

Der seltsame Formalismus der QM wird eingeführt, zunächst mit endlichdimensionalen Hilbert-Räumen, wo die bekannten Sätze aus der Linearen Algebra gelten. Das Qubit wird als Beispiel verwendet.

2.1 Die Postulate der Quantenmechanik – Überblick

Wir wollen uns zunächst einen kurzen Überblick über die Postulate der Quantenmechanik und ihre grundsätzliche Bedeutung verschaffen, um sie anschließend anhand von Beispielen mit mathematischem und physikalischem Leben zu füllen. Alle Begriffe, die in diesem Überblick zur Verwendung kommen, werden später noch ausführlicher erklärt. Es geht nur darum, erst einmal einen Blick auf den Berg als Ganzen zu werfen, bevor wir den Aufstieg wagen.

Jawohl, wir beginnen ganz axiomatisch mit dem abstrakten Teil der QM, weil ich es für das Beste halte, diese Hürde gleich am Anfang zu nehmen und dadurch später Missverständnisse zu vermeiden. Mathematisch ist das Ganze zunächst einmal auch nicht allzu kompliziert: Alles was wir brauchen ist **Lineare Algebra**, und das ist nun nicht gerade das schwerste aller Gebiete der Mathematik. Die Lineare Algebra sollte aus den ersten Semestern bekannt sein, wir werden aber ihre wesentlichen Begriffe und Aussagen noch einmal auffrischen. Schwieriger ist es zu erkennen, was für eine Physik eigentlich in diesem Formalismus steckt, was die Postulate also physikalisch bedeuten. Das zu verstehen wird eine Weile dauern.

In Kap. 3, wenn wir den Wellenfunktionen begegnen, wird die Physik klarer (endlich geht es dann um Orte und Impulse!), dafür aber die Mathematik etwas komplizierter. Denn dann müssen wir Wellenfunktionen als Vektoren in unendlichdimensionalen Vektorräumen auffassen, und dafür ist das etwas schwierigere Gebiet der Funktionalanalysis zuständig. So hat eben alles seinen Preis.

Wichtig ist noch, dass wir es hier mit Vektorräumen über dem Körper der *komplexen* Zahlen zu tun bekommen – und das ist auch bereits einer der wichtigen Unterschiede zur klassischen Mechanik, wo es immer reell zugeht.

Hier nun die Postulate der Quantenmechanik:

1. **Zustände:** Der Zustand eines physikalischen Systems wird durch einen **Strahl** in einem **Hilbert-Raum** $\mathcal{H}$ dargestellt.

Ein Hilbert-Raum ist hierbei ein Vektorraum über dem Körper der komplexen Zahlen mit einem **Skalarprodukt**. In der Quantenmechanik schreibt man einen Hilbert-Raum-Vektor in der Form $|v\rangle$, das Skalarprodukt zweier Vektoren $|u\rangle$ und $|v\rangle$ als $\langle u | v \rangle$.

Ein Strahl ist eine Menge von Vektoren der Form $\{\alpha |v\rangle \mid \alpha \in \mathbb{C}\}$. Im Falle eines reellen Vektorraums würde man bei einem Strahl von einer Geraden durch den Ursprung sprechen. Da $\mathbb{C}$ aber anschaulich einer Ebene entspricht, ist der Begriff der Geraden hier missverständlich. Die Zuordnung eines Zustands zu einem Strahl bedeutet jedenfalls, dass Vektoren, die sich nur um einen (komplexen) Faktor unterscheiden, den *selben* Zustand darstellen.

Da sich mit Vektoren einfacher rechnen lässt als mit Strahlen, wählt man meist einen auf 1 normierten Repräsentanten $|v\rangle$, $\langle v | v \rangle = 1$, aus dem Strahl und bezeichnet diesen als **Zustandsvektor**. Sprachlich identifiziert man häufig den Zustandsvektor mit dem Zustand selbst, d. h., man spricht vom Zustand $|v\rangle$.

Ein Zustand in der Quantenmechanik ist also zunächst ein recht abstraktes, unanschauliches Gebilde. Der Raum, in dem die Zustände „leben“, unterscheidet sich völlig von dem dreidimensionalen Raum, den wir kennen. Auch die Begriffe eines Abstands („nah“ und „fern“) zwischen Zuständen muss erst einmal definiert werden und hat zunächst nichts mit dem Abstand zu tun, der zwischen Punkten im uns bekannten dreidimensionalen Raum gilt. Damit ist hier schon im Keim die Nichtlokalität der Quantenmechanik angelegt. Überhaupt ist zunächst unklar, wie sich unser dreidimensionaler Raum aus dem Hilbert-Raum „gewinnen“ lässt. Erst wenn der Zustandsvektor die Form einer **Wellenfunktion** annimmt (wie wir in Kap. 3 sehen werden), wird ein Zusammenhang zwischen den beiden Räumen hergestellt. Erst dann bekommen Zustände eine gewisse Anschaulichkeit.

Die Unanschaulichkeit des Zustandsbegriffs in der Quantenmechanik hat unzählige Debatten über die Bedeutung und den Realitätsgehalt der ganzen Beschreibung ausgelöst.

2. **Messung:** Die Messung einer **Observablen**, d. h. einer beobachtbaren physikalischen Größe des beobachteten Systems, wird durch einen **linearen, hermiteschen Operator** dargestellt. Der gemessene Wert λ ist ein **Eigenwert** des Operators. Nach der Messung befindet sich das beobachtete System im Zustand $|v_\lambda\rangle$, wobei $|v_\lambda\rangle$ die Projektion des ursprünglichen Zustandsvektors auf den Eigenraum zum Eigenwert λ ist.

Ein Operator A ist hierbei eine Funktion $\mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}$, die also jeden Vektor des Hilbert-Raums auf einen Vektor des Hilbert-Raums abbildet, $|v\rangle \rightarrow A |v\rangle$. Ein Operator ist linear, wenn

$$A(\alpha |u\rangle + \beta |v\rangle) = \alpha A |u\rangle + \beta A |v\rangle. \quad (2.1)$$

Ein linearer Operator A ist hermitesch, wenn er nur reelle Eigenwerte hat und der Hilbert-Raum eine Orthonormalbasis aus Eigenvektoren bzgl. A besitzt. Details zur Hermitezität werden in Abschn. 2.3 erläutert.

