3 Operatorer på Hilbert rum

3.1 Eksempler på operatorer på Hilbert rum

Vi vil i det følgende benytte betegnelsen *lineær operator* (eller blot operator) synonymt med lineær afbildning, specielt når der er tale om lineære afbildninger mellem uendeligdimensionale vektorrum, som har vores hovedinteresse i disse noter. En lineær operator fra et Hilbert rum H_1 til et andet H_2 er således en afbildning A, der opfylder

$$A(v + w) = Av + Aw \quad \text{og} \quad A(\lambda v) = \lambda(Av) \tag{3.1}$$

for alle v, w i definitionsmængden $D(A) \subseteq H_1$ og alle skalarer λ. Ækvivalent hermed er, at A bevarer linearkombinationer, dvs. for $v_1, \ldots, v_n$ i $D(A)$ og skalarer $\lambda_1, \ldots, \lambda_n$ gælder

$$A(\lambda_1 v_1 + \cdots + \lambda_n v_n) = \lambda_1 A v_1 + \cdots + \lambda_n A v_n \,, \tag{3.2}$$

jvf. Opgave 3.1. Vi har her brugt betegnelsen Ax i stedet for $A(x)$, som det er sædvane for operatorer. Når vi har indført en særlig betegnelse for definitionsmængden $D(A)$, også kaldet *domænet* for A, skyldes det, at en række af de operatorer, der er af størst relevans for fysik, ikke kan defineres på hele Hilbert rummet H_1, men kun på et passende "stort" underrum $D(A)$. Med "stort" mener vi her mere præcist, at

$$D(A)^\perp = \{\underline{0}\} \,, \tag{3.3}$$

altså at der ikke er andre vektorer end nulvektoren, der står vinkelret på alle vektorer i $D(A)$. Lad os se på nogle centrale eksempler.

Eksempel 3.1. a) *Differentiation.* Det er velkendt, at differentiation er en lineær operation, dvs. $(f + g)' = f' + g'$ og $(\lambda f)' = \lambda f'$, hvor f og g er differentiable funktioner på et interval $[a, b]$. Derfor er afbildningen

$$\frac{d}{dx} : f \to f'$$

en lineær operator fra $L_2([a, b])$ til $L_2([a, b])$, som dog ikke er defineret på hele $L_2([a, b])$. Valget af definitionsmængde er langt fra entydigt. Et muligt valg, og måske det umiddelbart mest nærliggende, er underrummet $C^1([a, b])$ bestående af de kontinuert differentiable funktioner. En anden mulighed er underrummet bestående af stykkevis glatte funktioner. Men der findes andre og, viser det sig, mere relevante domæner.

Til illustration ser vi på tilfældet $[a, b] = [-\pi, \pi]$, hvor vi har ortonormalbasen (1.26), hvis n'te vektor er funktionen

$$e_n(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{\mathrm{i}nx}, \qquad n \in \mathbb{Z}. \tag{3.4}$$

Disse funktioner er vilkårligt ofte differentiable, og

$$e'_n(x) = \frac{\mathrm{i}n}{\sqrt{2\pi}} e^{\mathrm{i}nx} = \mathrm{i}n e_n(x). \tag{3.5}$$

For en (endelig) linearkombination $\lambda_{-m}e_{-m} + \cdots + \lambda_n e_n$ af vektorerne fra ortonormalbasen har vi

$$\frac{d}{dx}(\lambda_{-m}e_{-m} + \cdots + \lambda_n e_n) = -\mathrm{i}m\lambda_{-m}e_m + \cdots + \mathrm{i}n\lambda_n e_n. \tag{3.6}$$

Hermed er $\frac{d}{dx}$ defineret på $\operatorname{span}\{e_n \mid n \in \mathbb{Z}\}$.

Da enhver funktion f i $L_2([-\pi, \pi])$ har en ortonormaludvikling $f = \sum_{n\in\mathbb{Z}} \lambda_n e_n$, hvor $\lambda_n = \langle e_n, f\rangle$, er det naturligt at spørge, om (3.6) kan udvides til også at gælde for "uendelige linearkombinationer", dvs. for ortonormaludviklinger, således at $\frac{d}{dx}$ defineres ved

$$\frac{d}{dx}\left(\sum_{n\in\mathbb{Z}} \lambda_n e_n\right) = \sum_{n\in\mathbb{Z}} \mathrm{i}n\lambda_n e_n. \tag{3.7}$$

For at denne definition skal give mening kræves, at højresiden af (3.7) er konvergent i $L_2([-\pi, \pi])$, og ifølge Lemma 2.3 er dette tilfældet netop, hvis

$$\sum_{n\in\mathbb{Z}} |n\,\lambda_n|^2 < \infty.$$

Men dette er ikke sandt for alle funktioner i $L_2([-\pi, \pi])$. Tag f.eks. funktionen f givet ved

$$f = \sum_{n\in\mathbb{Z}\setminus\{0\}} \frac{1}{n} e_n,$$

hvor rækken er konvergent, da $\sum_{n\in\mathbb{Z}\setminus\{0\}} \frac{1}{n^2} < \infty$. For denne funktion bliver højresiden af (3.7) lig med rækken $\sum_{n\in\mathbb{Z}\setminus\{0\}} i\, e_n$, som er divergent, da $\sum_{n\in\mathbb{Z}\setminus\{0\}} 1$ er divergent. Vi slutter derfor, at vi ikke ved (3.7) kan udvide operatoren $\frac{d}{dx}$ til hele $L_2([-\pi, \pi])$, men kun til domænet

$$D\left(\frac{d}{dx}\right) = \left\{\sum_{n\in\mathbb{Z}} \lambda_n e_n \mid \sum_{n\in\mathbb{Z}} |n\,\lambda_n|^2 < \infty\right\} \tag{3.8}$$

ved formlen (3.7). Dette er, som det ses, det maksimale underrum, hvorpå $\frac{d}{dx}$ kan defineres ved (3.7), og det kan vises, at det indeholder alle kontinuert differentiable funktioner f, for hvilke $f(\pi) = f(-\pi)$, jvf. Opgave 3.2. På den anden side indeholder $D(\frac{d}{dx})$ ikke hele $C^1([-\pi, \pi])$, da alle funktioner f i $D(\frac{d}{dx})$ ses at opfylde $f(-\pi) = f(\pi)$, mens der naturligvis findes funktioner i $C^1([-\pi, \pi])$, som ikke opfylder denne randbetingelse.

Det viser sig, at fysiske problemstillinger tit foreskriver det relevante domæne for en lineær operator i form af randbetingelser kombineret med krav om at operatoren skal være selvadjungeret, et centralt begreb vi skal definere i næste afsnit. I nærværende eksempel kunne vi således have lagt ud med at betragte operatoren $i\frac{d}{dx}$ på underrummet af alle C^1-funktioner f på $[-\pi, \pi]$, for hvilke $f(\pi) = f(-\pi)$. Der findes da en entydig selvadjungeret udvidelse af denne til et større domæne, nemlig $D(\frac{d}{dx})$ givet ved (3.8). Uden randbetingelse findes der ikke nogen selvadjungeret udvidelse. Noget tilsvarende gør sig gældende for mere generelle differentialoperatorer, der indføres i d) nedenfor, og diskuteres yderligere i Eksempel 3.5 d-e) og i Eksemplerne 3.17-18.

b) *Diagonaliserbare operatorer.* Det foregående eksempel er et specialtilfælde af følgende mere generelle situation. Antag, at H er et Hilbert rum, og at $(e_1, e_2, \dots)$ er en ortonormalbasis for H. Lad endvidere $(a_1, a_2, \dots)$ være en følge af skalarer. Vi kan da definere en lineær operator$A$ ved fastsættelsen

$$A\, e_n = a_n e_n\,, \qquad n \in \mathbb{N}\,, \tag{3.9}$$

og dermed ifølge (3.2)

$$A(\lambda_1 e_1 + \cdots + \lambda_n e_n) = \lambda_1 a_1 e_1 + \cdots + \lambda_n a_n e_n\,. \tag{3.10}$$

Herved er A defineret på $\operatorname{span}\{e_1, e_2, \dots\}$. Vi kan endda udvide definitionen til domænet

$$D(A) = \{v \in H \mid \sum_{n=1}^{\infty} |a_n\langle e_n, v\rangle|^2 < \infty\} \tag{3.11}$$

ved at udvide (3.10) til

$$Av = A\left(\sum_{n=1}^{\infty} \langle e_n, v\rangle e_n\right) = \sum_{n=1}^{\infty} a_n\langle e_n, v\rangle e_n\,, \tag{3.12}$$

idet den sidste række i (3.12) er konvergent netop når $v \in D(A)$. Det er ikke svært at indse, at $D(A)$ er et underrum af H, som opfylder (3.3), jvf. Opgave 3.3.

