Theoretische Physik IV – Quanten

Spektralzerlegung

Prof. W. Vogel, J. Sperling, V. Mosert und P. Grünwald

Motivation. In der endlichdimensionalen Linearen Algebra spielt die diagonalisierung von Matrizen eine wichtige Rolle. Projektive Maße – engl.: positive-operator valued measure (POVM) – erlauben es, die Spektralzerlegung von Observablen mit diskretem und kontinuierlichem Eigenwertspektrum einheitlich zu formulieren. Mithilfe dieser Zerlegung kann die Wirkung eines Operators auf einen gegebenen Zustand vereinfacht analysiert werden. Im Folgenden werden kurz die mathematische Struktur angegeben und zwei Beispiele mit je einem diskreten und einem kontinuierlichen Spektrum studiert.

Projektoren. Ein Projektor $\hat{P}$ ist eine lineare Abbildung mit der Eigenschaft $\hat{P}^2 = \hat{P}$ (Idempotenz). Das bedeutet, dass ein einmal in einen Unterraum reduzierter Zustand, von dieser Projektion nicht weiter reduziert wird. Beispiele für Projektoren sind die Idendität $\hat{1}$ ($\hat{1}\psi(x) = \psi(x)$) und die Nullabbildung $\hat{0}$ ($\hat{0}\psi(x) = 0$).
Im Allgemeinen folgt aus der Idempotenz, dass ein Projektor nur die Eigenwerte 0 oder 1 haben kann.

Wahrscheinlichkeitsmaße. Der Einfachheit halber betrachten wir hier nur Maße auf einer endlichen Menge $N = \{1, \ldots, n\}$. Ein Wahrscheinlichkeitsmaß ist dann eine Funktion μ, die jeder Teilmenge T von N eine nicht-negative Zahl (Wahrscheinlichkeit) zuordnet. Dabei soll das sichere Ereignis N die Wahrscheinlichkeit 1 haben, $\mu(N) = 1$, und das unmögliche Ereignis $T = \{\,\}$ die Wahrscheinlichkeit 0 haben, $\mu(\{\,\}) = 0$. Die gemeinsame Wahrscheinlichkeit zweier disjunkte Ereignisse $T_1 \cap T_2 = \{\,\}$ (keine gemeinsamen Elemente) soll die Summe der Einzelwahrscheinlichkeiten sein, d.h. $\mu(T_1 \cup T_2) = \mu(T_1) + \mu(T_2)$.

Spektralmaße. Betrachten wir nun einen hermiteschen Operator $\hat{L} = \hat{L}^\dagger$, mit diskreten und nicht-entarteten Eigenwerten,

$$\hat{L}\phi_n(x) = \lambda_n \phi_n(x) \quad (n \in \mathbb{N}).$$

Wir können nun folgende Projektoren definieren $\hat{P}_n\psi = \langle \phi_n | \psi \rangle \, \phi_n$. Durch einfaches nachrechnen sehen wir, dass $\hat{P}_n \hat{P}_m \psi = \delta_{n,m} \hat{P}_n \psi$ für alle ψ gilt, dabei haben wir $\langle \phi_n | \phi_m \rangle = \delta_{m,n}$ genutzt. Mit der Vollständigkeit $\psi(x) = \sum_{n\in\mathbb{N}} \psi_n \, \phi_n(x)$, können wir dann noch zeigen, dass $\sum_{n\in\mathbb{N}} \hat{P}_n \psi = \hat{1}\psi$ für alle ψ gilt.

Damit finden wir folgendes Spektralmaß $\hat{E}$, das eine Abbildung von Mengen $T \subset \mathbb{N}$ auf Projektoren $\hat{E}(T)$ ist, mit

$$\hat{E}(T) = \sum_{n\in T} \hat{P}_n.$$

Man kann nun leicht nachrechnen, dass $\hat{E}(T)$ ein Projektor ist, $\hat{E}(\{\,\}) = \hat{0}$ und $\hat{E}(\mathbb{N}) = \hat{1}$, sowie $\hat{E}(T_1 \cup T_2) = \hat{E}(T_1) + \hat{E}(T_2)$ für $T_1 \cap T_2 = \{\,\}$.

Wir können nun den Operator $\hat{L}$ durch sein Spektralzerlegung (Diagonalisierung) wie folgt darstellen:

$$\hat{L} = \sum_{n\in\mathbb{N}} \lambda_n \,\hat{E}(\{n\}).$$

Die Menge der Eigenwerte $\sigma(\hat{L}) = \{\lambda_n : n \in \mathbb{N}\}$ nennt man in diesem Fall Spektrum.

Beispiel. Betrachten wir den Impuls $\hat{p} = \frac{\hbar}{\mathrm{i}}\partial_x$, eingeschränkt auf 2π-periodische Funktionen. Dessen orthonormierte Eigenfunktionen sind $\phi_k(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}e^{\mathrm{i}kx}$, mit $k \in \mathbb{Z}$ und $\langle\phi_k|\phi_{k'}\rangle = \int\limits_0^{2\pi} dx\,\phi_k(x)^*\phi_{k'}(x) = \delta_{k,k'}$, zu dem Eigenwert $p_k = \hbar k$. Das Spektralmaß ist dann definiert durch $\hat{E}(\{k\})\psi = \langle\phi_k|\psi\rangle\phi_k$ (Vergleich Fourier-Reihe), und die Spektralzerlegung von $\hat{p}$ ist

$$\hat{p} = \hbar\sum_{k\in\mathbb{Z}} k\,\hat{E}(\{k\}) = \hbar\sum_{k\in\mathbb{Z}} k\,\langle\phi_k|\cdot\rangle\phi_k.$$

Beispiel. Betrachten wir nun den Impuls $\hat{p} = \frac{\hbar}{\mathrm{i}}\partial_x$, für allgemeine Funktionen. Dessen Eigenfunktionen sind $\phi_k(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}e^{\mathrm{i}kx}$, mit $k \in \mathbb{R}$ und dem Skalarprodukt $\langle\phi_k|\phi_{k'}\rangle = \int\limits_{-\infty}^{\infty} dx\,\phi_k(x)^*\phi_{k'}(x) = \delta(k-k')$, zu dem Eigenwert $p_k = \hbar k$. Das Spektralmaß ist dann für ein Intervall $[k, k+\Delta k]$ gegeben durch $\hat{E}([k, k+\Delta k])\psi = \int_k^{k+\Delta k} dk\,\langle\phi_k|\psi\rangle\phi_k$ (Vergleich Fourier-Transformation), und die Spektralzerlegung von $\hat{p}$ ist

$$\hat{p} = \hbar\int_{\mathbb{R}} k\,\hat{E}([k, k+dk]) = \hbar\int_{-\infty}^{\infty} k\,dk\langle\phi_k|\cdot\rangle\phi_k.$$