphi \rangle = b^*b\langle \chi, \varphi \rangle = a^*b\langle \chi, \varphi \rangle = b^*a\langle \chi, \varphi \rangle$ folgt $\langle \chi, \varphi \rangle = 0$ wenn $a \neq b$; für die zugehörigen Eigenraumprojektoren gilt dann $P_aP_b = 0$.

2.10.2 Spektrum eines Operators

Die Eigenwertgleichung (104) kann man auch in folgender Form schreiben

$$(A - a1)\varphi = 0 \tag{107}$$

Ein linearer Operator $(A - a1)$, der mit gegebenen $a \in \mathbb{C}$ diese Gleichung erfüllt, kann nicht invertierbar sein: Denn $(A - a1)^{-1}0$ müsste den Vektor φ ergeben, was für lineare Abbildungen unmöglich ist, da der Nullvektor immer auf sich selbst abgebildet wird.

Das Spektrum eines Operators $A \in \mathscr{D}(\mathscr{H})$ ist

$$\sigma(A) = \mathbb{C} \setminus \left\{ a \in \mathbb{C} | (A - a1)^{-1} \in \mathscr{L}(\mathscr{H}) \right\} \tag{108}$$

Alle Eigenwerte eines Operators gehören zum Spektrum

$$(A - a1)\varphi = 0 \Rightarrow a \in \sigma(A) \tag{109}$$

Sie bilden das sogenannte *Punktspektrum*, es ist in einem separablen Hilbertraum immer endlich oder abzählbar unendlich. In endlich-dimensionalen Hilberträumen treten nur Punktspektren auf. Im unendlich-dimensionalen Hilbertraum gibt es aber Operatoren, bei denen auch Werte zum Spektrum gehören, die keine Eigenwerte sind und die sogar ein Kontinuum bilden können.

Ein Wert $a \in \mathbb{C}$ gehört genau dann zum Spektrum eines normalen Operators $A \in \mathscr{D}(\mathscr{H})$, wenn es eine Folge von Einheitsvektoren $(\varphi_k \in \mathscr{H})_{k \in \mathbb{N}}$ gibt, sodass gilt

$$\lim_{k \to \infty} \|(A - a1)\varphi_k\| = 0 \tag{110}$$

Diese Folge $(\varphi_k \in \mathscr{H})_{k \in \mathbb{N}}$ enthält "Quasieigenvektoren" zum "Quasieigenwert" a.

Für alle $A \in \mathscr{L}(\mathscr{H})$ und alle Polynome $P(A) = \sum_k c_k A^k$ mit $c_k \in \mathbb{C}$ gilt

$$\sigma(P(A)) = P(\sigma(A)) \tag{111}$$

2.10.3 Spektren spezieller Operatortypen

Für abgeschlossene Operatoren $A \in \mathscr{D}(\mathscr{H})$ gilt

$$a \in \sigma(A) \Leftrightarrow a^* \in \sigma(A^\dagger) \tag{112}$$

Das Spektrum eines selbstadjungierten Operators $A \in \mathscr{D}(\mathscr{H})$ ist reell

$$A = A^\dagger \Rightarrow \sigma(A) \subseteq \mathbb{R} \tag{113}$$

Das Spektrum eines positiven Operators $A \in \mathscr{D}(\mathscr{H})$ ist nicht-negativ

$$A \geq 0 \Rightarrow a \in \sigma(A) \Rightarrow a \geq 0 \tag{114}$$

Das Spektrum eines beschränkten Operators $A \in \mathscr{L}(\mathscr{H})$ ist kompakt und es gilt

$$a \in \sigma(A) \Rightarrow |a| \leq \|A\| \tag{115}$$

Für das Spektrum eines Effektoperators $E \in \mathscr{L}(\mathscr{H})$ gilt daher

$$a \in \sigma(E) \Rightarrow 0 \leq |a| \leq 1 \tag{116}$$

Projektionsoperatoren $P \in \mathscr{P}(\mathscr{H})$ haben ein reines Punktspektrum mit $\sigma(P) = \{0,1\}$ für $0 \neq P \neq 1$, $\sigma(1) = \{1\}, \sigma(0) = \{0\}$.