Det er værd at bemærke, at hvis $(a_1, a_2, \dots)$ er en *begrænset* talfølge, dvs. hvis der findes et $C \geq 0$ så

$$|a_n| \leq C \text{ for alle } n = 1, 2, 3, \dots\,,$$

da er

$$\|Av\| \leq C\|v\| \tag{3.13}$$

for alle $v \in H$ (jvf. Opgave 3.3). Speciels er da $D(A) = H$, således at A i dette tilfælde er defineret på hele H. Bemærk også, at hvis $a_n = 1$ for alle n, da er A lig med *identitetsoperatoren* I_H på H, idet (3.12) giver

$$Av = \sum_{n=1}^{\infty} \langle e_n, v \rangle e_n = v = I_H v \quad \text{for alle } v \in H\,.$$

Operatorer af formen (3.12) kaldes diagonaliserbare (se også Definition 3.12). Nærmere begrundelse for denne betegnelse gives i Afsnit 3.3.

c) *Multiplikationsoperatorer på* $\ell_2(\mathbb{N})$. Hvis vi i det foregående eksempel benytter $H = \ell_2(\mathbb{N})$ med den naturlige ortonormalbasis $(\varepsilon_1, \varepsilon_2, \dots)$ antager (3.12) formen

$$A(x_1, x_2, \dots) = (a_1 x_1, a_2 x_2, \dots) \tag{3.14}$$

(overvej dette!) og domænet $D(A)$ bliver

$$D(A) = \left\{ (x_1, x_2, \dots) \;\Big|\; \sum_{n=1}^{\infty} |a_n x_n|^2 < \infty \right\}. \tag{3.15}$$

Vi kalder i dette tilfælde A for multiplikationsoperatoren svarende til følgen $(a_1, a_2, \dots)$ og betegner den med $M_{(a_1, a_2, \dots)}$.

d) *Multiplikationsoperatorer på* $L_2(I)$. Lad f være en (f.eks. kontinuert) funktion på intervallet I. Multiplikationsoperatoren M_f på $L_2(I)$ hørende til funktionen f er da givet ved

$$M_f g = f \cdot g\,, \tag{3.16}$$

hvor vi må sikre os, at højresiden tilhører $L_2(I)$, dvs. domænet for M_f er

$$D(M_f) = \{ g \in L_2(I) \mid \int_I |f(x)g(x)|^2 dx < \infty \}\,. \tag{3.17}$$

Igen bemærkes det (jvf. Opgave 3.4), at $D(M_f)$ er et underrum af $L_2(I)$, og at hvis f er begrænset, dvs. hvis der findes $C \geq 0$ så

$$|f(x)| \leq C \text{ for alle } x \in I\,,$$

da er

$$\|M_f g\| \leq C\|g\|\,, \tag{3.18}$$

for alle $g \in L_2(I)$. Specielt er da $D(M_f) = L_2(I)$.

I tilfældet $I = \mathbb{R}$ og $f(x) = x$, kaldes $M_f = M_x$ for *stedoperatoren* for en kvantemekanisk partikel i det endimensionale rum $\mathbb{R}$, idet middelværdien af dens stedkoordinat x i tilstanden ψ er givet ved

$$\langle \psi, M_x \psi \rangle = \int_I x|\psi(x)|^2 dx \,.$$

e) *Differentialoperatorer.* Ved sammensætning af differentiation og multiplikationsoperatorer på $L_2([a,b])$ fås mere generelle såkaldte differentialoperatorer. Vi nøjes på dette sted med at nævne anden ordens operatoren

$$B = r(x)\frac{d^2}{dx^2} + s(x)\frac{d}{dx} + t(x)\,,$$

hvor r, s, t er kontinuerte funktioner på $[a,b]$. Denne operator afbilder altså en to gange kontinuert differentiabel funktion f i funktionen

$$Bf = rf'' + sf' + tf\,.$$

Vi er allerede stødt på operatorer af denne slags, f.eks. i forbindelse med Sturm-Liouville teorien i Afsnit 4.7 i AEM, og vender tilbage hertil i Eksempel 3.5 e) og Eksempel 3.17 nedenfor.

f) *Integraloperatorer.* Modstykket til en differentialoperator er en integraloperator. En sådan er givet ved en såkaldt *integralkerne* $k(x,y)$, som er en kontinuert funktion af to variable $x, y \in [a,b]$. Den tilsvarende integraloperator K på $L_2([a,b])$ er da defineret ved

$$(Kf)(x) = \int_a^b k(x,y)f(y)dy\,. \tag{3.19}$$

Den er defineret på hele $L_2([a,b])$, idet vi kan indse at højresiden tilhører $L_2([a,b])$ for alle $f \in L_2([a,b])$ på følgende vis. For fastholdt $x \in [a,b]$ kan højresiden af (3.19) opfattes som det indre produkt af funktionerne $y \to \overline{k}(x,y)$ og f. Cauchy-Schwarz giver derfor

$$\Big|\int_a^b k(x,y)f(y)dy\Big|^2 \leq \int_a^b |k(x,y)|^2 dy \int_a^b |f(y)|^2 dy\,,$$

som også kan skrives

$$|(Kf)(x)|^2 \leq \int_a^b |k(x,y)|^2 dy \cdot \|f\|^2\,.$$

Integreres m.h.t. x fås heraf

$$\|Kf\|^2 \leq \int_a^b \int_a^b |k(x,y)|^2 dydx \cdot \|f\|^2 < \infty\,, \tag{3.20}$$

da dobbeltintegralet

$$\int_a^b \int_a^b |k(x,y)|^2 dydx \tag{3.21}$$

er endeligt (og lig med volumenet under grafen for $|k(x,y)|^2$), da k er kontinuert på kvadratet $[a,b]\times[a,b]$. Dette viser, at $Kf \in L_2([a,b])$ for $f \in L_2([a,b])$, og altså at K er defineret på hele $L_2([a,b])$.

Ovenstående kan åbenbart udvides til et vilkårligt (begrænset eller ubegrænset) interval I, hvis blot

$$\int_I \int_I |k(x,y)|^2 dydx < \infty\,.$$

Et konkret eksempel på en integraloperator så vi i forbindelse med varmeledningsligningen for en uendelig lang stang, jvf. Afsnit 11.6 i AEM. Vi fandt der, at løsningen $u(x,t)$ til varmeledningsligningen er givet ved

$$u(x,t) = \frac{1}{\sqrt{4\pi t}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{(x-y)^2}{4t}} f(y)dy$$

for $t > 0$, hvor f angiver begyndelsestemperaturfordelingen. Dvs. vi har, at

$$u(x,t) = (K_t f)(x)\;,$$

hvor K_t er integraloperatoren på $L_2(\mathbb{R})$, hvis kerne er lig med *varmekernen*

$$k_t(x,y) = \frac{1}{\sqrt{4\pi t}} e^{-\frac{(x-y)^2}{4t}}\;.$$

Begrænsede operatorer. I (3.20) ovenfor fandt vi for integraloperatoren K, at

$$\|Kf\| \leq C\|f\|\,, \quad f \in L_2([a,b])\,,$$

hvor konstanten C var givet ved kvadratroden af integralet (3.21). Tilsvarende uligheder fandt vi i (3.13) og (3.18) for multiplikationsoperatorer svarende til begrænsede talfølger eller funktioner. Operatorer, der tilfredsstiller uligheder af denne slags kaldes *begrænsede operatorer.*

Definition 3.2. En lineær operator A fra et Hilbert rum H_1 til et andet H_2 er begrænset, hvis dens domæne er hele H_1, og der findes en konstant $C \geq 0$, så

$$\|Av\| \leq C\|v\| \text{ for alle } v \in H_1\,. \tag{3.22}$$

Den mindste konstant C, der opfylder (3.22) kaldes *normen af* A og betegnes $\|A\|$. (Vi har her benyttet samme betegnelse $\|\cdot\|$ for normerne på H_1 og H_2.)

At A er begrænset er p.gr.a. lineariteten ækvivalent med at A er *kontinuert*, dvs. at der gælder

$$A(\lim_{n\to\infty} v_n) = \lim_{n\to\infty} Av_n \tag{3.23}$$

for enhver konvergent følge $(v_1, v_2, \dots)$ i H_1. Antag nemlig, at $v_n \to v$ for $n \to \infty$, og at (3.22) gælder (hvor vi kan antage $C > 0$). For givet $\varepsilon > 0$ findes da $N \in \mathbb{N}$, således at $\|v_n - v\| < \frac{\varepsilon}{C}$ for $n > N$, og derfor

$$\|Av_n - Av\| = \|A(v_n - v)\| \leq C\|v_n - v\| \leq C \cdot \frac{\varepsilon}{C} = \varepsilon$$

for $n > N$. Dette viser, at $Av_n \to Av$ for $n \to \infty$, altså at (3.23) holder. Det omvendte, altså at (3.23) medfører (3.22), bedes du om at eftervise i Opgave 3.6.

Generelt er begrænsede lineære operatorer lettere at arbejde med end *ubegrænsede operatorer* (dvs. operatorer, der ikke opfylder kravet i Definition 3.2). Mange af de operatorer, der har interesse i fysik eller i andre sammenhænge er da også begrænsede. En vigtig undtagelse herfra er imidlertid differentialoperatorerne. F.eks. har vi med betegnelser som i Eksempel 3.1 a) ovenfor, at

$$\left\|\frac{d}{dx}e_n\right\| = \|\mathrm{i}ne_n\| = |n|\|e_n\|$$

for alle $n \in \mathbb{N}$, hvilket klart viser, at operatoren $\frac{d}{dx}$ ikke opfylder (3.22) for nogen konstant C (og i øvrigt heller ikke er defineret på hele $L_2([a,b])$). I mange tilfælde har, som vi også skal se, en differentialoperator en invers afbildning, som er en begrænset operator, f.eks. en integraloperator som vi skal se i Eksempel 3.19 nedenfor, se også Opgave 3.7. Man kan derfor tit anvende resultater vedrørende begrænsede operatorer til at analysere eksempelvis differentialoperatorer. Vi vil derfor i det følgende ofte begrænse os til at formulere generelle resultater for begrænsede operatorer alene.

Endelig bemærkes, at lineære operatorer defineret på endeligdimensionale Hilbert rum automatisk er begrænsede, jvf. Opgave 3.8. Som følge heraf forekommer f. eks. problemstillinger vedrørende kontinuitet og domæner for operatorer kun i det uendeligdimensionale tilfælde.

3.2 Selvadjungerede og unitære operatorer

De vigtigste klasser af lineære operatorer, der er brug for i de fysiske fag, er de *selvadjungerede*, også kaldt *Hermiteske*, operatorer og de *unitære* operatorer. For at kunne definere disse er det nødvendigt først at indføre begrebet *adjungeret operator*.