Ein Eigenwert von A ist eine Zahl λ , für die ein Vektor $|v\rangle$ existiert (ein sog. **Eigenvektor**), so dass die **Eigenwertgleichung** $A|v\rangle = \lambda|v\rangle$ gilt; d.h., die Wirkung des Operators A auf den Vektor $|v\rangle$ ist die Multiplikation mit λ . Der Eigenraum $\mathcal{H}_\lambda$ zum Eigenwert λ ist der Unterraum des Hilbert-Raums $\mathcal{H}$, für den diese Eigenwertgleichung erfüllt ist. Es handelt sich um einen Unterraum, denn aus der Linearität von A folgt, dass wenn die Eigenwertgleichung für zwei Vektoren $|u\rangle$ und $|v\rangle$ gilt, dies auch für jede Linearkombination der beiden der Fall ist.

Projektion auf den Eigenraum bedeutet schließlich, dass der Anteil des ursprünglichen Zustandsvektors $|v\rangle$, der orthogonal zu $\mathcal{H}_\lambda$ liegt, „abgeschnitten“ wird. Wenn man darauf besteht, dass ein Zustandsvektor auf 1 normiert sein soll, muss das Ergebnis der Projektion wieder mit einer geeigneten Zahl (**Normierungsfaktor**) multipliziert werden. Man kann also nicht behaupten, dass der Zustand durch das Abschneiden „kleiner“ geworden ist.

Welche Bedeutung hat diese abstrakte Definition für eine Messung? Nun, auch der Vorgang des Messens stellt sich in der Quantenmechanik recht seltsam dar. Bei einer Messung treten *zwei* Operatoren in Aktion:

- Der Operator A „entspricht“ der Observablen a , die gemessen wird. Er übersetzt gewissermaßen die zu messende physikalische Eigenschaft in die Sprache der abstrakten Quantenzustände. Dieser Operator A bestimmt die möglichen Messwerte. Da A hermitesch ist, sind nur reelle Werte möglich. Auf diese Weise wird also aus der komplexen Quantenwelt die reelle Welt der Phänomene zurückgewonnen. Welche Observable nun welchem Operator entspricht, ist eine Frage, die uns das ganze Buch hindurch immer wieder beschäftigen wird. Hinweis: In diesem Buch unterscheiden wir zwischen der Observablen a und dem zugehörigen Operator A . In vielen Büchern wird der Operator selbst als Observable bezeichnet.
- Der Projektionsoperator P_λ projiziert den ursprünglichen Zustandsvektor $|v\rangle$ auf den zum Messwert λ gehörenden Unterraum von $\mathcal{H}$. **Durch die Messung wird der Zustand also zwangsläufig verändert** (es sei denn, $|v\rangle$ lag schon vorher vollständig in dem Unterraum).

Außerdem erklärt das Messpostulat, warum bestimmte Observablen **gequantelt** sind, d.h. nur in diskreten Portionen vorkommen: Der Hilbert-Raum ist zwar kontinuierlich, nicht aber das Eigenwertspektrum vieler Operatoren.

Das Postulat beinhaltet auch die **Unschärferelation**: Man kann zwei Observablen nur dann gleichzeitig messen, wenn die zugehörigen Operatoren A_1 und A_2 *gemeinsame* Eigenvektoren besitzen. (In Abschn. 2.8 werden wir sehen, wann das der Fall ist.) Andernfalls lassen sich die beiden Projektionen nicht gleichzeitig durchführen. Die Messung der einen Observablen bewirkt eine „Unschärfe“ der anderen und umgekehrt. Was das genau bedeutet, wird in Abschn. 2.8 erklärt.

3. **Messwahrscheinlichkeit:** Die Wahrscheinlichkeit, dass der Wert λ gemessen wird, beträgt

$$p(\lambda) = \langle v | P_\lambda | v \rangle. \quad (2.2)$$

Hierbei ist $|v\rangle$ der normierte Zustandsvektor des beobachteten Systems *vor* der Messung und P_λ der zum Eigenwert λ gehörende Projektionsoperator. Der Ausdruck auf der rechten Seite steht für das Skalarprodukt des Vektors $|v\rangle$ mit dem Vektor $P_\lambda |v\rangle$. Dass die Summe aller Wahrscheinlichkeiten 1 beträgt, spiegelt sich in der Tatsache wider, dass die Summe der Projektionsoperatoren zu allen Eigenwerten den Eins-Operator ergibt (Genauerer dazu in Abschn. 2.5).

Das Wahrscheinlichkeitspostulat stellt – zusammen mit dem Messpostulat – eine brisante Aussage dar: Die Quantenmechanik ist **nichtdeterministisch**. Bei gegebenem Ausgangszustand $|v\rangle$ lässt sich nicht vorhersagen, welcher Messwert auftreten wird, sondern nur eine statistische Aussage machen. Wird ein gegebenes Atom einer radioaktiven Substanz zum Zeitpunkt t zerfallen sein? Wir können nur die Halbwertszeit angeben und daraus die Wahrscheinlichkeit berechnen. Wird ein gegebenes Photon einen bestimmten Polarisationsfilter passieren? Wir können nur die Wahrscheinlichkeit angeben.

4. **Zeitentwicklung:** Die Zeitentwicklung eines Zustands ist – solange keine Messung stattfindet – durch die **Schrödinger-Gleichung** gegeben:

$$i\hbar \frac{d}{dt} |v(t)\rangle = H |v(t)\rangle \quad (2.3)$$

Hierbei ist $\hbar = h/(2\pi)$ und h das **Planck'sche Wirkungsquantum**, eine fundamentale Naturkonstante. So fundamental, dass theoretische Physiker mit Vorliebe Einheiten benutzen, in denen $\hbar$ den Wert 1 hat. Der **Hamilton-Operator** H stellt die Energie-Observable des Systems dar.