Das Spektrum eines unitären Operators $U \in \mathscr{L}(\mathscr{H})$ liegt auf dem komplexen Einheitskreis

$$c \in \sigma(U) \Rightarrow |c| = 1 \tag{117}$$

Für eine C^*-Algebra mit Einselement $(\mathscr{A}, +, 0, \cdot, \mathbb{K}, \circ, 1, \| \,\|, ^*)$ ist das Spektrum $\sigma(X)$ eines Elements $X \in \mathscr{A}$ definiert durch

$$\sigma(X) = \mathbb{K} \setminus \left\{ x \in \mathbb{K} \,|\, (X - x1)^{-1} \in \mathscr{A} \right\} \tag{118}$$

und ist eine nicht-leere, beschränkte und geschlossene Menge. Es gilt für alle $X \in \mathscr{A}$

$$x \in \sigma(X) \Rightarrow |x| \leq \|X\| \tag{119}$$

$$X = X^* \Rightarrow \sigma(A) \subseteq \mathbb{R} \tag{120}$$

$$X \geq 0 \Rightarrow \sigma(A) \subseteq \mathbb{R}_0^+ \tag{121}$$

$$X = X^* = X^2 \Rightarrow \sigma(X) \subseteq \{0,1\} \tag{122}$$

$$X^* = X^{-1} \Rightarrow \sigma(X) \subseteq \{x \in \mathbb{K} \,|\, |x| = 1\} \tag{123}$$

2.10.4 Spektraldarstellung normaler Operatoren mit reinem Eigenwertspektrum

Jeder normale Operator $A \in \mathscr{L}(\mathscr{H})$ mit einem reinen Punktspektrum $\sigma(A) \subseteq \mathbb{C}$ kann in der Form

$$A = \sum_{a \in \sigma(A)} a P_a \tag{124}$$

dargestellt werden, wobei $P_a \in \mathscr{P}(\mathscr{H})$ für alle $a \in \sigma(A)$ den Projektionsoperator auf den zu a gehörenden Eigenraum bezeichnet.

Die Projektoren $\{P_a\}_{a \in \sigma(A)}$ müssen eine *orthogonale Zerlegung der Einheit* (orthogonal decomposition of identity, ODI) bilden, d.h. es gilt für alle $a, b \in \sigma(A)$

$$a \neq b \Rightarrow P_a P_b = 0 \tag{125}$$

$$\sum_{a \in \sigma(a)} P_a = 1 \tag{126}$$

Für jeden Vektor $\varphi \in \mathscr{H}$ gilt dann wie behauptet

$$A\varphi = A\Big(\sum_{a \in \sigma(A)} P_a\Big)\varphi = \sum_{a \in \sigma(A)} A P_a \varphi = \sum_{a \in \sigma(A)} a P_a \varphi \tag{127}$$

Es gibt wegen (126) sogar eine vollständige Orthonormalbasis $\{\varphi_k \in \mathscr{H}\}_{k \in I_D}$ von Eigenvektoren mit $A\varphi_k = a_k \varphi_k$, die allerdings nicht notwendigerweise alle zu verschiedenen Eigenwerten gehören.

2.10.5 Spektraldarstellung normaler Operatoren

Für normale Operatoren $A \in \mathscr{D}(\mathscr{H})$ mit beliebigem Spektrum $\sigma(A) \subseteq \mathbb{C}$ kann diese *Spektraldarstellung* verallgemeinert werden zu

$$A = \int\limits_{\sigma(A)} a\, dP_a \tag{128}$$

Dieses Integral kann für beschränkte Operatoren $A \in \mathscr{L}(\mathscr{H})$ etwa in folgendem Sinne verstanden werden: Es gibt eine zu A gehörende *Spektralfamilie* $\mathscr{P}(A) \subseteq \mathscr{P}(\mathscr{H})$ paarweiser kommutierender Projektionsoperatoren und für jedes $\varepsilon > 0$ eine Menge von Spektralwerten $S_\varepsilon \subseteq \sigma(A)$ mit einer passenden orthogonale Zerlegung der Einheit $\{P_a \in \mathscr{P}(A)\}_{a \in S_\varepsilon}$, sodass mit dem normalen Operator