Adjungeret operator. Lad først $A : H_1 \to H_2$ være en lineær operator mellem endeligdimensionale Hilbert rum og lad $(e_1, \ldots, e_n)$ og $(f_1, \ldots, f_m)$ være ortonormalbaser for henholdsvis H_1 og H_2. Med hensyn til disse repræsenteres A af en $m \times n$-matrix $\underline{\underline{A}}$, hvis matrixelementer a_{ij} er givet ved (se Afsnit 6.3 i LA)

$$a_{ij} = \langle f_i, Ae_j \rangle \tag{3.24}$$

for $i = 1, \ldots, m$, $j = 1, \ldots, n$. Den adjungerede operator til A kan da defineres som operatoren $A^* : H_2 \to H_1$, som m.h.t. baserne $(f_1, \ldots, f_m)$ og $(e_1, \ldots, e_n)$ repræsenteres af den transponerede og kompleks konjungerede matrix $\underline{\underline{A}}^*$, også kaldet den *Hermitesk konjungerede* matrix til $\underline{\underline{A}}$. $\underline{\underline{A}}^*$ er altså en $n \times m$-matrix, hvis matrixelementer a^*_{ji} er givet ved

$$a^*_{ji} = \overline{a_{ij}} \tag{3.25}$$

for $i = 1, \ldots, m$, $j = 1, \ldots, n$. Da $a^*_{ji} = \langle e_j, A^* f_i \rangle$, er (3.24) ensbetydende med

$$\langle f_i, Ae_j \rangle = \overline{\langle e_j, A^* f_i \rangle} = \langle A^* f_i, e_j \rangle .$$

For to vektorer $v = \lambda_1 e_1 + \cdots + \lambda_n e_n \in H_1$ og $w = \mu_1 f_1 + \cdots + \mu_m f_m \in H_2$ giver dette ved direkte udregning (jvf. Opgave 3.11), at

$$\langle w, Av \rangle = \langle A^* w, v \rangle . \tag{3.26}$$

(Bemærk, at det indre produkt på venstresiden refererer til H_2, mens det på højresiden henviser til H_1, men vi bruger som sædvanlig samme betegnelse for de to indre produkter.) Det følger af (3.26), at operatoren A^* er uafhængig af valget af de to ortonormalbaser (Overvej dette!). I det generelle tilfælde, hvor H_1 og/eller H_2 er uendeligdimensionalt, er det mest bekvemt at tage ligningen (3.26) som udgangspunkt for definitionen af A^*. Dette gøres i følgende sætning.

Sætning 3.3. *For enhver begrænset lineær operator $A : H_1 \to H_2$ findes en entydig operator A^*, som opfylder (3.26) for alle $v \in H_1$, og $w \in H_2$. A^* kaldes den adjungerede operator til A. Den er begrænset og*

$$\|A^*\| = \|A\| .$$

At A^* er entydig følger let: Hvis nemlig A^* og $A^\dagger$ begge opfylder (3.26) må der gælde, at $\langle (A^* - A^\dagger)w, v\rangle = 0$ for alle $v \in H_1$ og $w \in H_2$. Altså må $(A^* - A^\dagger)w \in H_1^\perp = \{\underline{0}\}$ og dermed $A^*w = A^\dagger w$, for alle $w \in H_2$. Dette betyder jo at $A^* = A^\dagger$.

At A^* overhovedet findes skyldes et faktum, som bruges overalt i kvantemekanik, og som kan forklares som følger. For en given vektor $u \in H_1$, er afbildningen $\ell_u : v \to \langle u, v\rangle$ som bekendt lineær fra H_1 til $\mathbb{C}$ og desuden begrænset som følge af Cauchy-Schwarz

$$|\ell_n(v)| \leq \|u\| \, \|v\| \, .$$

Begrænsede lineære afbildninger fra H_1 til $\mathbb{C}$ kaldes *linearformer* på H_1 og mængden af disse kaldes det *duale rum* til H_1. Ovennævnte faktum går så ud på, at *enhver linearform på H_1 er af formen ℓ_u for en entydig vektor* $u \in H_1$. Dette resultat er ikke overmåde svært at vise, men vi springer argumentet over her. Har man først dette resultat, følger eksistensen af A^*w ved at bemærke, at venstresiden af (3.26) for fastholdt $w \in H_2$ er, som funktion af v, en begrænset linearform på H_1, nemlig lig med sammensætningen $\ell_w \circ A$, som er lineær og begrænset i følge Opgave 3.6. Derfor findes en entydig vektor i H_1, som vi kalder A^*w, så (3.26) er opfyldt. Hermed er A^* defineret på H_2. I Opgave 3.12 skal det vises, at A^* er lineær og begrænset og at $\|A\| = \|A^*\|$.

For to begrænsede lineære operatorer A og B fra H_1 til H_2 og $\lambda \in C$ gælder, at

$$(\lambda A)^* = \overline{\lambda} A^* \quad \text{og} \quad (A + B)^* = A^* + B^* \, .$$

Hvis endvidere C er en begrænset lineær operator fra H_2 til H_3, er

$$(CA)^* = A^* C^* \, ,$$

hvor vi, som det er sædvane for lineære operatorer, benytter betegnelsen CA i stedet for $C \circ A$. De to første relationer overlades til læseren at verificere. Den sidste ses af at

$$\langle v, CAw\rangle = \langle C^*v, Aw\rangle = \langle A^*C^*v, w\rangle$$

for alle $v \in H_3$ og alle $w \in H_1$.

Man kan også definere adjungerede til ubegrænsede lineære operatorer, men vi undlader at behandle det generelle tilfælde her og nøjes i stedet med specielle tilfælde, når vi får brug for det.

Lidt om Dirac notation. P.A.M. Dirac indførte i sin klassiker “The Principles of Quantum Mechanics” en særlig notation for linearformen ℓ_v, nemlig $\langle v|$, og kaldte linearformer for “bra-vektorer”. Tilsvarende betegnede han vektorer med $|v\rangle$ i stedet for bare v og kaldte vektorerne for “ket-vektorer”. Her henviser bra, hhv. ket, til de første tre, hhv. sidste tre, bogstaver i ordet bracket, som bruges for det indre produkt, der betegnes $\langle\cdot|\cdot\rangle$ i stedet for $\langle\cdot\,,\,\cdot\rangle$. I denne notation betegner $\langle u|v\rangle$ derfor både det indre produkt af u og v og værdien af linearformen $\langle u|$ i $|v\rangle$, altså $\langle u|(|v\rangle)$.

Tilsvarende skrives $\langle u|A|v\rangle$ i stedet for $\langle u, Av\rangle$ (eller $\langle A^*u, v\rangle$). I den kvantemekaniske formalisme er fysisk målbare størrelser repræsenteret ved selvadjungerede operatorer, (jvf. f.eks. stedoperatoren indført i Eksempel 3.1 c), og tallet

$$\langle v|A|v\rangle$$

angiver *middelværdien* (eller *forventningsværdien*) af den fysiske størrelse svarende til A i tilstanden $|v\rangle$. Dette uddybes yderligere sidst i dette afsnit.

Selvadjungerede operatorer. Vi er nu rede til at indføre de omtalte selvadjungerede operatorer.

Definition 3.4. En begrænset lineær operator $A : H \to H$ på et Hilbert rum H siges at være selvadjungeret, hvis $A = A^*$.

For at frembringe nogle eksempler på selvadjungerede operatorer ser vi først på, hvordan den adjungerede kan bestemmes i nogle konkrete tilfælde.

Eksempel 3.5. a) Den adjungerede til multiplikationsoperatoren M_f defineret i (3.16) kan aflæses af følgende regning, hvor $g, h \in L_2(I)$:

$$\begin{aligned}\langle g, M_f h\rangle &= \langle g, f\cdot h\rangle\\ &= \int_I \overline{g(x)} f(x)h(x)dx\\ &= \int_I \overline{\overline{f(x)}\cdot g(x)}h(x)dx\\ &= \langle M_{\overline{f}}g, h\rangle\,,\end{aligned}$$

hvor $\overline{f}$ er den kompleks konjungerede funktion. Heraf ses, at

$$M_f^* = M_{\overline{f}}\,. \tag{3.27}$$

Specielt er M_f selvadjungeret, netop hvis f er en reel funktion. Det bemærkes, at hvis f også er en ubegrænset funktion (dvs, antager vilkårlig store positive eller negative værdier), da er M_f en ubegrænset selvadjungeret operator.

b) Tilsvarende fås for multiplikationsoperatoren $M_{(a_1,a_2,\dots)}$ defineret ved (3.14) på $\ell_2(\mathbb{N})$, at

$$M^*_{(a_1,a_2,\dots)} = M_{(\overline{a}_1,\overline{a}_2,\dots)}$$

(jvf. Opgave 3.15). Specielt er $M_{(a_1,a_2,\dots)}$ selvadjungeret, netop hvis talfølgen $(a_1, a_2, \dots)$ er reel.

c) For integraloperatoren K defineret ved (3.19) gælder

$$\begin{aligned}
\langle f, Kg\rangle &= \int_a^b \overline{f(x)}(Kg)(x)dx \\
&= \int_a^b \overline{f(x)} \left(\int_a^b k(x,y)g(y)dy \right) dx \\
&= \int_a^b \int_a^b \overline{f(x)} k(x,y)g(y)dydx \\
&= \int_a^b \int_a^b \overline{\overline{k(x,y)}f(x)}g(y)dydx \\
&= \int_a^b \overline{\left(\int_a^b \overline{k(x,y)}f(x)dx \right)} g(y)dy\,,
\end{aligned}$$

hvor vi i sidste skridt har benyttet, at ombytning af rækkefølgen af integrationerne er tilladt. Heraf kan vi nu aflæse, at K^* er givet ved

$$(K^*f)(y) = \int_a^b \overline{k}(x,y)f(x)dx\,,$$

dvs. K^* er integraloperatoren med kerne

$$k^*(x,y) = \overline{k}(y,x)\,.$$

Specielt er K selvadjungeret, netop hvis kernen k opfylder

$$k(x,y) = \overline{k}(y,x)$$

for $x, y \in [a,b]$.

d) For differentialoperatoren $\frac{d}{dx}$ i Eksempel 3.1 a) får vi, når f og g er kontinuert differentiable funktioner på $[-\pi,\pi]$,

$$\begin{aligned}
\left\langle f, \frac{d}{dx}g \right\rangle &= \int_{-\pi}^{\pi} \overline{f}(x)g'(x)dx \\
&= \overline{f}(\pi)g(\pi) - \overline{f}(-\pi)g(-\pi) \\
&\quad - \int_{-\pi}^{\pi} \overline{f}'(x)g(x)dx\,,
\end{aligned}$$

hvor vi i sidste skridt har brugt partiel integration. Antages at $f(\pi) = f(-\pi)$ og $g(\pi) = g(-\pi)$ udgår de første to led og vi får

$$\left\langle f, \frac{d}{dx} g \right\rangle = -\left\langle \frac{d}{dx} f, g \right\rangle .$$