Solange keine Messung stattfindet, verhält sich das System also vorbildlich deterministisch: Wenn der Zustand $|v(t)\rangle$ zu einem Zeitpunkt gegeben ist, lässt sich seine zeitliche Entwicklung mithilfe der Schrödinger-Gleichung eindeutig berechnen, denn es handelt sich um eine Differentialgleichung erster Ordnung in der Zeit. Erst im Moment der Messung zum Zeitpunkt t_0 findet ein plötzlicher Sprung von $|v(t_0)\rangle$ zu $P_\lambda |v(t_0)\rangle$ statt. Dieser Sprung wird in dem Fall, dass der Zustand durch eine Wellenfunktion dargestellt wird, auch als **Kollaps der Wellenfunktion** bezeichnet.

Die Schrödinger-Gleichung gilt im **Schrödinger-Bild**, in dem Zustände zeitabhängig und Operatoren zeitunabhängig sind. Es gibt noch eine andere Darstellung, das **Heisenberg-Bild**, in dem Zustände gar nicht von der Zeit abhängen, sondern die Operatoren, die die Observablen beschreiben. Beide Bilder machen exakt dieselben Vorhersagen, es ist also Geschmacksache, welche der beiden Darstellungen man vorzieht. Auch diese Merkwürdigkeit werden wir später eingehend diskutieren (Abschn. 2.9).

Wir fassen noch einmal zusammen:

Postulate der QM

1. **Zustände:** Der Zustand eines physikalischen Systems wird durch einen **Strahl** in einem **Hilbert-Raum** $\mathcal{H}$ dargestellt.
2. **Messung:** Die Messung einer **Observablen**, d. h. einer beobachtbaren physikalischen Größe des beobachteten Systems, wird durch einen **linearen hermiteschen Operator** dargestellt. Der gemessene Wert λ ist ein **Eigenwert** des Operators. Nach der Messung befindet sich das beobachtete System im Zustand $|v_\lambda\rangle$, wobei $|v_\lambda\rangle$ die Projektion des ursprünglichen Zustandsvektors auf den Eigenraum zum Eigenwert λ ist.
3. **Messwahrscheinlichkeit:** Die Wahrscheinlichkeit, dass der Wert λ gemessen wird, beträgt

$$p(\lambda) = \langle v | P_\lambda | v \rangle. \quad (2.4)$$

Hierbei ist $|v\rangle$ der normierte Zustandsvektor des beobachteten Systems vor der Messung und P_λ der zum Eigenwert λ gehörende Projektionsoperator.

4. Die Zeitentwicklung eines Zustands ist – solange keine Messung stattfindet – durch die **Schrödinger-Gleichung** gegeben:

$$i\hbar \frac{d}{dt} |v(t)\rangle = H |v(t)\rangle \quad (2.5)$$

Der **Hamilton-Operator** H beschreibt dabei die Gesamtenergie des Systems.

Diese Postulate sind starker Tobak. Wir haben sie und ihre grundsätzliche Bedeutung der Übersichtlichkeit halber erst einmal komplett aufgelistet, müssen nun aber zunächst die Grundlagen schaffen, um sie in vollem Umfang zu verstehen. Damit wollen wir uns in den nächsten Abschnitten beschäftigen. Wir werden die verwendeten Begriffe vertiefen und erweitern und sie an einem einfachen Beispiel, dem zweidimensionalen Hilbert-Raum, erläutern. Es wird noch einiges an Rüstzeug nötig sein, bis wir uns an die beiden Vorzeigebeispiele der Quantenmechanik herantrauen können: den Harmonischen Oszillator (Abschn. 5.3) und das Wasserstoffatom (Abschn. 7.5).

Selbst wenn Sie diesen Stoff bewältigt haben, wird wahrscheinlich ein gewisses Unbehagen bleiben (wenn Sie sich überhaupt über diese Dinge Gedanken machen) – ein Unbehagen, das Sie mit der Mehrheit der Physiker teilen.

Die Postulate der Quantenmechanik, wie sie oben dargestellt sind, stehen im Geiste der sog. **Kopenhagener Deutung**, wie sie von Heisenberg, Bohr und Born entwickelt wurde. Sie wurden mehrfach umgedeutet in einer Weise, die ein völlig anderes Licht auf die Theorie wirft. Wir werden Beispiele hierfür in Kap. 4 diskutieren.

Anders als beispielsweise spezielle und allgemeine Relativitätstheorie sind die Postulate der Quantenmechanik nicht aus einer physikalischen Idee heraus entstanden, sondern aus der Not heraus geboren. Es hat sich herausgestellt, dass bestimmte Heuristiken geeignet sind, die Ergebnisse bestimmter Experimente bzw. Beobachtungen (z. B. Spektrallinien des Wasserstoffs) vorherzusagen. Diese Heuristiken (Heisenbergs Matrizen-Mechanik) wurden dann zu den oben dargestellten Postulaten weiterentwickelt, die sich als extrem erfolgreich herausgestellt haben. Sie bilden einen Rahmen für die Erklärung vieler Phänomene, die klassisch nicht zu verstehen sind, z. B. Photoeffekt, Stabilität von Atomen, chemische Bindung etc.

Die Vorhersagen der Quantenmechanik wurden immer wieder bestätigt, mit all ihren Merkwürdigkeiten.

2.2 Zustände im Hilbert-Raum

Die QM wird mithilfe von Vektoren in Hilbert-Räumen beschrieben. Daher müssen wir zuerst einmal klären, was ein Hilbert-Raum ist.

Ein Hilbert-Raum $\mathcal{H}$ ist ein vollständiger Vektorraum über $\mathbb{C}$ mit Skalarprodukt. Die erste Eigenschaft, **Vollständigkeit**, bedeutet, dass jede Cauchy-Folge im Vektorraum konvergiert, und soll uns im Weiteren nicht mehr beschäftigen. Ein **Skalarprodukt** ist eine Abbildung $\mathcal{H} \times \mathcal{H} \rightarrow \mathbb{C}$ mit den folgenden Eigenschaften: Es ist

- **antilinear** im ersten Argument:

$$\langle \alpha u + \beta v | w \rangle = \alpha^* \langle u | w \rangle + \beta^* \langle v | w \rangle \quad (2.6)$$

Hierbei sind α und β komplexe Zahlen und das „anti“ in antilinear bedeutet, dass α und β beim Herausziehen aus dem linken Teil des Skalarprodukts komplex konjugiert werden müssen.