$$A_\varepsilon = \sum_{a \in S_\varepsilon} a P_a \tag{129}$$

gilt

$$\left\| A - A_\varepsilon \right\| < \varepsilon \tag{130}$$

Für unbeschränkte Operatoren $A \in \mathscr{D}(\mathscr{H})$ muss man eine andere Form der Konvergenz verwenden z.B. die schwache Konvwergenz: Für alle $\varphi, \psi \in \mathscr{D}(A)$ gilt

$$\left| \left\langle \varphi, \left(A - A_\varepsilon\right) \psi \right\rangle \right| < \varepsilon \tag{131}$$

2.10.6 Projektionswertiges Maß (PVM)

Die Spektralfamilie $\mathscr{P}(A)$ eines selbstadjungierten Operators A ergibt sich durch ein *projektionswertiges Maß* PVM (projection valued measure), einer Abbildung der Borelmengen der reellen Zahlen $\mathscr{B}(\mathbb{R})$ in die Projektoren des Hilbertraums $\mathscr{P}(\mathscr{H})$

$$P_A : \mathscr{B}(\mathbb{R}) \to \mathscr{P}(\mathscr{H}), B \mapsto P_A(B) \tag{132}$$

wobei für alle $B, C \in \mathscr{B}(\mathbb{R})$ gilt

$$P_A(\varnothing) = 0, P_A(\mathbb{R}) = 1$$
$$B \cap C = \varnothing \Rightarrow P_A(B) P_A(C) = 0$$

und für alle B_k mit $B_j \cap B_k = \varnothing$ für $k \neq j$ mit $k, j \in I$

$$P_A(\bigcup_{k \in I} B_k) = \sum_{k \in I} P_A(B_k)$$

Die Bilder kommutieren paarweise, für alle $B, C \in \mathscr{B}(\mathbb{R})$ gilt

$$P_A(B) P_A(C) = P_A(C) P_A(B)$$

Jede Partition von $\mathbb{R}$ aus Borelmengen, $\{B_k \in \mathscr{B}(\mathbb{R})\}_{k \in I}$ mit $\mathbb{R} = \bigcup\limits_{k \in I} B_k$ und$B_k \cap B_j = \emptyset$ für alle $k, j \in I$ mit $k \neq j$, hat als Bild eine *orthogonale Zerlegung der Einheit* $\{P_A(B_k)\}_{k \in I}$.

Die Spektralfamilie eines beliebigen selbstadjungierten Operators A ist die Menge aller Bilder von Borelmengen

$$\mathscr{P}(A) = P_A(\mathscr{B}(\mathbb{R})) \tag{133}$$

Jedes PVM definiert einen selbstadjungierten Operator $A \in \mathscr{D}(\mathscr{H})$ mit dem Spektrum

$$\sigma(A) = \bigcap \{B \in \mathscr{B}(\mathbb{R}) | B = \bar{B}, P_A(B) = 1\} \tag{134}$$

Jede *disjunkte Zerlegung* des Spektrums $S = \{B_k \in \mathscr{B}(\mathbb{R})\}_{k \in I}$ mit $B_k \cap B_j = \emptyset$ für alle $k, j \in I$ mit $k \neq j$ und $\cup_{k \in I} B_k = \sigma(A)$ hat als Bild eine orthogonale Zerlegung der Einheit $\{P_A(B_k)\}_{k \in I}$.

Gilt für ein $a \in \mathbb{C}$, dass $P_A(\{a\}) \neq 0$, so ist a ein Eigenwert und $P_A(\{a\}) = P_a$ der Projektor auf den Eigenraum zum Eigenwert a. Gilt $P_A(\{a\}) = 0$ aber $P_A(B) \neq 0$ für jedes offene Intervall U_a mit $a \in I_a$, dann gehört a zum kontinuierlichen Spektrum.