Ganges med i på begge sider fås

$$\left\langle f, i\frac{d}{dx} g \right\rangle = \left\langle i\frac{d}{dx} f, g \right\rangle . \tag{3.28}$$

Da basisfunktionerne e_n, der indgår i (3.7) har samme værdi i π og $-\pi$ gælder (3.28) faktisk for alle f og g tilhørende domænet $D\left(\frac{d}{dx}\right)$ givet ved (3.8), og kan også verificeres direkte ved brug af (3.7), jvf. Opgave 3.16. I denne forstand er operatoren $i\frac{d}{dx}$ et eksempel på en ubegrænset selvadjungeret operator som allered nævnt i Eksempel 3.1 a). Vi understreger igen vigtigheden af randbetingelsen, for at operatoren er selvadjungeret, et fænomen som gentager sig i det følgende eksempel. Som nævnt er disse randbetingelser ofte dikteret af den fysiske problemstilling.

e) I Sturm-Liouville teorien diskuterede vi differentialligninger af formen

$$(rf')' + q \cdot f = -\lambda p \cdot f \,, \tag{3.29}$$

hvor r er en differentiabel funktion og q og p kontinuerte funktioner på intervallet $[a, b]$. Ydermere krævedes randbetingelser af formen

$$\left.\begin{aligned} k_1 f(a) + k_2 f'(a) = 0 \\ \ell_1 f(b) + \ell_2 f'(b) = 0 \end{aligned}\right\} \tag{3.30}$$

opfyldt.

Vi ser på den tilhørende *Sturm-Liouville operator* L givet ved

$$Lf = -\frac{1}{p}\left[(rf')' + q \cdot f\right] \tag{3.31}$$

for funktioner f i Hilbert rummet $L_2([a, b], p)$, som er to gange kontinuert differentiable, og hvor vi antager, at $p > 0$ på $[a, b]$. Bemærk, at L er defineret, således at (3.29) kan skrives på formen

$$Lf = \lambda f \,. \tag{3.32}$$

Det er klart, at der er tale om en anden ordens differentialoperator. Ved partiel integration finder vi

$$\begin{aligned} \langle f, Lg\rangle_p &= \int_a^b \overline{f}(x) \left[-(r(x)g'(x))' + q(x)g(x)\right] dx \\ &= r(a)\overline{f}(a)g'(a) - r(b)\overline{f}(b)g'(b) \\ &\quad + \int_a^b \left[r(x)\overline{f'}(x)g'(x) + q(x)\overline{f}(x)g(x)\right] dx \,. \end{aligned}$$

Tilsvarende finder man

$$\langle Lf, g\rangle_p = r(a)\overline{f'}(a)g(a) - r(b)\overline{f'}(b)g(b) + \int_a^b \big[r(x)\overline{f'}(x)g(x) + q(x)\overline{f}(x)g(x)\big]\,dx\,.$$

Antages yderligere, at f og g opfylder randbetingelserne (3.30) ses, jvf. Opgave 3.17, at randleddene på højresiderne af disse ligninger stemmer overens, således at

$$\langle f, Lg\rangle_p = \langle Lf, g\rangle_p$$

for funktioner f, g, der opfylder randbetingelserne. I denne forstand er L en selvadjungeret (ubegrænset) operator på $L_2([a,b],p)$. Vi vender tilbage til Sturm-Liouville problemet i Eksempel 3.17.

Unitære operatorer. Disse er generelt af en helt anden karakter end de selvadjungerede og defineres som følger.

Definition 3.6. En lineær operator $U : H_1 \to H_2$ mellem Hilbert rum er unitær, hvis den er begrænset og dens inverse eksisterer og er lig med U^*, dvs. hvis

$$U^*U = I_{H_1} \ \ og\ UU^* = I_{H_2}\,. \tag{3.33}$$

Eksempel 3.7. a) Lad os afgøre, for hvilke kontinuerte funktioner f på intervallet I multiplikationsoperatoren M_f defineret ved (3.16) er unitær. Hertil bemærkes først, at

$$M_f\, M_f^* = M_f M_{\overline{f}} = M_{|f|^2}\ ,$$

hvor vi har benyttet at $M_f^* = M_{\overline{f}}$ og at

$$M_f M_g = M_{f\cdot g}\,,$$

jvf. Opgave 3.18, for vilkårlige kontinuerte funktioner f og g på I. Tilsvarende er

$$M_f^* M_f = M_{|f|^2}\,.$$

Altså er M_f unitær netop hvis $M_{|f|^2}$ er lig med identitetsoperatoren på $L_2(I)$, hvilket er tilfældet hvis og kun hvis $|f|^2 = 1$, dvs.

$$|f(x)| = 1 \text{ for alle } x \in I\,,$$

jvf. Opgave 3.18.

2) Tilsvarende finder man, at multiplikationsoperatoren $M_{(a_1,a_2,\dots)}$ defineret ved (3.14) er unitær netop hvis

$$|a_n| = 1 \ for\ alle\ n \in \mathbb{N}\,.$$

Flere eksempler på unitære operatorer følger nedenfor, men det er nyttigt først at se på nogle af deres generelle egenskaber. Den måske vigtigste af disse er, at en unitær operator $U : H_1 \to H_2$ *bevarer det indre produkt* i den forstand, at

$$\langle Uv, Uw \rangle = \langle v, w \rangle \tag{3.34}$$

for alle $v, w \in H_1$. Dette følger af (3.33), idet

$$\langle Uv, Uw \rangle = \langle U^*Uv, w \rangle = \langle I_{H_1} v, w \rangle = \langle v, w \rangle \, .$$

Sættes $v = w$ i (3.34) fås specielt

$$\|Uv\| = \|v\| \, , \qquad v \in H \, , \tag{3.35}$$

dvs. U er *normbevarende* og dermed også *afstandsbevarende*, hvilket man også udtrykker ved at sige, at U er *isometrisk*.

Af (3.32-33) følger klart, at hvis $(e_1, e_2, \dots)$ er et ortonormalsæt i H_1, da er $(Ue_1, Ue_2, \dots)$ et ortonormalsæt i H_2. Der gælder endda, at hvis $(e_1, e_2, \dots)$ er en ortonormalbasis for H_1, da er $(Ue_1, Ue_2, \dots)$ en ortonormalbasis for H_2. Antag nemlig, at $y \in \{Ue_1, Ue_2, \dots\}^\perp$, dvs. at

$$\langle y, Ue_n \rangle = 0$$

for alle $n \in \mathbb{N}$. Vi skal så indse at $y = \underline{0}$. Sættes $x = U^*y$, er $Ux = UU^*y = I_{H_2} y = y$ i følge (3.33). Altså er

$$\langle Ux, Ue_n \rangle = \langle y, Ue_n \rangle = 0$$

for alle $n \in \mathbb{N}$. Men da $\langle Ux, Ue_n \rangle = \langle x, e_n \rangle$, følger heraf at $x \in \{e_1, e_2, \dots\}^\perp$, og derfor at $x = 0$ ifølge Definition 2.5 af ortonormalbasis. Men så er $y = Ux = U\underline{0} = \underline{0}$, som vi skulle vise.

Vi har altså, at unitære operatorer afbilder ortonormalbaser i ortonormalbaser.

Det foregående kan sammenfattes mere præcist som følger:

Sætning 3.8. *For en begrænset operator $U : H_1 \to H_2$ er følgende fire betingelser ækvivalente:*

i) U er unitær.

ii) U er bijektiv og bevarer det indre produkt.

iii) U er bijektiv og isometrisk.

iv) U afbilder ortonormalbaser i ortonormalbaser.

Vi har ovenfor indset i) $\Rightarrow$ ii) $\Rightarrow$ iii) og i) $\Rightarrow$ iv), eftersom kravet om bijektivitet netop sikrer at $U^{-1} : H_2 \to H_1$ eksisterer. At eftervise de omvendte implikationer er overladt til Opgave 3.19.

Eksempel 3.9. Lad $(e_1, e_2, \dots)$ være en ortonormalbasis for et Hilbert rum H. Da er $(e_2, e_1, e_4, e_3, \dots)$ oplagt også en ortonormalbasis for H. Der defineres da en unitær operator U på H ved fastsættelsen

$$Ue_1 = e_2\,,\ Ue_2 = e_1\,,\ Ue_3 = e_4\,,\ Ue_4 = e_3, \dots$$

Dens virkning på en vilkårlig vektor $v = \sum_{n=1}^{\infty} \langle e_n, v\rangle e_n$ i H er givet ved

$$\begin{aligned} Uv &= \sum_{n=1}^{\infty} \langle e_n, v\rangle Ue_n \\ &= \langle e_1, v\rangle e_2 + \langle e_2, v\rangle e_1 + \langle e_3, v\rangle e_4 + \langle e_4, v\rangle e_3 + \dots\,, \end{aligned}$$

hvor det ses, at højresiden er konvergent ifølge Lemma 2.3 med normkvadrat

$$\|Uv\|^2 = \sum_{n=1}^{\infty} |\langle e_n, v\rangle|^2 = \|v\|^2\,.$$

Eksempel 3.10. For en given ortonormalbasis $(e_1, e_2, \dots)$ for et Hilbert rum H haves som bekendt ifølge (2.10-11)

$$v = \sum_{n=1}^{\infty} \langle e_n, v\rangle e_n\,,$$

og

$$\sum_{n=1}^{\infty} |\langle e_n, v\rangle|^2 = \|v\|^2\,.$$

Følgen $(\langle e_1, v\rangle, \langle e_2, v\rangle, \dots)$ i $\ell_2(\mathbb{N})$ kaldes passende for *koordinatfølgen* for v m.h.t. ortonormalbasen $(e_1, e_2, \dots)$. Afbildningen $U : H \to \ell_2(\mathbb{N})$, der afbilder en vektor v i dens koordinatfølge, altså

$$Uv = (\langle e_1, v\rangle, \langle e_2, v\rangle, \dots)$$

er unitær, fordi den afbilder ortonormalbasen $(e_1, e_2, \dots)$ for H i den naturlige ortonormalbasis $(\varepsilon_1, \varepsilon_2, \dots)$ for $\ell_2(\mathbb{N})$ (overvej dette!).

