4. Lineare Operatoren zwischen Hilberträumen

4.1 Beschränkte (= stetige) lineare Operatoren

Beschränkte lineare Operatoren erweisen sich als ungeeignet zur Repräsentation von Observablen - eine heuristische Betrachtung dazu folgt im Laufe dieses Abschnitts. Dennoch spielen sie in der QM eine nicht unerhebliche Rolle, z. B. als Evolutionsoperatoren ("Propagatoren"), Projektoren oder als Inverse bestimmter Differential-operatoren. Darüber hinaus sind manche Begriffsbildungen und Konstruktionen für beschränkte lineare Operatoren deutlich einfacher zu verstehen und lassen sich anschließend verallgemeinern. Insofern ist es sinnvoll, sich zuerst mit stetigen Operatoren zu beschäftigen.

H und G seien Hilberträume. Bereits eingeführt haben wir den Banachraum

$$L(H,G) := \{ A: H \to G : A \text{ ist linear und beschränkt} \},$$

der mit der Operatornorm

$$\| A \| := \sup \{ \| Ax \|_G : x \in H, \ \|x\|_H \leq 1 \}$$

ausgestattet ist. Für $H = G$ setzt man $L(H) := L(H,H)$. In diesem Fall verfügt man zusätzlich zur Vektorraumstruktur über eine Multiplikation

$$(AB)x := A(Bx)$$

(Verknüpfung linearer Abbildungen), bezüglich der die Operatornorm submultiplikativ ist, d.h. es gilt

$$\|AB\| \leq \|A\| \|B\| .$$

Damit wird $(L(H), \| \ \|)$ zu einer _nicht kommutativen Banachalgebra mit_ der identischen Abbildung als _Einselement_. Man kann Potenzreihen von Operatoren definieren, die in der Operatornorm konvergieren. Von Bedeutung sind

$$\exp(A) := \sum_{k=0}^{\infty} \frac{A^k}{k!}$$

und, für $A \in L(H)$ mit $\|A\| < 1$, die Neumannsche Reihe

$$(I-A)^{-1} := \sum_{k=0}^{\infty} A^k .$$

Charakteristische Eigenschaften eines linearen Operators sind sein Spektrum und seine Resolventenmenge, die wir hier zunächst nur für $A \in L(H)$ einführen:

Def.: Für $A \in L(H)$ heißen

$$\rho(A) := \{ z \in \mathbb{C} : \exists \ (zI-A)^{-1} \in L(H) \}$$

die _Resolventenmenge_ von A und

$$R_A : \rho(A) \to L(H), \quad z \mapsto R_A(z) := (zI-A)^{-1}$$

die Resolvente bzw. die _Resolventenabbildung_ von A.

$\sigma(A) := \varrho(A)^c$ heißt das Spektrum und

$$r(A) := \sup\{|z| : z \in \sigma(A)\}$$

der Spektralradius von A.

Der Begriff des Spektrums wird später präzisiert. Ohne Beweis seien hier die folgenden, keineswegs trivialen Eigenschaften angegeben:

Lemma 1: Sei $A \in L(H)$. Dann gelten:

(1) $\varrho(A)$ ist offen und $R_A : \varrho(A) \to L(H)$ stetig.

(2) Für $z, w \in \varrho(A)$ gilt die Resolventengleichung

$$R_A(z) - R_A(w) = (w-z) R_A(z) R_A(w).$$

(3) R_A ist komplex differenzierbar, es gilt $R_A'(z) = -(R_A(z))^{+2}$.

(4) $\sigma(A)$ ist kompakt und nicht leer.

(5) Es gilt die "Spektralradiusformel"

$$r(A) = \lim_{n\to\infty} \|A^n\|^{\frac{1}{n}}.$$

Bem.: (1) Insbes. (5) ist schwierig zu zeigen. Es sei auf die einschlägigen Lehrbücher zur Funktionalanalysis verwiesen, z.B.: Dirk Werner, FA; Reinhold Meise & Dietmar Vogt, Einführung FA.

(2) Ist H endlich-dimensional, so besteht $\sigma(A)$ nur aus Eigenwerten von A. Diese sind reell, wenn A symmetrisch (über $\mathbb{R}$) bzw. hermitesch (über $\mathbb{C}$) ist.