2.10.7 Funktionen normaler Operatoren

Die Spektraldarstellung eines normalen Operators $A \in \mathscr{D}(\mathscr{H})$ erlaubt es, für beliebige borelmessbare Funktionen $f : \sigma(A) \to \mathbb{C}$ die zugehörige Operatorfunktion zu definieren als

$$f(A) = \int\limits_{\sigma(A)} f(a)\, dP_a \tag{135}$$

Für Polynome und Potenzreihen von beschränkten Operatoren liefert diese Definition die gleichen Ergebnisse wie die entsprechenden C*-algebraischen Definitionen.

Die Borelmessbarkeit der Funktion f garantiert, dass das Urbild einer Borelmenge $B \in \mathscr{B}(\mathbb{C})$ ebenfalls eine Borelmenge ist $f^{-1}(B) \in \mathscr{B}(\mathbb{C})$, sodass sich das PVM von $f(A)$ aus dem PVM von A ergibt durch

$$P_{f(A)} : \mathscr{B}(\mathbb{C}) \to \mathscr{P}(\mathscr{H}), B \mapsto P_{f(A)}(B) = P_A(f^{-1}(B)) \tag{136}$$

Es folgt daher $\sigma(f(A)) = f(\sigma(A))$ und $\mathscr{P}(f(A)) \subseteq \mathscr{P}(A)$. Für jede disjunkte Zerlegung des Spektrums gilt dann mit $f_k \in B_k$

$$f(A)_S = \sum_{k\in I} f_k P_{f(A)}(B_k) = \sum_{k\in I} f(a_k) P_A(f^{-1}(B_k)) \tag{137}$$

mit $a_k \in f^{-1}(B_k)$.

Jede Indikatorfunktion $I_B : \mathbb{C} \to \mathbb{C}$ einer Borelmenge $B \in \mathscr{B}(\mathbb{C})$ ist borelmessbar. Die Anwendung von I_B auf einen Operator $A \in \mathscr{D}(\mathscr{H})$ ergibt für alle $B \in \mathscr{B}(\mathbb{C})$ gerade das PVM des Operators

$$I_B(A) = P_A(B) \tag{138}$$

2.10.8 Unitäre Operatoren als Funktionen selbstadjungierter Operatoren

Zu jedem unitären Operator U gibt es einen selbstadjungierten Operator $A \in D(\mathscr{H})$ sodass gilt

$$U = e^{iA} \tag{139}$$

Umgekehrt definiert dies auch für jeden selbstadjungierten Operator einen unitären Operator. (Diese Zuordnungen sind allerdings nicht eindeutig).

2.10.9 Kommutierende normale Operatoren

Zwei Operatoren $A, B \in \mathscr{L}(\mathscr{H})$ kommutieren gdw.

$$AB - BA = 0 \tag{140}$$

Dies hat für normale Operatoren zur Folge, dass alle Projektoren ihrer Spektralfamilie kommutieren.

Für unbeschränkte Operatoren $A, B \in \mathscr{D}(\mathscr{H})$ tritt das Problem auf, dass $A\varphi$ nicht im Definitionsbereich von B liegen muss, selbst wenn $\varphi \in D(A) \cap D(B)$. Für normale Operatoren $A, B \in \mathscr{D}(\mathscr{H})$ mit $\mathscr{D}(A) \neq \mathscr{H}$ oder $\mathscr{D}(B) \neq \mathscr{H}$ *definiert* man daher, dass A, B genau dann *kommutieren*, wenn alle Projektoren ihrer Spektralfamilie paarweise kommutieren, d.h. für alle $P \in \mathscr{P}(A)$ und alle $Q \in \mathscr{P}(B)$ gilt $PQ = QP$.

Es folgt sofort: Für einen normalen Operator $A \in \mathscr{D}(\mathscr{H})$ kommutieren die Operatoren $f(A), g(A)$ für beliebige borelmessbare Funktionen $f,g : \mathbb{C} \to \mathbb{C}$.

Eine weitere Folgerung: Kommutierende normale Operatoren mit reinem Eigenwertspektrum haben eine gemeinsame Orthonormalbasis von Eigenvektoren.

v. Neumann bewies aber auch folgenden Satz: Zu jeder Familie von selbstadjungierten Operatoren $\{A_k \in \mathscr{D}(\mathscr{H})\}_{k\in I}$, die alle paarweise kommutieren, gibt es einen selbstadjungierten Operator $A \in \mathscr{D}(\mathscr{H})$ und eine Familie von borelmessbaren reellen Funktionen $\{f_k \in \mathbb{R}^{\mathbb{R}}\}_{k\in I}$, sodass für alle $k \in I$ gilt $A_k = f_k(A_k)$.