Eksempel 3.11. Fouriertransformationen $\mathcal{F}$ på $\mathbb{R}$ defineredes i Afsnit 10.10 i AEM ved formlen

$$(\mathcal{F}f)(w) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} f(x) e^{-iwx} dx \tag{3.36}$$

for integrable funktioner f. Det er klart at $\mathcal{F}f$ er lineær i f, se AEM p. 572 Theorem 1. Der gælder, hvis f også er kvadratisk integrabel, at

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\mathcal{F}f(w)|^2 dw = \int_{-\infty}^{\infty} |f(x)|^2 dx\,, \tag{3.37}$$

altså at

$$\|\mathcal{F}f\| = \|f\|\,, \tag{3.38}$$

hvor $\|\cdot\|$ betegner normen på $L_2(\mathbb{R})$. (Desværre står (3.37) ikke eksplicit i AEM, men vi begrundede den ved brug af Parsevals ligning for Fourier rækker (2.15)). Af (3.38) fremgår, at $\mathcal{F}$ er en isometri på mængden af funktioner på $\mathbb{R}$, der både er integrable (for at (3.36) er veldefineret) og kvadratisk integrable (for at integralerne i (3.37) er endelige). Der er en standard måde, som vi ikke skal redegøre for her, at udvide $\mathcal{F}$ til hele $L_2(\mathbb{R})$, hvorved $\mathcal{F}$ bliver en unitær operator på $L_2(\mathbb{R})$.

Vi bemærker, at hvis ψ er bølgefunktionen for en kvantemekanisk partikel i det endimensionale rum $\mathbb{R}$, da er $\mathcal{F}\psi(w)$ bølgefunktionen i impulsvariablen w, således at $|\mathcal{F}\psi(w)|^2$ er sandsynlighedstætheden for impulsen w.

Eksempel 3.12. Vi skal nu se et eksempel på en operator, der er isometrisk uden at være unitær, idet den ikke opfylder bijektivitetskravet i Sætning 3.8 iii).

Lad $(e_1, e_2, \dots)$ være en ortonormalbasis for Hilbert rummet H og definer operatoren $S : H \to H$, kaldet *skiftoperatoren*, ved

$$S\,e_n = e_{n+1} \text{ for } n \in \mathbb{N}\,.$$

Dette betyder for en vektor $v \in H$, at

$$Sv = \sum_{n=1}^{\infty} \langle e_n, v\rangle e_{n+1}\,.$$

Her er rækken på højresiden konvergent ifølge Lemma 2.3 og

$$\|Sv\|^2 = \sum_{n=1}^{\infty} |\langle e_n, v\rangle|^2 = \|v\|^2\,.$$

Altså er S en isometri, men er ikke bijektiv, idet f.eks. vektoren e_1 ikke er billede af nogen vektor i H.

Dette fænomen kan ikke forekomme i det endeligdimensionale tilfælde, jvf. Opgave 3.20.

Lineære operatorer i kvantemekanik. Relevansen af selvadjungerede operatorer i kvantemekanik skyldes, at de repræsenterer fysisk målbare størrelser, idet $\langle\psi, A\psi\rangle$ er lig med middelværdien af den fysiske størrelse svarende til operatoren A, når partiklen befinder sig i tilstanden ψ. Dette er endnu et af kvantemekanikkens postulater.

Et eksempel er stedoperatoren M_x nævnt i Eksempel 3.1 d). Et andet vigtigt eksempel er *impulsoperatoren* $-i\frac{d}{dx}$, defineret på domænet bestående af funktioner i $L_2(\mathbb{R})$, hvis afledede er kvadratisk integrabel. I tilstanden ψ er dens middelværdi givet ved

$$\langle\psi, -i\frac{d}{dx}\psi\rangle = \langle\mathcal{F}\psi, -i\mathcal{F}\psi'\rangle = \langle\mathcal{F}\psi, w\mathcal{F}\psi\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} w|\mathcal{F}\psi(w)|^2 dw \ ,$$

hvor vi i første lighedstegn har benyttet, at $\mathcal{F}$ bevarer det indre produkt, og andet lighedshedstegn følger af

$$(\mathcal{F}\psi')(w) = iw(\mathcal{F}\psi)(w) \ ,$$

jvf. AEM p.573. Altså er middelværdien af impulsen i tilstanden ψ lig med middelværdien af w i tilstanden $\mathcal{F}\psi$ i overensstemmelse med bemærkningerne sidst i Eksempel 3.11

Både sted- og impulsoperatoren er eksempler på ubegrænsede, selvadjungerede operatorer. Generelt medfører $A = A^*$, at

$$\langle\psi, A\psi\rangle = \langle A\psi, \psi\rangle = \overline{\langle\psi, A\psi\rangle} \ ,$$

dvs. at middelværdien $\langle\psi, A\psi\rangle$ er reel, som den skal være for enhver fysisk størrelse.

Unitære operatorer er derimod tit relaterede til symmetrioperationer, såsom rotationer eller translationer, af det kvantemekaniske system. Dette skyldes især isometriegenskaben i Sætning 3.8 iii). Hvis således et kvantemekanisk system eksempelvis roteres eller translateres, vil dets oprindelige tilstand ψ ændres til en ny tilstand $U\psi$. Men som følge af sandsynlighedsfortolkningen af bølgefunktionens numeriske kvadrat er normen af enhver fysisk realiserbar tilstand lig med 1 (= den totale sandsynlighed). Derfor må

$$\|U\psi\| = \|\psi\| = 1 \, .$$

Man kan argumentere for, at afbildningen U må være lineær på Hilbert rummet af (ikke nødvendigvis normerede) tilstande (dette gjorde E.P. Wigner i 1939). Det følger da, at

$$\|U\psi\| = \|\psi\|$$

gælder for alle tilstande ψ. U må også være bijektiv, fordi den inverse afbildning U^{-1} svarer til den inverse operation (rotation eller translation) på systemet. Dermed er U unitær ifølge Sætning 3.8.

3.3 Egenværdier, egenvektorer og diagonalisering

For lineære afbildninger på endeligdimensionale vektorrum er begreberne egenværdi og egenvektor velkendte fra Matematik 1 og overføres uændret til det uendeligdimensionale tilfælde. Således siges en skalar a at være *egenværdi* for en operator A på Hilbert rummet H, hvis der findes en vektor $v \neq \underline{0}$ i domænet for A, således at

$$Av = av\,, \tag{3.39}$$

og vektorer $v \neq \underline{0}$, der opfylder (3.39), kaldes *egenvektorer* for A hørende til egenværdien a. Sammen med nulvektoren udgør disse *egenrummet* hørende til a.

Egenværdier og egentilstande i kvantemekanik. Ovenfor nævnte vi, at der i den kvantemekaniske formalisme svarer en selvadjungeret operator A på Hilbert rummet af tilstande til hver fysisk målelig størrelse. Vi kan nu præcisere dette yderligere, idet de mulige udfald af en måling af størrelsen svarende til A netop er A's egenværdier. Ydermere gælder, at hvis resultatet af en måling er egenværdien a, da befinder systemet sig efter målingen i en egentilstand, dvs. tilstanden er en egenvektor, hørende til a, og når systemet befinder sig i denne egentilstand vil en måling af størrelsen med sandsynlighed 1 give resultatet a. Ifølge bemærkningerne om måleprocessen og det indre produkt i Afsnit 2.2 skulle dette betyde, at egenvektorer hørende til egenværdier forskellige fra a må være vinkelrette på egenvektorer hørende til a. Desuden skulle egenværdierne for A gerne være reelle, da fysisk målbare størrelser (f.eks. stedkoordinater og impuls) er reelle. Begge disse egenskaber sikres af, at A er selvadjungeret, som følgende sætning viser.

Sætning 3.13. *Hvis A er en selvadjungeret operator på et Hilbert rum H, da er alle dens egenværdier reelle og egenvektorer hørende til forskellige egenværdier er ortogonale.*

Antag nemlig at $Av = av$, hvor $v \neq 0$. Da er

$$a\langle v, v\rangle = \langle v, av\rangle = \langle v, Av\rangle = \langle Av, v\rangle = \langle av, v\rangle = \overline{a}\langle v, v\rangle\,,$$

hvor vi i tredie lighedstegn har brugt at $A = A^*$. Da $\langle v, v\rangle = \|v\|^2 \neq 0$ følger heraf at $a = \overline{a}$, altså at a er et reelt tal.

Antag dernæst, at $Av_1 = a_1v_1$ og $Av_2 = a_2v_2$, hvor nu a_1 og a_2 er reelle. Da er

$$\begin{aligned} a_2\langle v_1, v_2\rangle &= \langle v_1, a_2v_2\rangle = \langle v_1, Av_2\rangle = \langle Av_1, v_2\rangle \\ &= \langle a_1v_1, v_2\rangle = a_1\langle v_1, v_2\rangle\,, \end{aligned}$$

hvoraf følger at $(a_1 - a_2)\langle v_1, v_2\rangle = 0$. Hvis $a_1 \neq a_2$, må derfor $\langle v_1, v_2\rangle = 0$, som påståaet.

Diagonaliserbare operatorer. De foregående bemærkninger viser den afgørende rolle, som egenværdier og egenvektorer spiller i kvantemekanik. Uafhængig heraf er det p.gr.a. en operators simple virkning på sine egenvektorer generelt af stor nytte med henblik på at gennemskue operatorens egenskaber at kende dens egenvektorer og egenværdier, og jo flere des bedre. Det mest gunstige tilfælde i så henseende er, hvis operatoren er *diagonaliserbar* i følgende forstand.