- **linear** im zweiten Argument:

$$\langle u | \alpha v + \beta w \rangle = \alpha \langle u | v \rangle + \beta \langle u | w \rangle \quad (2.7)$$

- **hermitesch**:

$$\langle u | v \rangle = \langle v | u \rangle^* \quad (2.8)$$

Daraus folgt insbesondere, dass $\langle v | v \rangle$ immer reell ist.

- **positiv definit**:

$$\langle v | v \rangle \geq 0, \quad (2.9)$$

und Gleichheit gilt genau dann, wenn $|v\rangle = 0$.

Ein Hilbert-Raum ist endlichdimensional, wenn eine endliche Anzahl von **Basisvektoren** $|e_i\rangle$, $i = 1, 2, \dots, n$ existiert, so dass sich jeder Vektor als **Linear-**

kombination der $|e_i\rangle$ schreiben lässt,

$$|v\rangle = \sum_{i=1}^n \alpha_i |e_i\rangle. \quad (2.10)$$

Man kann dann $|v\rangle$ als Spaltenvektor $|v^{(e)}\rangle$ bzgl. der gewählten Basis darstellen, mit komplexen Komponenten $|v^{(e)}\rangle_i = \alpha_i$.

$$|v^{(e)}\rangle = \begin{pmatrix} \alpha_1 \\ \vdots \\ \alpha_n \end{pmatrix} \quad (2.11)$$

Ein Satz aus der Linearen Algebra besagt, dass man die $|e_i\rangle$ als **Orthonormalbasis** wählen kann, so dass

$$\langle e_i | e_j \rangle = \delta_{ij}. \quad (2.12)$$

In dem Fall lässt sich das Skalarprodukt durch die Komponenten ausdrücken: Wenn $|u\rangle$ die Komponenten α_i und $|v\rangle$ die Komponenten β_i hat, dann ist

$$\langle u | v \rangle = \left\langle \sum_i \alpha_i e_i \left| \sum_j \beta_j e_j \right. \right\rangle = \sum_{i,j} \alpha_i^* \beta_j \langle e_i | e_j \rangle = \sum_{i,j} \alpha_i^* \beta_j \delta_{ij} = \sum_i \alpha_i^* \beta_i. \quad (2.13)$$

Man beachte die komplexe Konjugation der α_i , die aus der Antilinearität des Skalarprodukts im ersten Argument folgt. Die Orthonormierung in der Form (2.12) und die daraus folgende Gleichung (2.13) beinhaltet automatisch, dass das Skalarprodukt positiv definit ist:

$$\langle v | v \rangle = \sum_{i=1}^n \beta_i^* \beta_i = \sum_{i=1}^n |\beta_i|^2 \geq 0 \quad (2.14)$$

mit Gleichheit genau dann, wenn alle Komponenten 0 sind. Umgekehrt gilt: Nur weil das Skalarprodukt positiv definit ist, konnten wir eine Orthonormalbasis in der Form (2.12) wählen.

Den Wert $\|v\| = \sqrt{\langle v | v \rangle}$ bezeichnen wir als **Norm**, **Betrag** oder **Länge** des Vektors $|v\rangle$. Die Quadratwurzel können wir immer bilden, da das Skalarprodukt positiv definit ist.

Für die Beträge von Vektoren gelten zwei wichtige Ungleichungen, die **Schwarz'sche Ungleichung** und die **Dreiecksungleichung**. Die Schwarz'sche Ungleichung lautet

$$\langle u | v \rangle \langle v | u \rangle \leq \langle u | u \rangle \langle v | v \rangle \quad (2.15)$$

oder, wenn man auf beiden Seiten die Wurzel zieht,

$$|\langle u | v \rangle| \leq \|u\| \|v\|, \quad (2.16)$$

denn $\langle u | v \rangle \langle v | u \rangle = \langle u | v \rangle \langle u | v \rangle^* = |\langle u | v \rangle|^2$. Die Ungleichung bedeutet, dass das Skalarprodukt zweier Vektoren nicht größer sein kann als das Produkt ihrer Beträge. Um sie zu beweisen, nutzen wir, dass der Betrag des Vektors

$$|w\rangle = |u\rangle - \frac{\langle v | u \rangle}{\langle v | v \rangle} |v\rangle \quad (2.17)$$

größer gleich null sein muss:

$$\begin{aligned} 0 &\leq \left\langle u - \frac{\langle v | u \rangle}{\langle v | v \rangle} v \left| u - \frac{\langle v | u \rangle}{\langle v | v \rangle} v \right. \right\rangle \\ &= \langle u | u \rangle - \frac{\langle v | u \rangle \langle u | v \rangle}{\langle v | v \rangle} - \frac{\langle v | u \rangle^* \langle v | u \rangle}{\langle v | v \rangle} + \frac{\langle v | u \rangle^* \langle v | u \rangle \langle v | v \rangle}{\langle v | v \rangle^2} \\ &= \langle u | u \rangle - \frac{\langle v | u \rangle \langle u | v \rangle}{\langle v | v \rangle} \end{aligned}$$

Wenn man den zweiten Term auf die linke Seite bringt und auf beiden Seiten mit $\langle v | v \rangle$ multipliziert, erhält man (2.15). Für den Fall, dass $\langle v | v \rangle = 0$ und (2.17) nicht definiert ist, folgt $|v\rangle = 0$, und (2.15) gilt, weil beide Seiten verschwinden.

Die Dreiecksungleichung lautet

$$||u + v|| \leq ||u|| + ||v||. \quad (2.18)$$

Sie besagt, dass der Betrag der Summe zweier Vektoren nicht größer sein kann als die Summe der Beträge der einzelnen Vektoren. Der Name Dreiecksungleichung kommt daher, dass man sich im Reellen die Vektoren als „Pfeile“ veranschaulichen kann. Wenn man die „Pfeile“ für $|u\rangle$ und $|u + v\rangle$ am selben Punkt beginnen lässt, den „Pfeil“ für $|v\rangle$ hingegen an der Spitze des „Pfeils“ für $|u\rangle$ ansetzt, dann bilden die drei „Pfeile“ ein Dreieck.