Jeder normale Operator $A \in \mathscr{D}(\mathscr{H})$ kann daher als Funktion eines selbstadjungierten Operators $X \in \mathscr{D}(\mathscr{H})$ verstanden werden: $A = f(X) + i\,g(X)$ mit reellen, borelmessbaren Funktionen f,g. v. Neumanns Satz gilt daher auch für Familien von normalen Operatoren.

2.11 Spur und statistische Operatoren

2.11.1 Spur und Spurklasse

Bei Matrizen ist die Spur (engl. Trace) die Summe der Diagonalelemente. Man definiert daher für lineare Operatoren $A \in \mathscr{L}(\mathscr{H})$ in der Matrixdarstellung analog

$$\operatorname{tr}(A) := \sum_{k=1}^{I_D} \langle \beta_k, A\beta_k \rangle \tag{141}$$

mit einer beliebigen Orthonormalbasis $\{\beta_k \in \mathscr{H}\}_{k\in I_D}$ und geeigneter Indexmenge I_D mit $|I_D| = dim\mathscr{H}$. In einem unendlich-dimensionalen Hilbertraum muss die Spur nicht für jeden Operator existieren, da die Summe nicht notwendig konvergiert. Die beschränkten Operatoren mit endlicher Spur werden manchmal als *nuklear* bezeichnet und bilden die *Spurklasse* (engl. trace class) $\mathscr{N}(\mathscr{H}) \subseteq \mathscr{L}(\mathscr{H})$. Operatoren der Spurklasse haben (bis auf die mögliche Ausnahme 0) ein reines Eigenwertspektrum d.h. für alle $A \in \mathscr{N}(\mathscr{H})$ gilt

$$a \in \sigma(A), a \neq 0 \Rightarrow \exists \varphi \in \mathscr{H} : A\varphi = a\varphi \tag{142}$$

Der Wert der Spur ist unabhängig von der jeweiligen Orthonormalbasis. Für einen selbstadjungierten Operator $A \in \mathscr{N}(\mathscr{H})$ ist die Spur reell, da die Skalarprodukte $\langle \beta_k, A\beta_k \rangle$ für alle $k \in I_D$ reell sind. Für alle Operatoren der Spurklasse $S,T \in \mathscr{N}(\mathscr{H})$, alle beschränkten Operatoren $A \in \mathscr{L}(\mathscr{H})$ und alle $a,b \in \mathbb{C}$ gilt

$$\operatorname{tr}(a\,S + b\,T) = a\operatorname{tr}(S) + b\operatorname{tr}(T) \tag{143}$$

$$SA, AS \in \mathscr{N}(\mathscr{H}) \tag{144}$$

$$\operatorname{tr}(SA) = \operatorname{tr}(AS) \tag{145}$$

Für einen positiven Operator $A \in \mathscr{N}(\mathscr{H})$ gilt $\operatorname{tr}(A) > 0$.

Beim Tensorprodukt $\mathscr{H} = \mathscr{H}_1 \otimes \mathscr{H}_2$ zweier separabler Hilberträume gilt für alle $S \in \mathscr{N}(\mathscr{H}_1), T \in \mathscr{N}(\mathscr{H}_2)$ mit der Orthonormalbasis von Produktvektoren mit $\{\alpha_j \otimes \beta_k \in \mathscr{H}\}$

$$\operatorname{tr}(S\otimes T) := \sum_{j=1}^{\dim\mathscr{H}_1} \sum_{k=1}^{\dim\mathscr{H}_2} \langle \alpha_j \otimes \beta_k, S\otimes T, \alpha_j \otimes \beta_k \rangle = \tag{146}$$

$$\sum_{j=1}^{\dim\mathscr{H}_1} \sum_{k=1}^{\dim\mathscr{H}_2} \langle \alpha_j S \alpha_j \rangle \langle \beta_k, T\beta_k \rangle = \operatorname{tr}(S)\operatorname{tr}(T) \tag{147}$$

Für alle unitären Transformationen $U \in \mathscr{U}(\mathscr{H})$ und alle linearen Operatoren $S \in \mathscr{N}(\mathscr{H})$ gilt:

$$\mathrm{tr}(S) = \mathrm{tr}(U\,S\,U^{-1}) \tag{148}$$

denn $\mathrm{tr}((U\,S)U^{-1}) = \mathrm{tr}(U^{-1}(U\,S)) = \mathrm{tr}(S)$. Daraus folgt die Invarianz der Spur bzgl. der Basisdarstellung.