Definition 3.14. En lineær operator A på et Hilbert rum H er diagonaliserbar, hvis der findes en ortonormalbasis for H bestående af egenvektorer for A. Den omtalte ortonormalbasis siges da at diagonalisere A.

Lad os for at se, hvad denne definition indebærer, antage, at A er en diagonaliserbar operator på H, og at $(e_1, e_2, \dots)$ er en ortonormalbasis, der diagonaliserer A. Betegnes de tilsvarende egenværdier med $a_1, a_2, \dots$, er altså $Ae_n = a_ne_n$ for $n \in \mathbb{N}$. Vi ser, at dette netop er det i Eksempel 3.1 b) beskrevne tilfælde. Hvis A er en begrænset operator, er følgen af egenværdier $a_1, a_2, \dots$ også begrænset, og der gælder for $v \in H$, at

$$Av = A\left(\sum_{n=1}^{\infty}\langle e_n, v\rangle e_n\right) = \sum_{n=1}^{\infty}\langle e_n, v\rangle Ae_n = \sum_{n=1}^{\infty} a_n\langle e_n, v\rangle e_n\,,$$

jvf. Opgave 3.21, altså at A er givet ved formlen (3.12). Dette viser, at A kan udtrykkes alene ved sine egenvektorer og egenværdier. Også for de ubegrænsede diagonaliserbare operatorer A af fysisk relevans i det følgende gælder, at de er givne ved (3.12) på domænet $D(A)$ defineret i (3.11). Specielt følger af Eksempel 3.1 a), at operatoren $\frac{d}{dx}$ på $D\left(\frac{d}{dx}\right)$ givet ved (3.8), er diagonaliserbar med egenværdier in, $n \in \mathbb{Z}$.

Hvis specielt H er endeligdimensionalt, og $A : H \to H$ er diagonaliserbar, da gælder, at matricen $\underline{\underline{A}}$, der repræsenterer A m.h.t. en diagonaliserende ortonormalbasis $(e_1, \dots, e_n)$ ifølge (3.24) har matrixelementer a_{ij} givet ved

$$a_{ij} = \langle e_i, Ae_j\rangle = \langle e_i, a_je_j\rangle = a_j\langle e_i, e_j\rangle = \begin{cases} a_j & \text{hvis } i = j \\ 0 & \text{hvis } i \neq j\,, \end{cases}$$

hvor $a_1, \dots, a_n$ betegner egenværdierne. Altså er $\underline{\underline{A}}$ en diagonalmatrix med egenværdierne stående i diagonalen. Dette er naturligvis årsagen til betegnelsen "diagonaliserbar".

Eksempel 3.15. *Ortogonal projektion.* Lad os se på et ortonormalsæt $(e_1, e_2, \dots)$ i et Hilbert rum H og lad $U = \overline{\mathrm{span}}\{e_1, e_2, \dots\}$ være det afsluttede underrum udspændt af sættets vektorer. Ved den ortogonale projektion, eller blot *projektionen*, på U forstås afbildningen P, der afbilder en vektor $v \in H$ i dens projektion på U. Dvs. ifølge (2.7)

$$Pv = \sum_{n=1}^{\infty} \langle e_n, v \rangle e_n \,. \tag{3.40}$$

Det er oplagt, at P er lineær, og ifølge Bessels ulighed (2.9) er $\|Pv\| \leq \|v\|$, så P er begrænset med norm ≤ 1. Faktisk er $\|P\| = 1$, da jo

$$Pv = v \text{ for alle } v \in U \,.$$

Desuden er

$$Pv = 0 \text{ for alle } v \in U^{\perp}$$

ifølge (3.40), da $\langle e_n, v \rangle = 0$ for alle $n \in \mathbb{N}$ i dette tilfælde. Af de to sidste ligninger følger, at alle vektorer i $U \setminus \{\underline{0}\}$ er egenvektorer for P med egenværdi 1, mens vektorerne i $U^{\perp} \setminus \{\underline{0}\}$ er egenvektorer med egenværdi 0. At der ikke findes andre egenvektorer skal du vise i Opgave 3.26. Vi kan altid supplere $(e_1, e_2, \dots)$ med et ortonormalsæt i $U^{\perp}$, så de tilsammen udgør en ortonormalbasis for H. I konkrete tilfælde er det som regel klart, hvordan dette skal gøres, så vi undlader at give et generelt bevis for denne påstand. Dette viser, at P er diagonaliserbar, og (3.40) er i dette tilfælde identisk med (3.12), idet bidragene svarende til egenværdien 0 i (3.12) udgår.

Diagonaliserbarhed af selvadjungerede operatorer. Lad nu A være en selvadjungeret operator svarende til en fysisk målbar størrelse, eksempelvis energien af et kvantemekanisk system, og lad os antage, at de mulige udfald af en måling af energien, dvs. A's egenværdier, er $\lambda_1, \lambda_2, \dots$, samt, for simpelheds skyld, at alle tilhørende egenrum er endimensionale. Lader vi e_n være en normeret egentilstand svarende til egenværdien λ_n, da er $(e_1, e_2, \dots)$ et ortonormalsæt ifølge Sætning 3.13. Hvis dette ikke var en ortonormalbasis, fandtes der en tilstand ψ, så $\langle e_n, \psi \rangle = 0$ for alle n. Men dette betyder, at sandsynligheden $|\langle e_n, \psi \rangle|^2$ for, at systemet i tilstanden ψ har energien λ_n, er lig med 0 for alle n, hvilket er i modstrid med, at energien kan måles. Altså må egenvektorerne for A udgøre en ortonormalbasis, dvs. A må være diagonaliserbar. Denne observation begrunder relevansen af at kunne afgøre, hvilke selvadjungerede operatorer der er diagonaliserbare. Som den følgende diskussion viser, er svaret simpelt i det endeligdimensionale tilfælde, mens det uendeligdimensionale tilfælde er mere kompliceret.

Et af hovedresultaterne fra første års lineære algebra var Theorem 8.24 i LA, som siger, at enhver selvadjungeret lineær afbildning på et reelt endeligdimensionalt indre produkt rum er diagonaliserbar. (I LA bruges betegnelsen symmetrisk i stedet for selvadjungeret, jvf. Definition 8.20 i LA.) Dette resultat gælder med næsten uændret bevis også for komplekse vektorrum:

Sætning 3.16. *Enhver selvadjungeret operator på et endeligdimensionalt reelt eller komplekst Hilbert rum er diagonaliserbar.*

Eksempel 3.17. Lad H være et todimensionalt komplekst Hilbert rum og lad (e_1, e_2) være en vilkårlig ortonormalbasis for H. Med A betegner vi den lineære afbildning på H, der m.h.t. basen (e_1, e_2) repræsenteres af matricen

$$\underline{\underline{A}} = \begin{pmatrix} 1 & i \\ -i & 1 \end{pmatrix} .$$

Da $\underline{\underline{A}}^* = \underline{\underline{A}}$ er A selvadjungeret. Vi finder A's egenværdier ved at løse ligningen $\det(\underline{\underline{A}} - \lambda \underline{\underline{I}}) = 0$ (hvor $\underline{\underline{I}}$ er enhedsmatricen), idet dette ligesom for reelle matricer betyder, at ligningssystemet $(\underline{\underline{A}} - \lambda \underline{\underline{I}})\underline{x} = 0$ har en ikke-triviel løsning $\underline{x} = \binom{x_1}{x_2}$, hvilket igen er ensbetydende med, at vektoren $x = x_1 e_1 + x_2 e_2$ opfylder $Ax = \lambda x$.

Ligningen lyder

$$\det \begin{pmatrix} 1-\lambda & i \\ -i & 1-\lambda \end{pmatrix} = (1-\lambda)^2 - 1 = 0 ,$$

hvilket giver $\lambda = 0$ eller $\lambda = 2$. For $\lambda = 0$ fås at ligningen $(\underline{\underline{A}} - \lambda \underline{\underline{I}})\binom{x_1}{x_2} = 0$ er ækvivalent med $x_1 + ix_2 = 0$, hvis løsninger er af formen $t\binom{1}{i}$, hvor $t \in \mathbb{C}$. For $\lambda = 2$ fås tilsvarende løsningerne $t\binom{1}{-i}$, $t \in \mathbb{C}$.

Egenvektorerne for A er altså af formen $t(e_1 + ie_2)$ eller $t(e_1 - ie_2)$, hvor $t \in \mathbb{C} \setminus \{0\}$. Ved normering fås ortonormalbasen $\left(\frac{1}{\sqrt{2}}(e_1 + ie_2), \frac{1}{\sqrt{2}}(e_1 - ie_2)\right)$, m.h.t. hvilken A repræsenteres af diagonalmatricen

$$\begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 2 \end{pmatrix} .$$

Man kan med god grund spørge om Sætning 3.16 mon også er gældende i det uendeligdimensionale tilfælde. Svaret herpå er et kvalificeret ja. Man kan faktisk formulere den såkaldte *spektralsætning* om selvadjungerede operatorer på et vilkårligt Hilbert rum, som generaliserer Sætning 3.16, men det vil kræve en generalisering af begrebet diagonaliserbarhed i forhold til Definition 3.14, som vi vil afholde os fra i dette kursus. Men lidt mere herom senere.

Der findes dog vigtige klasser af operatorer, for hvilke en simpel generalisering af Sætning 3.16 er mulig. En nyttig generalisering er følgende, hvis bevis vi ikke skal komme ind på her (se f.eks. §5 i [3]).

Sætning 3.18. *Enhver integraloperator K på $L_2(I)$, hvor I er et interval, med integralkerne $k(x, y)$, som opfylder (jvf. Eksempel 3.1 e) og Eksempel 3.5 c))*

$$k(x, y) = \overline{k}(y, x)\,,$$

og

$$\int_I \int_I |k(x, y)|^2 dxdy < \infty\,,$$

er diagonaliserbar.

Denne sætning kan bl.a. bruges til at udlede de fundamentale resultater vedrørende regulære Sturm–Liouville problemer, idet det viser sig, at Sturm-Liouville operatoren L, jvf. Eksempel 3.5 e), har en invers operator K som i Sætning 3.18. Dens egenvektorer er netop egenfunktionerne for Sturm-Liouville problemet, mens dens egenværdier er de inverse af egenværdierne for Sturm-Liouville problemet. Dette illustreres af følgende eksempel.