→

Dass sich das beim Übergang zum ∞-dimensionalen wesentlich ändert, zeigt das folgende Bsp. im Formelster

Aufg.: Es sei $m : \mathbb{R} \to \mathbb{C}$ stetig und beschränkt sowie

$$M : L^2(\mathbb{R}) \to L^2(\mathbb{R}), \; f \mapsto Mf, \quad Mf(x) := m(x) f(x)$$

der "Multiplikator" mit der Funktion m. Zeigen Sie:

(a) M ist beschränkt mit $\|M\| = \|m\|_\infty$.

(b) $\sigma(M) = \overline{R(m)}$.

(c) $z \in \sigma(M)$ ist ein Eigenwert genau dann, wenn m auf einem Intervall den Wert z annimmt.

Einige spezielle Klassen beschränkter linearer Operatoren seien kurz diskutiert:

4.1.1 Kompakte Operatoren

Def.: Ein Operator $K \in L(H,G)$ heißt kompakt, wenn für $B := \{x \in H : \|x\| \leq 1\}$ gilt, dass $\overline{K(B)}$ kompakt in G ist. Die Gesamtheit aller kompakten Operatoren in $L(H,G)$ wird mit $K(H,G)$ bezeichnet, im Fall $H = G$ mit $K(H)$.

Bem.: (1) Äquivalente Formulierung: $K \in L(H,G)$ heißt kompakt, wenn für jede beschränkte Folge $(x_n)_n$ in H die Bildfolge $(Kx_n)_n$ eine konvergente Teilfolge enthält.

(2) $K(H,G)$ ist ein abgeschlossener linearer Teilraum von $L(H,G)$.

(3) Genau dann ist $K \in L(H,G)$ kompakt, wenn es eine Folge $(K_n)_n$ in $L(H,G)$ von Operatoren mit endlichdimensionalem Bild gibt, so dass $\lim_{n\to\infty} \|K-K_n\| = 0$ gilt. (Konvergenz in der Operatornorm; eine solche Charakterisierung ist für kompakte Operatoren zwischen Banachräumen nicht zutreffend.)

(4) Ist H ∞-dimensional und $K \in K(H)$, so bilden seine Eigenwerte eine Nullfolge $(\lambda_n)_{n\in\mathbb{N}}$ und es gilt $\sigma(K) = \{\lambda_n : n \in \mathbb{N}\} \cup \{0\}$.

Bsp.: (1) Es seien $H = L^2(\mu)$, $G = L^2(\nu)$ und $k \in L^2(\mu \times \nu)$ sowie

$$Kf(y) := \int k(x,y)\, f(x)\, d\mu(x).$$

Dann ist $K \in K(H,G)$.

Bew.: Die Stetigkeit erhält man aus Cauchy-Schwarz. Für die Kompaktheit approximiere man k durch Treppenfunktionen der Gestalt

$$k_n(x,y) = \sum_{\ell=1}^{n} \alpha_\ell\, \chi_{I_\ell}(x)\, \chi_{J_\ell}(y)$$

und verwende die Bem. (3).

(2) Für eine offene Teilmenge $\Omega \subset \mathbb{R}^n$ sei

$$C_0^\infty(\Omega) := \{ f \in C_0^\infty(\mathbb{R}^n) : \operatorname{supp} f \subset \Omega \}$$

und, für $s \in \mathbb{R}$, $H_0^s(\Omega)$ der Abschluss von $C_0^\infty(\Omega)$ in $H^s(\mathbb{R}^n)$. Dann gilt:

Ist Ω beschränkt und $s>t$, so ist die stetige Einbettung

$$H_0^s(\Omega) \subset H_0^t(\Omega)$$

kompakt („Rellichscher Auswahlsatz", auch „Satz von Rellich-Kondrachov" oder „Sobolevsches Lemma"). – Es gibt verschiedene Beweise dieser Aussage, keiner ist kurz. Entweder man benutzt den Satz von Arzela-Ascoli oder verwendet wieder die Bemerkung (3) oben.