Die Dreiecksungleichung wird folgendermaßen bewiesen:

$$\begin{aligned} ||u + v||^2 &= \langle u + v | u + v \rangle \\ &= \langle u | u \rangle + \langle u | v \rangle + \langle v | u \rangle + \langle v | v \rangle \\ &= \langle u | u \rangle + \langle u | v \rangle + \langle u | v \rangle^* + \langle v | v \rangle \\ &= \langle u | u \rangle + 2\operatorname{Re}(\langle u | v \rangle) + \langle v | v \rangle \\ &\leq \langle u | u \rangle + 2|\langle u | v \rangle| + \langle v | v \rangle \\ &\leq \langle u | u \rangle + 2||u|| ||v|| + \langle v | v \rangle \\ &= (||u|| + ||v||)^2 \end{aligned}$$

In der fünften Zeile wurde verwendet, dass der Realteil einer Zahl kleiner gleich ihrem Betrag ist, $\operatorname{Re}(z) \leq |z|$. In der sechsten Zeile wurde die Schwarz'sche Ungleichung angewendet.

Zu jedem Objekt einer quantenmechanischen Messung gehört ein dazu passender Hilbert-Raum. Der Zustand des Objekts – oder unser Wissen darüber (über diesen feinen Unterschied sind sich die Experten uneins, siehe Kap. 4) – wird durch einen Zustand im Hilbert-Raum dargestellt. Ein Zustand im Hilbert-Raum ist, wie eingangs erwähnt, ein **Strahl**, d. h. eine Vektorenmenge der Form $\{\alpha |v\rangle \mid \alpha \in \mathbb{C}\}$ (man kann auch sagen: ein eindimensionaler Unterraum von $\mathcal{H}$). In Worten ausgedrückt: Alle Vektoren, die sich nur um einen komplexwertigen Faktor α unterscheiden, beschreiben denselben Zustand. Der Faktor α lässt sich als Produkt aus Betrag r und Phase $\exp(i\varphi)$ darstellen. Zwei Vektoren $|v_1\rangle$ und $|v_2\rangle$ gehören also zum selben Zustand, wenn

$$|v_2\rangle = \alpha |v_1\rangle = r e^{i\varphi} |v_1\rangle, \quad r, \varphi \in \mathbb{R}. \quad (2.19)$$

Meist wählt man einen **normierten** Vektor als Repräsentanten des Zustands und bezeichnet diesen Vektor selbst als Zustand oder Zustandsvektor. „Normiert“ bedeutet hierbei, dass der Vektor den Betrag 1 hat, $\langle v | v \rangle = 1$.

Ein noch nicht normierter Vektor $|v\rangle$ lässt sich normieren, indem man ihn mit einem **Normierungsfaktor** N multipliziert, $N = 1/||v||$. (Anschaulich: Man dividiert durch die Länge, damit die Länge danach 1 ist.) Denn dann ist

$$\langle Nv | Nv \rangle = N^2 \langle v | v \rangle = \frac{1}{\langle v | v \rangle} \langle v | v \rangle = 1. \quad (2.20)$$

Man beachte, dass der Vektor durch die Normierung noch nicht eindeutig bestimmt ist. Die Normierung legt nur den Betrag, nicht die Phase des Vektors fest. Vektoren, die sich nur um eine Phase unterscheiden, haben denselben Betrag. Anschaulich ist das klar, rechnerisch folgt es aus der Antilinearität des Skalarprodukts im ersten Argument:

$$\langle e^{i\varphi} v | e^{i\varphi} v \rangle = e^{-i\varphi} e^{i\varphi} \langle v | v \rangle = \langle v | v \rangle \quad (2.21)$$

Der einfachste aller Hilbert-Räume ist eindimensional: die Menge $\mathbb{C}$ der komplexen Zahlen selbst. In diesem Hilbert-Raum gibt es nur einen einzigen Zustand, da alle eindimensionalen Vektoren (Zahlen) sich nur um einen komplexen Faktor unterscheiden. Dieser Hilbert-Raum ist äußerst langweilig.

Der einfachste nichttriviale Hilbert-Raum ist zweidimensional, $\mathbb{C}^2$. Wir werden alle neu eingeführten Begriffe am Beispiel von $\mathbb{C}^2$ erläutern.

Im Beispiel $\mathcal{H} = \mathbb{C}^2$ besteht eine Orthonormalbasis aus zwei Vektoren $|e_1\rangle$ und $|e_2\rangle$. Ein Vektor $|v\rangle$ wird durch zwei komplexe Komponenten α_1 und α_2 beschrieben, oder durch vier reelle Zahlen, wenn man $\alpha_1 = x_1 + iy_1$ und $\alpha_2 = x_2 + iy_2$ schreibt.

Die Menge der Zustände erhält man, indem man Vektoren, die sich nur um einen komplexen Faktor unterscheiden, identifiziert. Man sieht leicht ein, dass ein Zustand durch das Verhältnis α_1/α_2 bestimmt ist. Vektoren, die sich nur in Betrag und Phase unterscheiden,

$$\begin{pmatrix} \alpha'_1 \\ \alpha'_2 \end{pmatrix} = r e^{i\varphi} \begin{pmatrix} \alpha_1 \\ \alpha_2 \end{pmatrix}, \quad (2.22)$$

führen zum selben α_1/α_2 , da sich Betrag und Phase beim Dividieren herauskürzen. Umgekehrt gehört zu jedem α_1/α_2 genau ein Zustand. (Einen zusätzlichen Zustand gibt es für $\alpha_2 = 0$, das ist der Zustand mit Zustandsvektor $|e_1\rangle$). Ein Zustand wird also durch eine komplexe Zahl $\lambda = \alpha_1/\alpha_2$ beschrieben oder durch zwei reelle Zahlen, wenn man λ in Real- und Imaginärteil zerlegt.