Für Projektionsoperatoren $P \in \mathscr{P}(\mathscr{H})$ liefert die Spur die Dimension des zugehörigen abgeschlossenen Teilraums $T_P \in \mathscr{T}(\mathscr{H})$

$$\mathrm{tr}(P) = \dim T_P \tag{149}$$

Ist $\mathrm{tr}(P) = \dim T_P = 1$, gilt für jeden Einheitsvektor $\varphi \in T_P$ und jeden Operator $A \in \mathscr{L}(\mathscr{H})$

$$\mathrm{tr}(PA) = \left\langle \varphi, A\varphi \right\rangle \tag{150}$$

2.11.2 Dichteoperatoren

Ein linearer Operator $W \in \mathscr{L}(\mathscr{H})$ ist ein *Dichteoperator* (*statistischer Operator*, *Zustandsoperator*) genau dann, wenn er positiv ist und die Spur 1 hat:

$$W = W^\dagger \tag{151}$$

$$W \geq 0 \tag{152}$$

$$\mathrm{tr}(W) = 1 \tag{153}$$

Wir bezeichnen die Menge der Dichteoperatoren mit $\mathscr{S}(\mathscr{H})$. Es gilt $\mathscr{S}(\mathscr{H}) \subseteq \mathscr{N}(\mathscr{H})$ und für alle $W \in \mathscr{S}(\mathscr{H})$

$$0 \leq \left\|W\right\| \leq 1 \tag{154}$$

$$\sigma(W) \subseteq [0,1] \tag{155}$$

$$\left\|W\right\| = 1 \Leftrightarrow W^2 = W \tag{156}$$

Letzteres bedeutet: Ein Dichteoperator hat genau dann die Norm 1, wenn er ein Projektionsoperator ist. Es handelt sich dann um einen Projektionsoperator auf einen eindimensionalen Teilraum T_W wegen $1 = \mathrm{tr}(W) = \dim T_W$.

Konvexe Linearkombinationen von Dichteoperatoren ergeben wieder einen Dichteoperator, mit $W_k \in \mathscr{S}(\mathscr{H})$ und $p_k \in [0,1]$ ist auch $\sum_k p_k W_k \in \mathscr{S}(\mathscr{H})$. Die Dichteoperatoren bilden daher eine *konvexe* Menge, deren *extremale Elemente,* die nicht als nichttriviale konvexe Linearkombination anderer Elemente dargestellt werden können, gerade die Projektionsoperatoren auf eindimensionale Teilräume sind.

Da ein Dichteoperator zur Spurklasse gehört, hat er (bis auf die mögliche Ausnahme 0) ein reines Eigenwertspektrum. In der Spektraldarstellung

$$W = \sum_k p_k P_k \tag{157}$$

können für $p_k > 0$ keine Projektoren auf unendlich-dimensionale Teilräume auftauchen da $\mathrm{tr}(W) = 1 = \sum\limits_k p_k \mathrm{tr}(P_k) = \sum\limits_k p_k \dim T_{P_k}$.

Bei einer C^*-Algebra mit Einselement $(\mathscr{A},+,0,\cdot,\mathbb{K},\circ,1,\|\ \|,{}^*)$ heißt eine Abbildung $e:\mathscr{A}\to\mathbb{K}$ *Erwartungswertfunktional* (oder auch *Zustand*), wenn für alle $a,b\in\mathbb{K}$ und alle $X,Y,X_k\in\mathscr{A}$ gilt

$$e(aX+bY)=ae(X)+be(Y) \tag{158}$$

$$\lim_{k\to\infty}X_k=X\ \Rightarrow\ \lim_{k\to\infty}e(X_k)=e(X) \tag{159}$$

$$X\geq 0\Rightarrow e(X)\in\mathbb{R}_0^+ \tag{160}$$

$$e(1)=1 \tag{161}$$

Man bezeichnet e daher auch als normiertes, positives, stetiges, lineares Funktional. Solche Erwartungswertfunktionale stehen in engem Zusammenhang mit verallgemeinerten Wahrscheinlichkeitsmaßen auf den Projektoren der Algebra.