4.1.2 Der adjungierte Operator

Sei $A \in L(H,G)$ und $y \in G$. Dann ist die Abbildung

$$H \ni x \longmapsto \langle Ax, y \rangle_G$$

ein stetiges lineares Funktional auf H. Nach dem Rieszschen Darstellungssatz existiert genau ein $\eta \in H$, so dass $\langle x, \eta \rangle_H = \langle Ax, y \rangle_G$ für alle $x \in H$. Hierdurch ist eine Abbildung

$$A^* : G \to H, \quad y \longmapsto A^* y := \eta$$

in $L(G,H)$ gegeben. Diese wird als die zu A adjungierte lineare Abbildung bezeichnet.

Bem.: Für $A \in L(H,G)$ gelten:

(1) Genau dann ist $A^* = B$, wenn für alle $x \in H$ und $y \in G$ $\langle Ax, y \rangle_G = \langle x, By \rangle_H$.

(2) $A^{**} = A$, $\|A\| = \|A^*\|$ und $\|A^*A\| = \|A\|^2$. (Beweis als ÜA!)

4.1.2.1 Unitäre Operatoren

Def.: $U \in L(H,G)$ heißt <u>unitär</u>, wenn U bijektiv ist und $U^* = U^{-1}$ gilt.

Wegen $\langle Ux, Uy \rangle = \langle U^*Ux, y \rangle = \langle x, y \rangle$ sind unitäre Operatoren winkeltreu und isometrisch. Insofern verallgemeinern sie die Drehspiegelungen auf dem $\mathbb{K}^n$. Weitere Beispiele sind:

(1) Die Fouriertransformation $\mathcal{F} \in L(L^2(\mathbb{R}^n))$ ist unitär (Satz von Plancherel).

(2) Auch die Fouriertransformation

$$\mathcal{F} : L^2(\mathbb{T}^n) \longrightarrow \ell^2(\mathbb{Z}^n),\ f \longmapsto \mathcal{F}f := (\hat{f}(k))_{k \in \mathbb{Z}^n}$$

(periodische Funktionen auf die Folge ihrer Fourierkoeffizienten) ist bei passender Normierung unitär (Parsevalsche Gleichung).

(3) Für jedes $t \in \mathbb{R}$ ist der Propagator von (SG_0)

$$U(t) := \mathcal{F}^{-1} e^{-it|\cdot|^2} \mathcal{F} \in L(L^2(\mathbb{R}^n))$$

ein unitärer Operator.

4.1.2.2 Beschränkte selbstadjungierte Operatoren

Def.: $A \in L(H)$ heißt <u>selbstadjungiert</u>, wenn $A = A^*$ gilt.

<u>Bem.</u>: Nach Bem. (1) zur Definition von A^* ist dies genau dann der Fall, wenn $\langle Ax, y \rangle = \langle x, Ay \rangle$ für alle $x, y \in H$ ist. Die zuletzt genannte Eigenschaft nennt

nach Symmetrie. Für unbeschränkte Operatoren werden wir zwischen "symmetrisch" und "selbstadjungiert" unterscheiden müssen.

Lemma 2: Sei $A \in L(H)$ selbstadjungiert. Dann gelten:

(1) $\langle x, Ax \rangle \in \mathbb{R} \quad \forall x \in H$;

(2) $\| A \| = \sup \{ \langle x, Ax \rangle : x \in H, \|x\| \leq 1 \}$;

(3) $\sigma(A) \subset \mathbb{R}$ und $r(A) = \|A\|$.

(Siehe z.B. Werner/Vogt, Lemmata 11.13, 17.17, 17.19)

Bsp.: (1) Ein Multiplikator $M \in L(L^2(\mu))$ mit einer beschränkten meßbaren Funktion m ist selbstadjungiert genau dann, wenn m reell ist.

(2) Eine Integraltransformation $K \in L(L^2(\mu))$, def. durch $Kf(x) = \int k(x,y) f(y) \, d\mu(y)$, ist selbstadjungiert genau dann, wenn $k(x,y) = \overline{k(y,x)}$ ist.

(3) Ein Projektor $P \in L(H)$ ist selbstadjungiert genau dann, wenn P orthogonal ist.

(4) Ist $A \in L(H)$ und $t \in \mathbb{R}$, so konvergiert die Reihe
$$\sum_{n=0}^{\infty} \frac{(it)^n}{n!} A^n =: U_A(t) \in L(H)$$
in der Operatornorm.

Wenn dabei A selbstadjungiert ist, ist $U_A(t)$ unitär.