In der Praxis stellt man Zustände jedoch durch normierte Vektoren dar. Wenn beispielsweise vom Zustand

$$|v\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|e_1\rangle + i|e_2\rangle) \quad (2.23)$$

die Rede ist, dann ist damit der Zustand gemeint, für den der Vektor $|v\rangle$ ein normierter Repräsentant ist. Man sollte dabei im Hinterkopf behalten, dass man z. B. auch

$$|v\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(-i|e_1\rangle + |e_2\rangle) \quad (2.24)$$

hätte wählen können, denn auch dies ist ein normierter Repräsentant des gleichen Zustands, da er sich nur um einen Faktor i (oder $-i$, je nachdem, von welcher Seite man kommt) von der ursprünglichen Wahl unterscheidet.

Bisher haben wir die „umgedrehten“ Vektoren $\langle v|$ nur als Teil unserer Schreibweise des Skalarprodukts $\langle u|v\rangle$ kennengelernt. Man kann sie jedoch auch losgelöst davon betrachten, als Elemente des **Dualraums** $\mathcal{H}^*$ von $\mathcal{H}$. Der Dualraum V^* eines komplexen Vektorraums V ist die Menge aller **Linearformen** auf V , d. h. aller linearen Abbildungen $V \rightarrow \mathbb{C}$. Ein Satz aus der Linearen Algebra besagt, dass V^* selbst ein Vektorraum und im endlichdimensionalen Fall sogar isomorph zu V ist. Man kann nämlich jede Linearform als Skalarprodukt mit einem bestimmten Vektor darstellen, d. h., für jede Linearform λ gibt es einen Vektor $|u\rangle$, so dass für jeden Vektor $|v\rangle \in V$ gilt:

$$\lambda(|v\rangle) = \langle u|v\rangle \quad (2.25)$$

Es ist daher naheliegend, $\langle u|$ statt λ für das Element des Dualraums zu schreiben. Es hat sich die Schreibweise „**Bra-Vektor**“ für $\langle u|$ und „**Ket-Vektor**“ für $|v\rangle$ eingebürgert; zusammen ergeben sie eine „Bracket“ (engl. für Klammer).

Aus der Antilinearität des Skalarprodukts im ersten Argument ergibt sich, dass bzgl. einer Basis $\{|e_i\rangle\}$ die Komponenten des Bra-Vektors im Vergleich zum Ket-Vektor komplex konjugiert sind:

$$|v\rangle = \sum_i \alpha_i |e_i\rangle \iff \langle v| = \sum_i \langle e_i| \alpha_i^* \quad (2.26)$$

Wir können den Ket-Vektor $|v\rangle$ als Spaltenvektor $|v^{(e)}\rangle$ und den Bra-Vektor $\langle u|$ als Zeilenvektor $\langle u^{(e)}|$ bzgl. der Basis $\{|e_i\rangle\}$ darstellen. Wenn es sich dabei um eine Orthonormalbasis handelt, wird das Skalarprodukt wegen (2.13) durch eine

Matrizenmultiplikation ausgedrückt: Mit $|u\rangle = \sum_i \alpha_i |e_i\rangle$ und $|v\rangle = \sum_i \beta_i |e_i\rangle$ ist

$$\langle u | v \rangle = (\alpha_1^* \quad \alpha_2^* \quad \cdots \quad \alpha_n^*) \cdot \begin{pmatrix} \beta_1 \\ \beta_2 \\ \vdots \\ \beta_n \end{pmatrix} = \alpha_1^* \beta_1 + \alpha_2^* \beta_2 + \cdots + \alpha_n^* \beta_n. \quad (2.27)$$

Dabei wurde der Zeilenvektor $\langle u^{(e)}|$ (mit Komponenten $\langle u^{(e)}|_i = \alpha_i^*$) als $1 \times n$ -Matrix, der Spaltenvektor $|v^{(e)}\rangle$ (mit Komponenten $|v^{(e)}\rangle_i = \beta_i$) als $n \times 1$ -Matrix aufgefasst.

Fragen zum Selbstcheck

1. Welche Eigenschaften hat ein Skalarprodukt?
2. Wie viele normierte Zustandsvektoren gibt es, die einen gegebenen Zustand repräsentieren?
3. Was ist ein Bra-Vektor?

2.3 Lineare hermitesche Operatoren

Messungen werden in der QM durch lineare hermitesche Operatoren beschrieben. Ein linearer Operator A ist eine lineare Abbildung

$$\mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}, \quad |v\rangle \rightarrow A |v\rangle. \quad (2.28)$$

Bezüglich einer Basis $\{|e_i\rangle\}$ wird A durch eine Matrix $A^{(e)}$ mit Komponenten $A_{ij}^{(e)}$ dargestellt, d. h., für einen Vektor $|v\rangle = \sum_i \alpha_i |e_i\rangle$ gilt

$$A |v\rangle = \sum_i \left(\sum_j A_{ij}^{(e)} \alpha_j \right) |e_i\rangle, \quad (2.29)$$

d. h., $\sum_j A_{ij}^{(e)} \alpha_j$ ist die i -te Komponente des Vektors $A |v\rangle$,

$$(A^{(e)} |v^{(e)}\rangle)_i = \sum_j A_{ij}^{(e)} |v^{(e)}\rangle_j. \quad (2.30)$$

Die Menge der linearen Operatoren auf $\mathcal{H}$ bildet einen Vektorraum. Das heißt, die Summe zweier linearer Operatoren $A + B$ ist wieder ein linearer Operator, und das Produkt einer komplexen Zahl mit einem linearen Operator λA ist auch wieder ein linearer Operator.

Das Hintereinanderausführen von linearen Abbildungen ist ebenfalls eine lineare Abbildung. Das gilt sowohl für das Hintereinanderausführen zweier linearer Operatoren A und B als auch für das Hintereinanderausführen eines linearen Operators A und einer Linearform $\langle u|$. Im ersten Fall ist das Ergebnis ein Vektor, im zweiten Fall eine komplexe Zahl.