Wie schon v. Neumann zeigte, definiert jedes Erwartungswertfunktional e auf der C^*-Algebra der beschränkten linearen Operatoren $\left(\mathscr{L}(\mathscr{H}),+,0,\cdot,\mathbb{C},\circ,1,\left\|.\right\|,{}^\dagger\right)$ umkehrbar eindeutig einen Dichteoperator W_e, sodass für alle $X\in\mathscr{L}(\mathscr{H})$ gilt

$$e(X)=\mathrm{tr}(W_eX) \tag{162}$$

Weiterhin definiert jedes Erwartungswertfunktional e auf $\mathscr{L}(\mathscr{H})$ bzw. jeder Dichteoperator $W\in\mathscr{L}(\mathscr{H})$ für einen selbstadjungierten Operator $X=X^\dagger\in\mathscr{D}(\mathscr{H})$ über das zugehörige PVM $P_X:\mathscr{B}(\mathbb{R})\to\mathscr{P}(\mathscr{H})$ ein Wahrscheinlichkeitsmaß auf dem Ereignisraum $(\mathbb{R},\mathscr{B}(\mathbb{R}))$

$$p_{X,W}:\mathscr{B}(\mathbb{R})\to[0,1],B\mapsto p_{X,W}(B)=e(P_X(B))=\mathrm{tr}(WP_X(B)) \tag{163}$$

2.11.3 Partielle Spur

Betrachtet man das Tensorprodukt zweier Hilberträume $\mathscr{H}=\mathscr{H}_1\otimes\mathscr{H}_2$ mit der Orthonormalbasis von Produktvektoren mit $\{\alpha_j\otimes\beta_k\in\mathscr{H}\}$, so gilt für die Spur des Tensorprodukts zweier Operatoren $S\in\mathscr{N}(\mathscr{H}_1),T\in\mathscr{N}(\mathscr{H}_2)$

$$\mathrm{tr}(S\otimes T):=\sum_{j=1}^{\dim\mathscr{H}_1}\sum_{k=1}^{\dim\mathscr{H}_2}\left\langle\alpha_jS\alpha_j\right\rangle\left\langle\beta_k,T\beta_k\right\rangle \tag{164}$$

Bildet man die Spur nur teilweise, über die Basisvektoren in $\mathscr{H}_1$, so erhält man dadurch einen linearen Operator auf $\mathscr{H}_2$

$$\mathrm{tr}_{\mathscr{H}_1}(S\otimes T)=\sum_{j=1}^{\dim\mathscr{H}_1}\left\langle\alpha_j,S\alpha_j\right\rangle T=\mathrm{tr}(S)T \tag{165}$$

wobei $\mathrm{tr}(S)$ sich auf den Hilbertraum $\mathscr{H}_1$ bezieht. Da alle linearen Operatoren $X\in\mathscr{L}(\mathscr{H}_1\otimes\mathscr{H}_2)$ als Linearkombinationen von Tensorprodukten geschrieben werden können (103), kann man damit eine lineare Abbildungen der Operatoren der Spurklasse

$$\mathrm{tr}_{\mathscr{H}_1}:\mathscr{N}(\mathscr{H}_1\otimes\mathscr{H}_2)\to\mathscr{L}(\mathscr{H}_2)$$

in die linearen Operatoren auf $\mathscr{H}_2$ definieren, die man als *partielle Spurbildung* bzw. *Verkürzung* bezeichnet.