(Die Lösung des Cauchy-Problems für (SG_V) wäre also ein Kinderspiel, wenn der Hamilton-Operator beschränkt wäre. Was leider nicht der Fall ist!)

4.1.3 Heuristische Betrachtung

Die Heisenbergsche Unschärferelation (H1)

$$\|(A-\langle\psi,A\psi\rangle)\psi\|\,\|(B-\langle\psi,B\psi\rangle)\psi\| \geq \frac{\hbar}{2} \quad \forall\, \psi\in D\subset H,\ \|\psi\|=1$$

wird häufig in Verbindung gebracht mit der Kommutatorbeziehung

$$[A,B]=i\hbar I \qquad (H2)$$

zwischen bestimmten symmetrischen linearen Operatoren A und B. In der Tat, wenn (H2) gilt, hat man für $\|\psi\|=1$

$$\hbar=\hbar\langle\psi,\psi\rangle=|\langle\psi,[A,B]\psi\rangle| \leq |\langle\psi,AB\psi\rangle|+|\langle\psi,BA\psi\rangle|$$

$$\overset{\text{symm.}}{\leq} |\langle A\psi,B\psi\rangle|+|\langle B\psi,A\psi\rangle| \overset{\text{C.S.}}{\leq} 2\,\|A\psi\|\,\|B\psi\|.$$

Wegen $[A-\langle\psi,A\psi\rangle I,\ B-\langle\psi,B\psi\rangle I]=[A,B]$ kann man hierin auf der rechten Seite A durch $A-\langle\psi,A\psi\rangle I$ und B durch $B-\langle\psi,B\psi\rangle I$ ersetzen. Das zeigt die Implikation

$$(H2) \Longrightarrow (H1).$$

(Die andere Richtung weiß ich allerdings nicht zu begründen.) Die Heuristik dafür, dass beschränkte Operatoren ungeeignet sind zur Repräsentation physikalischer Observablen, besteht in der folgenden

<u>Beobachtung:</u> (H2) gilt <u>nicht</u> für $A,B\in L(H)$

Bew.: Nehmen wir $[A,B]=I$ an, so folgt für $n\in\mathbb{N}$

$$[A^n,B] = \sum_{k=0}^{n-1} A^{n-1-k}[A,B]A^k = n\cdot A^{n-1} \rightsquigarrow \|[A^n,B]\| = n\|A^{n-1}\|.$$

Andererseits ist

$$\|[A^n,B]\| \leq 2\|A^{n-1}\|\,\|A\|\,\|B\|,$$

also $n \leq 2\|A\|\,\|B\|$ $\forall n\in\mathbb{N}$. Widerspruch. $\square$

4.2 Unbeschränkte Operatoren

Wir betrachten lineare Operatoren

$$A : H \supset D_A \to G$$

zwischen Hilberträumen H und G, wobei der Definitionsbereich D_A ein linearer Teilraum (= Untervektorraum) von H ist.

<u>Def.</u>: Ein linearer Operator $A : H \supset D_A \to G$ heißt

(1) <u>dicht definiert</u>, wenn D_A in H dicht ist;

(2) <u>beschränkt</u>, wenn $\sup\{\|Ax\|_G : x \in D_A \wedge \|x\|_H \leq 1\} < \infty$ ist, andernfalls <u>unbeschränkt</u>.

<u>Bem.</u>: Ist A dicht definiert und beschränkt, so ist A wegen der Linearität gleichmäßig stetig und erlaubt eine eindeutig bestimmte Fortsetzung (= Erweiterung) $\tilde{A} \in L(H,G)$. (Wir sind dann also in der Situation von 4.1.)