Betrachten wir den zweiten Fall: Die Kombination $(\langle u| A)$ von $\langle u|$ und A ist nach dem eben Gesagten wieder eine Linearform: Sie bildet einen Vektor $|v\rangle$ auf die komplexe Zahl $\langle u| (A |v\rangle)$ ab:

$$(\langle u| A) |v\rangle = \langle u| (A |v\rangle) \quad (2.31)$$

Die Klammerung ist also beliebig:

- Man kann sich vorstellen, dass A zunächst nach *rechts* auf den Ket-Vektor $|v\rangle$ wirkt, wodurch der neue Ket-Vektor $|Av\rangle$ entsteht, und dass anschließend das Skalarprodukt mit $\langle u|$ gebildet wird, $\langle u | Av \rangle$.
- Genauso gut kann man sich vorstellen, dass A zunächst nach *links* auf den Bra-Vektor $\langle u|$ wirkt, wodurch der neue Bra-Vektor (die neue Linearform) $\langle uA|$ entsteht, und dass anschließend das Skalarprodukt mit $|v\rangle$ gebildet wird, $\langle uA | v \rangle$.

Aufgrund dieser Ambiguität schreibt man daher einfach $\langle u | A | v \rangle$.

In Komponenten bzgl. einer Orthonormalbasis $\{|e_i\rangle\}$ ausgedrückt, ergibt sich die gleiche doppelte Sichtweise. Dann ist nach (2.13)

$$\langle u^{(e)} | A^{(e)} v^{(e)} \rangle = \sum_i \langle u^{(e)} |_i | A^{(e)} v^{(e)} \rangle_i = \sum_{i,j} \langle u^{(e)} |_i A_{ij}^{(e)} | v^{(e)} \rangle_j. \quad (2.32)$$

Die rechte Seite lässt sich wieder auf zwei Weisen lesen:

- Der Spaltenvektor $|v^{(e)}\rangle$ wird von links mit der Matrix $A^{(e)}$ multipliziert. Anschließend bildet man das Skalarprodukt von $|u^{(e)}\rangle$ mit dem Ergebnis dieser Multiplikation.
- Der Zeilenvektor $\langle u^{(e)}|$ wird von rechts mit der Matrix $A^{(e)}$ multipliziert. Anschließend bildet man das Skalarprodukt von $|v^{(e)}\rangle$ mit dem Ergebnis dieser Multiplikation.

In einer Orthonormalbasis kann man also auch in der Komponentendarstellung $\langle u^{(e)} | A^{(e)} | v^{(e)} \rangle$ schreiben. Das funktioniert aber nur in einer Orthonormalbasis!

Aufgabe 2.1

- a) Sei $\mathcal{H} = \mathbb{C}^2$ mit Orthonormalbasis $|e_1\rangle, |e_2\rangle$. Ein Operator A sei in dieser Basis gegeben durch die Matrix $A^{(e)} = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$. Außerdem sei $|u\rangle = |e_1\rangle, |v\rangle = |e_2\rangle$. Berechnen Sie $\langle u^{(e)} | A^{(e)} v^{(e)} \rangle$ und $\langle u^{(e)} A^{(e)} | v^{(e)} \rangle$. Beide Ergebnisse sind gleich.

b) Nun definieren wir eine zweite Basis $|f_1\rangle = |e_1\rangle, |f_2\rangle = 2|e_2\rangle$, die zwar orthogonal, aber nicht orthonormal ist, denn es gilt $\langle f_2 | f_2 \rangle = 4$. Wie lauten die Komponenten von $\langle u^{(f)} |, |v^{(f)}\rangle$ und $A^{(f)}$? Wie ist das Skalarprodukt in dieser Basis zu bilden? Zeigen Sie $\langle u^{(f)} | A^{(f)} v^{(f)} \rangle \neq \langle u^{(f)} A^{(f)} | v^{(f)} \rangle$.

Daher ist im Folgenden der Einfachheit halber $\{|e_i\rangle\}$ immer eine Orthonormalbasis.

Zu jedem linearen Operator A gibt es einen **adjungierten** bzw. **hermitesch konjugierten** Operator $A^\dagger$, der dadurch definiert ist, dass seine Wirkung auf einen Bra-Vektor die gleiche ist wie die Wirkung von A auf einen Ket-Vektor:

$$A |u\rangle = |v\rangle \iff \langle u| A^\dagger = \langle v| \quad (2.33)$$

Wie sieht die zugehörige Matrix $A^{\dagger(e)}$ aus? Der Zeilenvektor $\langle u|$ ist im Vergleich zum Spaltenvektor $|u\rangle$ transponiert und komplex konjugiert. Das Gleiche gilt auch für die Matrix $A^{\dagger(e)}$: Sie ist im Vergleich zu $A^{(e)}$ transponiert und komplex konjugiert:

$$A^{\dagger(e)} = A_t^{(e)*} \quad (2.34)$$

Denn aus $|v^{(e)}\rangle_i = \sum_j A_{ij}^{(e)} |u^{(e)}\rangle_j$ folgt

$$\langle v^{(e)} |_i = |v^{(e)}\rangle_i^* = \sum_j A_{ij}^{(e)*} |u^{(e)}\rangle_j^* = \sum_j \langle u^{(e)} |_j (A_t^{(e)})_{ji}^*, \quad (2.35)$$

also

$$A_{ji}^{(e)\dagger} = \left(A_t^{(e)} \right)_{ji}^* = A_{ij}^{(e)*}. \quad (2.36)$$

(Da es sich bei $\langle u^{(e)} |$ um einen Zeilenvektor handelt, muss die Matrix immer rechts davon stehen, sonst macht die Matrixmultiplikation keinen Sinn.)

Das Produkt AB zweier linearer Operatoren A und B ist durch die Hintereinanderausführung definiert:

$$(AB) |v\rangle = A(B |v\rangle), \quad \langle u| (AB) = (\langle u| A) B. \quad (2.37)$$

Wie bereits erwähnt, ist AB wieder ein linearer Operator. Die Hintereinanderausführung als Produkt zu bezeichnen, ist durch die zugehörigen Matrizen motiviert: Die Matrix von AB ist das Produkt der Matrizen von A und B .

Aufgabe 2.2

Zeigen Sie $(AB)^{(e)} = A^{(e)} B^{(e)}$.