Definiert man entsprechend $\mathrm{tr}_{\mathscr{H}_2}:\mathscr{N}(\mathscr{H}_1\otimes\mathscr{H}_2)\to\mathscr{L}(\mathscr{H}_1)$, so folgt für alle $X\in\mathscr{N}(\mathscr{H}_1\otimes\mathscr{H}_2),S\in\mathscr{N}(\mathscr{H}_1)$, $T\in\mathscr{N}(\mathscr{H}_2)$

$$\mathrm{tr}(\mathrm{tr}_{\mathscr{H}_1}(S\otimes T))=\mathrm{tr}(\mathrm{tr}_{\mathscr{H}_2}(S\otimes T)))=\mathrm{tr}(S\otimes T)=\mathrm{tr}(S)\mathrm{tr}(T) \tag{166}$$

$$\mathrm{tr}(\mathrm{tr}_{\mathscr{H}_1}(X)) = \mathrm{tr}(\mathrm{tr}_{\mathscr{H}_2}(X))) = \mathrm{tr}(X) \tag{167}$$

Dabei ist natürlich zu beachten, in welchem Hilbertraum die Spurbildung jeweils erfolgt.

Für jeden Dichteoperator $W \in \mathscr{S}(\mathscr{H}_1 \otimes \mathscr{H}_2)$ ergibt die partielle Spurbildung wieder einen Dichteoperator $W_2 = \mathrm{tr}_{\mathscr{H}_1}(W) \in \mathscr{S}(\mathscr{H}_2)$ bzw. $W_1 = \mathrm{tr}_{\mathscr{H}_2}(W) \in \mathscr{S}(\mathscr{H}_1)$.

(*Purification*) Für jeden Dichteoperator $W \in \mathscr{S}(\mathscr{H})$ gibt es einen Hilbertraum $\mathscr{H}'$ und einen Vektor $\psi \in \mathscr{H} \otimes \mathscr{H}'$, sodass gilt

$$W = \mathrm{tr}_{\mathscr{H}'}(P_{[\psi]})$$

2.11.4 Schmidt-Zerlegung (biorthogonale Zerlegung)

Die Darstellung eines Vektors $\psi \in \mathscr{H}_1 \otimes \mathscr{H}_2$ in der Produktbasis $\{\alpha_j \otimes \beta_k \in \mathscr{H}\}$ ist gegeben durch

$$\psi = \sum_{j=1}^{\dim \mathscr{H}_1} \sum_{k=1}^{\dim \mathscr{H}_2} c_{j,k} \cdot \alpha_j \otimes \beta_k$$

Es gibt aber zu jedem $\psi \in \mathscr{H}_1 \otimes \mathscr{H}_2$ Orthonormalbasen $\{\varphi_k \in \mathscr{H}_1\}$, $\{\chi_k \in \mathscr{H}_2\}$, sodass man ψ auch folgendermaßen schreiben kann:

$$\psi = \sum_{k=1}^{\min(\dim \mathscr{H}_1, \dim \mathscr{H}_2)} a_k \cdot \varphi_k \otimes \chi_k$$

Dies ist die sogenannte *Schmidt-Zerlegung* (*biorthogonale Zerlegung*). Man sieht leicht, dass für die reduzierten Dichteoperatoren gilt

$$W_1 = \mathrm{tr}_{\mathscr{H}_2}(P_{[\psi]}) = \sum_{k=1}^{\min(\dim \mathscr{H}_1, \dim \mathscr{H}_2)} |a_k|^2 \cdot P_{[\varphi_k]} \in S(\mathscr{H}_1)$$

$$W_2 = \mathrm{tr}_{\mathscr{H}_1}(P_{[\psi]}) = \sum_{k=1}^{\min(\dim \mathscr{H}_1, \dim \mathscr{H}_2)} |a_k|^2 \cdot P_{[\chi_k]} \in S(\mathscr{H}_2)$$

.

Literatur

R. V. Kadison, J. R. Ringrose: Fundamentals of the Theory of Operator Algebras, AMS, 1997

M. Reed, B. Simon: Functional Analysis, Academic Press, 1980

G. Teschl: Mathematical Methods in Quantum Mechanics, AMS, 2009

J. v. Neumann: Mathematische Grundlagen der Quantenmechanik, Springer, 1932

D. Werner: Funktionalanalysis, Springer, 6. Auflage 2007