Eksempel 3.19. Vi ser på følgende Sturm-Liouville problem på $[0, \pi]$:

$$\begin{aligned} u'' - u &= -2\lambda u \\ u(0) &= u(\pi) = 0\,. \end{aligned}$$

Den tilhørende Sturm-Liouville operator er (se Eksempel 3.5 e))

$$L = -\tfrac{1}{2}\frac{d^2}{dx^2} + \tfrac{1}{2}\,.$$

Denne opfylder $\langle u, Lv\rangle = \langle Lu, v\rangle$, når u, v er to gange kontinuert differentiable funktioner på $[0, \pi]$, som opfylder randbetingelserne, og λ er en egenværdi for Sturm-Liouville problemet med tilhørende egenfunktion u netop hvis λ er egenværdi for L med tilhørende egenvektor u ifølge (3.32). Ved at løse problemet finder man (gør dette!), at egenværdierne er

$$\lambda_n = \tfrac{1}{2}(1 + n^2)\,, \qquad n \in \mathbb{N}$$

med tilhørende normaliserede egenfunktioner

$$e_n(x) = \sqrt{\frac{2}{\pi}} \sin nx\,,$$

i $L_2([0,\pi])$. Disse udgør en ortonormalbasis for $L_2([0,\pi])$, jvf. Opgave 2.7. Altså er L diagonaliserbar og

$$Lu = \sum_{n=1}^{\infty} \tfrac{1}{2}(1+n^2)\langle e_n, u\rangle e_n\,. \tag{3.41}$$

Ligesom for $\frac{d}{dx}$ i Eksempel 3.1 a) fremgår heraf, at L er ubegrænset og defineres ved (3.41) på domænet $D(L)$ bestående af de funktioner u, for hvilke højresiden er konvergent.

Lad nu K være operatoren på $L_2([0,\pi])$ der har samme egenvektorer som L men inverse egenværdier, dvs.

$$Ku = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{2}{1+n^2}\langle e_n, u\rangle e_n\,. \tag{3.42}$$

Denne er åbenbart begrænset i modsætning til L, da $0 < \frac{2}{1+n^2} \leq 1$ for $n \in \mathbb{N}$. Desuden gælder

$$\begin{aligned} KLu &= \sum_{n=1}^{\infty} \tfrac{1}{2}(1+n^2)\langle e_n, u\rangle Ke_n \\ &= \sum_{n=1}^{\infty} \langle e_n, u\rangle e_n = u \end{aligned}$$

for $u \in D(L)$, og tilsvarende

$$LKu = u \text{ for } u \in L_2([0,\pi])\,.$$

Altså er K den inverse operator til L.

Vi kan endda indse, at K er en integral operator, idet (3.42) ved udregning giver

$$\begin{aligned} (Ku)(x) &= \frac{2}{\pi}\sum_{n=1}^{\infty} \frac{2}{1+n^2}\left(\int_0^{\pi} u(y)\sin ny\,dy\right)\sin nx \\ &= \frac{4}{\pi}\sum_{n=1}^{\infty}\int_0^{\pi} \frac{1}{1+n^2}\sin nx \sin ny\, u(y)dy \\ &= \frac{4}{\pi}\int_0^{\pi}\left(\sum_{n=1}^{\infty}\frac{1}{1+n^2}\sin nx\sin ny\right)u(y)dy\,, \end{aligned}$$

hvor vi i sidste skridt har tilladt os at ombytte integration og summation. Hertil er det vigtigt at bemærke, at rækken

$$k(x,y) = \frac{4}{\pi}\sum_{n=1}^{\infty}\frac{1}{1+n^2}\sin nx \sin ny \tag{3.43}$$

er konvergent for alle x og y, da $|\sin nx \sin ny| \le 1$ og $\sum\limits_{n=1}^{\infty} \frac{1}{1+n^2}$ er konvergent. Dette viser, at K er en integraloperator med kerne $k(x,y)$, som kan vises at være kontinuert og er reel og symmetrisk i x og y.

Bemærk, at vi ikke kunne have gennemført det tilsvarende for L, da rækken i (3.43) da havde indeholdt $(1+n^2)$ i stedet for $(1+n^2)^{-1}$, som ville give anledning til konvergensproblemer.

Som man vil kunne gætte sig til fra dette eksempel, gælder for et generelt regulært Sturm-Liouville problem med egenværdier $\lambda_1, \lambda_2, \dots$ og tilhørende normaliserede egenfunktioner $e_1, e_2, \dots$, at integralkernen for den inverse til Sturm-Liouville operatoren er givet ved

$$k(x,y) = \sum_{n=1}^{\infty}\frac{1}{\lambda_n}e_n(x)e_n(y)\ , \tag{3.44}$$

hvor det for konvergensen er afgørende, at $\lambda_n \to \infty$ for $n \to \infty$. (Der gælder faktisk at $\lambda_n \ge c \cdot n^2$ for en konstant $c > 0$.)

Eksempel 3.20. Det forrige eksempel er tæt beslægtet med beskrivelsen af en kvantemekanisk partikel, der er begrænset til intervallet $[0,\pi]$ af uendelig høje potentialbarrierer udenfor dette interval. Den til energien hørende operator (Hamilton operatoren) er

$$H = -\tfrac{1}{2}\frac{d^2}{dx^2}$$

(pånær faktoren $\hbar^2/m$, som vi ser bort fra). Da bølgefunktionen ψ skal være nul udenfor $[0,\pi]$ pålægges randbetingelserne $\psi(0) = \psi(\pi) = 0$, hvorved vi finder, at egenværdierne for H (dvs. de mulige energiniveauer) bliver

$$E_n = \tfrac{1}{2}n^2\,, \quad n \in \mathbb{N}\,,$$

med tilhørende egenfunktioner

$$\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{\pi}}\sin nx\,.$$

Ser vi i stedet på operatoren svarende til stedkoordinaten x, dvs. multiplikationsoperatoren M_x, da er denne selvadjungeret (og begrænset), men den har øjensynlig ingen egenværdier. At $M_x\psi = a\psi$ betyder nemlig

$$x\psi(x) = a\psi(x) \ , \quad \text{dvs.} \quad (x-a)\psi(x) = 0 \ ,$$

for (næsten alle) $x \in [a,b]$. Men da $x - a \neq 0$ for $x \neq a$ betyder dette, at $\psi(x) = 0$ for (næsten alle) $x \in [0,\pi]$, dvs. $\psi = 0$. Altså er a ikke egenværdi for noget $a \in \mathbb{C}$.

I en vis forstand er alle $a \in [0,\pi]$ dog tæt på at være egenværdier. Vælges nemlig en bølgefunktion, der er koncentreret nær $a \in [0,\pi]$, dvs. $\psi(x) = 0$ for $|x-a| \geq \varepsilon$ for et lille $\varepsilon > 0$, da er

$$\|M_x\psi - a\psi\|^2 = \int_0^\pi |x-a|^2|\psi(x)|^2 dx \leq \varepsilon^2 \int_0^\pi |\psi(x)|^2 dx = \varepsilon^2 \, ,$$

så afstanden mellem $M_x\psi$ og $a\psi$ kan gøres vilkårlig lille for passende normaliserede vektorer ψ. Hvis a var en egenværdi, kunne denne afstand gøres til 0 ved at vælge ψ til at være en egentilstand.

Generelt siges $a \in \mathbb{C}$ at tilhøre *spektret* $\sigma(A)$ for en selvadjungeret operator A på et Hilbert rum, hvis der for hvert $\varepsilon > 0$ findes en vektor $v \in H$ med $\|v\| = 1$ så $\|Av - av\| \leq \varepsilon$. Spektret består således dels af egenværdierne, som siges at udgøre *punktspekret* og de "generaliserede egenværdier", som udgør det *kontinuerte spektrum*. Således har M_x kun et kontinuert spektrum, nemlig $[0,\pi]$. Man kan vise, at $\sigma(A) \subseteq \mathbb{R}$ for enhver selvadjungeret operator A. Generelt skal det kontinuerte spektrum inkluderes i de mulige værdier, som den til operatoren svarende fysiske størrelse kan antage. Det er netop forekomsten af det kontinuerte spektrum, som nødvendiggør den tidligere omtalte generalisering af diagonaliserbarhedsbegrebet for at formulere den generelle spektralsætning, som dog ligger udenfor programmet i dette kursus.

Opgaver

Opgave 3.1. Eftervis, at linearitetskravene (3.1) og (3.2) er ækvivalente.

Opgave 3.2. Antag, at f er en kontinuert differentiabel funktion på $[-\pi, \pi]$, dvs. f er differentiabel med kontinuert differentialkvotient f', og således at $f(\pi) = f(-\pi)$.

Brug partiel integration til at vise, at der gælder

$$\mathrm{in}\langle e^{\mathrm{in}x}, f\rangle = \langle e^{\mathrm{in}x}, f'\rangle \ ,$$

og brug Bessels ulighed for f' og Lemma 2.3 til at slutte, at $f \in D\left(\frac{d}{dx}\right)$ givet ved (3.8).

Opgave 3.3. Begrund, at der for en talfølge $(a_1, a_2, \dots)$ og en ortonormalbasis $(e_1, e_2, \dots)$ for et Hilbert rum H gælder, at

$$D(A) = \{v \in H \mid \sum_{n=1}^{\infty} |a_n \langle e_n, v\rangle|^2 < \infty\}$$

er et underrum af H. Vis (3.13), hvis følgen $(a_1, a_2, \dots)$ er begrænset.

Opgave 3.4. Begrund, at der for en kontinuert funktion på intervallet I gælder, at

$$D(M_f) = \{g \in L_2(I) \mid \int_I |f(x)g(x)|^2 dx < \infty\}$$

er et underrum af $L_2(I)$. Vis (3.18), hvis f er en begrænset funktion.