Für adjungierte Operatoren gilt eine Reihe von wichtigen Relationen:

$$(A^\dagger)^\dagger = A, \quad (2.38)$$

$$(\lambda A)^\dagger = \lambda^* A^\dagger, \quad \lambda \in \mathbb{C}, \quad (2.39)$$

$$(A + B)^\dagger = A^\dagger + B^\dagger, \quad (2.40)$$

$$(AB)^\dagger = B^\dagger A^\dagger. \quad (2.41)$$

Analoge Beziehungen gelten für die zugehörigen Matrizen. Man beachte die umgekehrte Reihenfolge in der letzten Beziehung. Sie kommt daher, dass in (2.37) bei der Anwendung auf einen Ket-Vektor der rechte Operator zuerst wirkt, bei Anwendung auf einen Bra-Vektor zuerst der linke. Aus (2.33) folgt dann

$$A(B|u) = |v\rangle \iff (u|B^\dagger)A^\dagger = \langle v|. \quad (2.42)$$

Für Matrizen ist die umgekehrte Reihenfolge ebenfalls leicht zu zeigen: Wenn $C = AB$, also $C_{ik} = \sum_j A_{ij} B_{jk}$, dann ist

$$C_{ik}^\dagger = C_{ki}^* = \sum_j A_{kj}^* B_{ji}^* = \sum_j B_{ji}^* A_{kj}^* = \sum_j B_{ij}^\dagger A_{jk}^\dagger = (B^\dagger A^\dagger)_{ik}. \quad (2.43)$$

Hierbei haben wir der Übersichtlichkeit halber das Superskript (e) weggelassen. Das werden wir auch in Zukunft so handhaben: Wenn keine Missverständnisse oder Verwechslungen zu befürchten sind, werden wir einen Operator mit seiner Matrix bzgl. einer gegebenen Orthonormalbasis identifizieren.

Ein linearer Operator heißt **hermitesch**, wenn $A^\dagger = A$. Zuvor hatten wir den Ausdruck „hermitesch“ anders definiert: Wir hatten gesagt, ein Operator sei hermitesch, wenn er nur reelle Eigenwerte besitzt und der Hilbert-Raum eine Orthonormalbasis aus Eigenvektoren besitzt. Die erste dieser Eigenschaften ist notwendig dafür, dass man nur diese Operatoren als Observable nutzen kann, denn Messwerte sind nun einmal reell. Etwas weiter unten werden wir sehen, dass die beiden Definitionen äquivalent sind.

Die Summe zweier hermitescher Operatoren ist wieder hermitesch. Das Produkt λA einer komplexen Zahl λ mit einem hermiteschen Operator A ist aber aufgrund von (2.39) nur dann hermitesch, wenn $\lambda \in \mathbb{R}$. Die hermiteschen Operatoren bilden also nur einen reellen, keinen komplexen Vektorraum.

Das Produkt zweier hermitescher Operatoren A, B ist aufgrund von (2.41) nur dann hermitesch, wenn A und B **kommutieren**, d. h. wenn $AB = BA$.

Für die Komponenten der Matrix $A^{(e)}$ (bzgl. einer Orthonormalbasis $\{|e_i\rangle\}$) eines hermiteschen Operators A gilt wegen (2.36):

$$A_{ij}^{(e)} = A_{ji}^{(e)*} \quad (2.44)$$

Eine Matrix mit dieser Eigenschaft heißt ebenfalls hermitesch. Insbesondere sind die Diagonaleinträge von $A^{(e)}$ reell. Da die Hermitezität auf Operatorebene definiert wurde, ist die Eigenschaft (2.44) unabhängig von der konkreten Wahl einer

Orthonormalbasis. Das heißt beim Wechsel in eine andere Orthonormalbasis $\{|f_i\rangle\}$ ist die neue Matrix $A^{(f)}$ wieder hermitesch. Das funktioniert aber nur für Orthonormalbasen!

Aufgabe 2.3

Sehen Sie sich die Transformation in Aufgabe 2.1 noch einmal an. Hier wird aus der hermiteschen Matrix $A^{(e)}$ die nichthermitesche Matrix $A^{(f)}$ gemacht!

Das hängt wieder mit dem bei Nicht-Orthonormalbasen bestehenden Unterschied zwischen einer nach rechts auf einen Ket-Vektor und einer nach links auf einen Bra-Vektor wirkenden Matrix zusammen, siehe Aufgabe 2.1.

Ein linearer Operator heißt **antihermitesch**, wenn $A^\dagger = -A$. Wenn A hermitesch ist, dann ist iA antihermitesch. Jeder lineare Operator A kann als Summe eines hermiteschen Operators A_h und eines antihermiteschen Operators A_a geschrieben werden:

$$A = A_h + A_a, \quad A_h = \frac{A + A^\dagger}{2}, \quad A_a = \frac{A - A^\dagger}{2}. \quad (2.45)$$

Im Beispiel $\mathcal{H} = \mathbb{C}^2$ ist eine hermitesche Matrix durch vier unabhängige reelle Komponenten bestimmt. Sie ist nämlich von der Form

$$A = \begin{pmatrix} a & b + ci \\ b - ci & d \end{pmatrix}, \quad a, b, c, d \in \mathbb{R}. \quad (2.46)$$

A lässt sich demnach als reelle Linearkombination der Einheitsmatrix

$$\mathbf{1} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \quad (2.47)$$

und der drei **Pauli-Matrizen**

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \quad (2.48)$$

schreiben:

$$A = \frac{a+d}{2} \mathbf{1} + b\sigma_x - c\sigma_y + \frac{a-d}{2} \sigma_z. \quad (2.49)$$

Fragen zum Selbstcheck

1. Was bedeutet die Schreibweise $\langle u | A | v \rangle$? Wieso ist sie ohne Klammern sinnvoll?
2. Was ist der zum Operator A adjungierte Operator $A^\dagger$?
3. Was ist ein hermitescher Operator? Was ist eine hermitesche Matrix?

Tutorium Quantenmechanik
von einem erfahrenen Tutor – für Physik- und
Mathematikstudenten

Schwindt, J.-M.

2016, XIII, 376 S. 25 Abb., Softcover

ISBN: 978-3-662-49398-4