Begründung: Zu $x \in H$ gibt es eine Folge $(x_n)_n$ in D_A mit $x = \lim_{n\to\infty} x_n$ in H. Wegen der Beschränktheit von A ist $(Ax_n)_n$ eine Cauchy-Folge in G. Da G vollständig ist, existiert $\tilde{A}x := \lim_{n\to\infty} Ax_n$. ☒

Sind H und G Hilberträume, so versehen wir das kartesische Produkt $H \times G$ mit dem Skalarprodukt

$$\langle (x,y),(u,v)\rangle_{H\times G} := \langle x,u\rangle_H + \langle y,v\rangle_G .$$

Dann ist auch $(H \times G, \langle\ ,\ \rangle_{H\times G})$ ein Hilbertraum. Die auf diese Weise induzierte Norm ist

$$\|(x,y)\|_{H\times G} = \left(\|x\|_H^2 + \|y\|_G^2\right)^{\frac{1}{2}}.$$

Def.: Ein linearer Operator $A : H \supset D_A \to G$ heißt

(1) abgeschlossen, wenn sein Graph

$$G_A := \{(x, Ax) \in H \times G : x \in D_A\}$$

in $H \times G$ abgeschlossen ist;

(2) abschließbar, wenn der Abschluß $\overline{G_A}$ von G_A in $H \times G$ der Graph eines linearen Operators $\bar{A} : H \supset D_{\bar{A}} \to G$ ist. In diesem Fall (ist $\bar{A}$ eindeutig bestimmt) und heißt die Abschließung von A.

Bem.: (1) Folgenkriterium für Abgeschlossenheit:
$A : H \supset D_A \to G$ ist abgeschlossen g.d.w. für alle Folgen $(x_n)_n$ in D_A, für die die Grenzwerte

$$x := H\text{-}\lim_{n\to\infty} x_n \qquad \text{und} \qquad y := G\text{-}\lim_{n\to\infty} Ax_n$$

existieren, gilt, dass $x \in D_A$ und $y = Ax$.

Begründung: Die angegebene Bedingung bedeutet gerade, dass für jede Folge $((x_n, Ax_n))_n$ in G_A, die in $H \times G$ gegen ein $(x,y) \in H \times G$ konvergiert, gilt, dass der Grenzwert $(x,y) \in G_A$ ist. Das ist die Abgeschlossenheit von G_A in $H \times G$.

(2) Ist $A \in L(H,G)$, so ist A auch abgeschlossen, wie sich aus (1) ergibt. Die Umkehrung gilt auch: Ist $A: H \to G$ abgeschlossen, so ist A stetig. Dieser "Satz vom abgeschlossenen Graphen" ist eine der fundamentalen Erkenntnisse der linearen Funktionalanalysis und gilt allgemeiner für Operatoren zwischen vollständigen metrischen Vektorräumen. Die für uns relevanten abgeschlossenen unbeschränkten Operatoren können also <u>nicht überall</u> definiert sein!

(3) Eine weitere Charakterisierung der Abgeschlossenheit kann mit Hilfe der sogenannten "Graphennorm"

$$\|x\|_{D_A}^2 = \|x\|_H^2 + \|Ax\|_G^2$$

auf D_A angegeben werden: Genau dann ist $A: H \supset D_A \to G$ abgeschlossen, wenn $(D_A, \|\ \|_{D_A})$ vollständig ist. (Beweis als Übungsaufgabe.)

(4) Ist A abschließbar, so ist $\bar{A}$ abgeschlossen und $A \subset \bar{A}$ (d.h. $D_A \subset D_{\bar{A}}$ und $\bar{A}|_{D_A} = A$). $A \subset B$ impliziert $\bar{A} \subset \bar{B}$.

(5) A ist abschließbar genau dann, wenn A eine abgeschlossene Erweiterung $\tilde{A}$ besitzt.

(6) Folgenkriterium für Abschließbarkeit: $A: H \supset D_A \to G$ ist genau dann abschließbar, wenn für jede

Nullfolge $(x_n)_n$ in D_A, für die $y := G\text{-}\lim_{n\to\infty} Ax_n$ existiert, gilt, dass $y = 0$ ist. (13)

(7) Eine abgeschlossene Erweiterung $\tilde{A}$ von A ist $= \bar{A}$, wenn D_A in $(D_{\tilde{A}}, \| \ \|_{D_{\tilde{A}}})$ dicht liegt.

(4)–(7) scheinen plausibel, teilweise sogar unmittelbar einleuchtend. Für Beweise sei auf Meise-Vogt, § 19, verwiesen.