Opgave 3.5. Eftervis, at der for enhver kontinuert funktion f på intervallet $[a, b]$ gælder, at

$$u(x) = \int_a^b e^{-|x-y|} f(y)dy = \int_a^x e^{y-x} f(y)dy + \int_x^b e^{x-y} f(y)dy$$

er en løsning til differentialligningen

$$\left(-\tfrac{1}{2}\frac{d^2}{dx^2} + \tfrac{1}{2}\right) u = f$$

og opfylder randbetingelserne

$$u(a) - u'(a) = 0 \, , \quad u(b) + u'(b) = 0 \, .$$

(Det er tilladt at differentiere m.h.t. x under integraltegnet ovenfor.)

Opgave 3.6. Antag, at den lineære operator $A : H_1 \to H_2$ er kontinuert i $\underline{0}$, dvs. at A opfylder (3.22) for alle følger $(v_1, v_2, \dots)$ i H_1, som konvergerer imod $\underline{0}$. Ækvivalent hermed er, idet $A\underline{0} = \underline{0}$, at der for ethvert $\varepsilon > 0$ findes et $\delta > 0$, så $\|Av\| < \varepsilon$ for $\|v\| < \delta$.

Vælg her $\varepsilon = 1$ og et tilhørende $\delta = \delta_1$, og vis at

$$\|Av\| \leq \delta_1^{-1}\|v\|$$

for alle $v \in H_1$, og dermed at A er begrænset. Vis dernæst, at hvis $A : H_1 \to H_2$ og $B : H_2 \to H_3$ er to begrænsede operatorer, da er $BA : H_1 \to H_3$ også begrænset og

$$\|BA\| \leq \|B\| \, \|A\| \, .$$

Opgave 3.7. Lad den lineære operator A på Hilbert rummet H være givet ved (3.12) på domænet $D(A)$ defineret ved (3.11), hvor vi antager at $a_n \neq 0$ for alle $n \in \mathbb{N}$. Lad tilsvarende A^{-1} være defineret på $D(A^{-1})$ ved at erstatte a_n med a_n^{-1} for alle $n \in \mathbb{N}$.

Eftervis, at A^{-1} faktisk er den inverse afbildning til A, dvs. at

$$A^{-1}Af = f \text{ og } AA^{-1}g = g$$

for $f \in D(A)$ og $g \in D(A^{-1})$.

Giv et eksempel på en ubegrænset operator, der har en begrænset invers, og på en ubegrænset operator, der har en ubegrænset invers.

Opgave 3.8. Lad $A : H_1 \to H_2$ være en lineær afbildning mellem to endelig-dimensionale Hilbert rum.

Vælg en ortonormalbasis $(e_1, \dots, e_n)$ for H_1 og vis, at

$$\|Av\| \leq (\|Ae_1\| + \cdots + \|Ae_n\|)\|v\|$$

for alle $v \in H_1$, og dermed at A er begrænset.

Opgave 3.9. På Hilbert rummet $\ell_2(\mathbb{N})$ (med sædvanligt indre produkt) betragtes afbildningen A givet ved

$$A(x_1, x_2, \dots) = (ix_1, i^2x_2, i^3x_3, \dots) \, .$$

a) Gør rede for, at $\|Ax\| = \|x\|$ for alle $x \in \ell_2(\mathbb{N})$.

b) Vis, at A er en begrænset lineær operator og bestem $\|A\|$.

c) Gør rede for at $A^4 = I_H$, (hvor A^4 som sædvanlig betegner $A \circ A \circ A \circ A$).

Opgave 3.10. Eftervis, at matrix-elementerne a_{ij} i matricen, der repræsenterer en lineær afbildning $A : H_1 \to H_2$ mellem to endeligdimensionale Hilbert rum m.h.t. to baser $(e_1, \dots, e_n)$ og $(f_1, \dots, f_m)$ er givet ved (3.24):

$$a_{ij} = \langle f_i, Ae_j \rangle$$

(se Afsnit 6.3 i LA).

Opgave 3.11. Gennemfør udregningen, der leder til (3.26).

Opgave 3.12. Vis, for en begrænset operator $A : H_1 \to H_2$, at

$$\|A\| = \sup\{\|Av\| \mid \|v\| \leq 1\}$$

og

$$\|A\| = \sup\{|\langle u, Av \rangle \mid \|\|u\| \leq 1\,,\ \|v\| \leq 1\}\,,$$

og brug det sidste udtryk til at indse, at $\|A\| = \|A^*\|$.

Opgave 3.13. Lad H være et 3-dimensionalt komplekst Hilbert rum og lad A være operatoren, der m.h.t. en given ortonormalbasis (e_1, e_2, e_3) repræsenteres af matricen

$$\begin{pmatrix} 2 & 3+i & 2i \\ 0 & 2 & 0 \\ i & 1-i & 2 \end{pmatrix}.$$

Bestem matricen, der repræsenterer A^* m.h.t. samme basis og beregn $A^*(e_1 + ie_2 - e_3)$.

Opgave 3.14. Lad A være operatoren på $\mathbb{C}^3$, der m.h.t. den naturlige basis repræsenteres af matricen

$$\begin{pmatrix} 2 & 0 & -i \\ 0 & 2 & 0 \\ i & 0 & 2 \end{pmatrix}$$

Begrund, at A er selvadjungeret, bestem dens egenværdier samt en ortonormalbasis for $\mathbb{C}^3$, der diagonaliserer A.

Opgave 3.15. Eftervis, at der for multiplikationsoperatoren $M_{(a_1, a_2, \dots)}$ på $\ell_2(\mathbb{N})$ gælder, at

$$M^*_{(a_1, a_2, \dots)} = M_{(\overline{a}_1, \overline{a}_2, \dots)}\,.$$

Opgave 3.16. Eftervis identiteten (3.28) direkte ved brug af (3.7).

Opgave 3.17. Fuldfør udregningerne i Eksempel 3.5 e) ved at bruge randbetingelserne i Sturm-Liouville problemet til at vise, at

$$\langle f, Lg \rangle_p = \langle Lf, g \rangle_p \,,$$

hvor L er Sturm-Liouville operatoren (3.31).

Opgave 3.18. Vis, at der for multiplikationsoperatorer M_f og M_g på $L_2(I)$ gælder, at

$$M_f M_g = M_{fg} \,,$$

og at M_f er unitær, netop hvis $|f(x)| = 1$ for alle $x \in I$.

Opgave 3.19. Eftervis implikationerne iii) $\Rightarrow$ ii) $\Rightarrow$ i) og iv) $\Rightarrow$ i) i Sætning 3.8. Til den første kan man bruge polariseringsidentiteten fra Opgave 1.9.

Opgave 3.20. Begrund, at bijektivitetskravet i ii) og iii) i Sætning 3.8 er overflødigt i det endeligdimensionale tilfælde, forudsat $\dim H_1 = \dim H_2$.

Opgave 3.21. Godtgør, at hvis $A : H_1 \to H_2$ er en begrænset operator og $\sum_{n=1}^{\infty} v_n$ er en konvergent række i H_1, da er

$$A\left(\sum_{n=1}^{\infty} v_n\right) = \sum_{n=1}^{\infty} Av_n \,.$$

Opgave 3.22. Vis, at afbildningen $U : L_2(I, \rho) \to L_2(I)$ givet ved

$$Uf = \rho^{1/2} f \,, \quad f \in L_2(I, \rho) \,,$$

er unitær.

Opgave 3.23. Godtgør, at hvis A er en diagonaliserbar operator på H_1 og $U : H_1 \to H_2$ er unitær, da er operatoren $U\,A\,U^*$ også diagonaliserbar med samme egenværdier som A.

Opgave 3.24. Eftervis, at der for enhver egenværdi a for en unitær operator $U : H \to H$ gælder, at $|a| = 1$, samt at egenvektorer hørende til forskellige egenværdier er ortogonale.

Opgave 3.25. En lineær operator $A : H \to H$ siges at være *positiv*, hvis

$$\langle f, Af \rangle > 0$$

for $f \neq \underline{0}$ i domænet for A.

a) Eftervis, at enhver egenværdi for en positiv operator er positiv.

b) Begrund, at en diagonaliserbar operator er positiv, netop hvis alle dens egenværdier er positive.

c) Vis, at egenværdierne for det regulære Sturm-Liouville problem, dvs. for $p > 0$, $q \geq 0$, $r > 0$ og $k_1 k_2 \leq 0$, $\ell_1 \ell_2 \geq 0$, alle er positive, pånær hvis $k_1 = l_1 = 0$, i hvilket tilfælde 0 også forekommer som egenværdi med tilhørende egenrum bestående af de konstante funktioner.

(Brug udregningerne i Eksempel 3.5 e) til at indse, at Sturm-Liouville operatoren er positiv, når bortses fra sidstnævnte tilfælde.)

Opgave 3.26. Vis, at projektionen P i Eksempel 3.15 ikke har andre egenværdier end 0 og 1.

Opgave 3.27 Bestem den adjungerede S^* til skiftoperatoren i Eksempel 3.12, og beregn S^*S og SS^*.

Opgave 3.28 Vis, at hvis $U : H_1 \to H_2$ og $V : H_2 \to H_3$ er unitære operatorer, da er $VU : H_1 \to H_3$ også unitær.

Giv et eksempel på (begrænsede) selvadjungerede operatorer A og B på et Hilbert rum H, således at AB ikke er selvadjungeret.

Litteraturhenvisninger

1. R. Courant og D. Hilbert: *Methods of Mathematical Physics I, II.* Interscience Publishers, New York, 1953 og 1965.

2. P.A.M. Dirac: *The Principles of Quantum Mechanics.* Oxford University Press 1962.

3. B. Durhuus: *Hilbert rum med anvendelser* HCØ-tryk 1997.

4. J. von Neumann: *Mathematische Grundlagen der Quantenmechanik.* Springer Verlag, Berlin, 1932.

5. M. Reed og B. Simon: *Methods of Modern Mathematical Physics I, II.* Academic Press, New York, 1980 og 1975.

6. H.F. Weinberger: *A First Course in Partial Differential Equations.* Xerox Publishing Company, Lexington, Massachusetts, 1965.