Jetzt schränken wir die Betrachtung ein auf lineare Operatoren $A : H \supset D_A \to H$, für die Definitions- und Wertebereich in demselben Hilbertraum H liegen. Hierfür werden die Begriffe "Resolvente", "Resolventenmenge" und "Spektrum" eingeführt:

Def.: Sei $A : H \supset D_A \to H$ ein dicht definierter linearer Operator. Dann heißen

(1) $\rho(A) := \{\lambda \in \mathbb{C} : \lambda I - A : D_A \to H$ ist bijektiv und $(\lambda I - A)^{-1} \in L(H)\}$ die <u>Resolventenmenge</u>,

(2) $R_A : \rho(A) \to L(H)$, $\lambda \mapsto R_A(\lambda) := (\lambda I - A)^{-1}$ die <u>Resolvente</u> (oder <u>Resolventenabbildung</u>),

(3) $\sigma(A) := \mathbb{C} \setminus \rho(A)$ das <u>Spektrum</u>

von A. Man unterscheidet die folgenden Teilmengen des Spektrums:

(3.1) $\sigma_p(A) := \{\lambda \in \sigma(A) : \lambda I - A$ ist nicht injektiv$\}$

$= \{$Eigenwerte von $A\}$, das Punktspektrum,

(3.2) $\sigma_c(A) := \{\lambda \in \sigma(A) : \lambda I - A$ ist injektiv, nicht surjektiv, mit dichtem Bild$\}$, das Stetigkeitsspektrum, und

(3.3) $\sigma_r(A) := \{\lambda \in \sigma(A) : \lambda I - A$ ist injektiv und hat kein dichtes Bild$\}$, das Restspektrum von A.

Bem.: (1) Sei $A : H \supset D_A \to H$ dicht definiert und $\lambda \in \varrho(A)$. Dann ist p.d. $(\lambda I - A)^{-1} : H \to H$ stetig, aber auch

$$(\lambda I - A)^{-1} : H \to (D_A, \| \; \|_{D_A})$$

ist stetig, denn

$$\|(\lambda I - A)^{-1} y\|_{D_A}^2 = \|(\lambda I - A)^{-1} y\|_H^2 + \|A(\lambda I - A)^{-1} y\|_H^2$$

$A = A - \lambda I + \lambda I \quad \leq (C_\lambda^2 + |\lambda|^2 C_\lambda^2 + 1)\, \|y\|_H^2 .$

Also ist für $\lambda \in \varrho(A)$ $(\lambda I - A) : (D_A, \| \; \|_{D_A}) \to H$ ein Isomorphismus von Hilberträumen, insbesondere $(D_A, \| \; \|_{D_A})$ vollständig und folglich A abgeschlossen.

Anders ausgedrückt: Für nicht abgeschlossene Operatoren ist $\varrho(A) = \emptyset$ bzw. $\sigma(A) = \mathbb{C}$, und Untersuchungen des Spektrums machen wenig Sinn.

(2) Theoretisch besteht für $\lambda \in \mathbb{C}$ noch die Möglichkeit:

$\lambda I - A : D_A \to H$ ist bijektiv, aber $(\lambda I - A)^{-1} \notin L(H)$.

Für abgeschlossene Operatoren wird dies jedoch aus-
geschlossen durch den Banachschen Isomorphiesatz, nach dem jede stetige lineare Bijektion zwischen B-Räumen eine stetige Inverse besitzt. (S. z. B. Meise-Vogt, Satz 8.6.) Insofern haben wir

$$\sigma(A) = \sigma_p(A) \cup \sigma_c(A) \cup \sigma_r(A)$$

mit disjunkten Vereinigungen.

Ähnlich wie in 4.1 gilt für Resolvente und Spektrum:

<u>Satz 1</u>: Sei $A : H \supset D_A \to H$ linear, dicht definiert und abgeschlossen. Dann ist $\varrho(A)$ offen und die Resolventenabbildung

$$R_A : \varrho(A) \to L(H), \ \lambda \mapsto R_A(\lambda) = (\lambda I - A)^{-1}$$

um jeden Punkt $\lambda_0 \in \varrho(A)$ in eine Potenzreihe mit Koeffizienten in $L(H)$ entwickelbar und damit holomorph. Für $\lambda, \mu \in \varrho(A)$ gelten die Resolventengleichung

$$R_A(\lambda) - R_A(\mu) = (\mu - \lambda) R_A(\lambda) R_A(\mu)$$

und $R_A'(\lambda) = -R_A(\lambda)^2$. $\sigma(A)$ ist abgeschlossen.