1 Der mathematische Rahmen

Es ist die Aufgabe der Quantentheorie – genau wie die jeder anderen physikalischen Theorie – das Ergebnis von Experimenten vorherzusagen und diese Prognose zu begründen. Dazu muss man den Zustand des physikalischen Systems zu Beginn eines Experiments beschreiben, man muss die Entwicklung des Systems während des Experiments formulieren und das Ergebnis einer Wechselwirkung mit dem Messapparat vorhersagen können. Der mathematische Rahmen, der sich für die Formulierung der Quantentheorie bewährt hat, ist die Theorie des Hilbert-Raums und die Wahrscheinlichkeitstheorie. Die fundamentale Verknüpfung zwischen mathematischen Größen und physikalischer Realität wird dabei über die folgenden Zuordnungen etabliert:

Quantensystem	$\leftrightarrow$	Hilbert-Raum
Quantenzustand	$\leftrightarrow$	Vektor im oder Operator auf dem Hilbert-Raum
Entwicklung des Quantenzustands	$\leftrightarrow$	Lineare Operatoren, die auf den Vektoren wirken bzw. lineare Operatoren, die auf den Raum der Operatoren (Liouville-Raum) wirken.
Prognosen	$\leftrightarrow$	Wahrscheinlichkeitstheoretische Aussagen.

Wir werden dieses Grundschema der Quantentheorie noch im Einzelnen darstellen. In diesem Kapitel sollen zunächst die benötigten Definitionen und Sätze zusammengestellt werden. Dabei werden wir nicht alle mathematischen Sätze beweisen. Insbesondere werden wir voraussetzen, dass der Leser schon einmal Kontakt mit der Quantentheorie hatte, sodass die Darstellung knapp gehalten werden kann.

Da wir durchweg d-Niveau-Quantensysteme ($d = 2, 3, \ldots$) untersuchen werden, wollen wir eine stark vereinfachende Einschränkung machen:

> ***Mathematische Generalvoraussetzung*: *Wir betrachten Quantensysteme, die mit Hilfe eines* endlich-dimensionalen *Hilbert-Raums $\mathcal{H}_d$ der Dimension $d = 2, 3, \ldots$ beschrieben werden können.***

Die Einschränkung ist gerechtfertigt, weil die wesentlichen begrifflichen Probleme sowie die neuen Konzepte und zentralen Methoden bereits mit Bezug auf einen endlich-dimensionalem Hilbert-Raum eingeführt werden können. Wir wollen den konzeptionellen physikalischen Problemen nicht noch mathematische Subtilitäten hinzufügen. Für die meisten physikalisch relevanten Fällen, die eine Beschreibung im unendlich-dimensionalen Hilbert-Raum erfordern, lassen sich die Ergebnisse für endlich-dimensionale Räume direkt übertragen.

Wie in der theoretischen Physik üblich, werden wir die *Dirac-Schreibweise* benutzen. In diesem Rahmen ist es günstig, die dyadische Zerlegung von Operatoren in den Mittelpunkt

Verschränkte Systeme: Die Quantenphysik auf neuen Wegen. Jürgen Audretsch

ISBN: 3-527-40452-X

der Behandlung zu stellen. Sie ist für praktische Anwendungen wichtig, da sie ein einfaches direktes Ablesen von Operatoreigenschaften und Operatorwirkungen erlaubt.

1.1 Hilbert-Raum der Vektoren

1.1.1 Skalarprodukt, Dirac-Schreibweise

Ein d-dimensionaler Hilbert-Raum $\mathcal{H}_d$, wie er in der Quantentheorie verwendet wird, ist ein linearer Vektorraum über dem Körper der komplexen Zahlen $\mathbb{C}$, auf dem ein Skalarprodukt definiert ist. Die Vektoren bezeichnen wir durch $|\varphi\rangle$, $|\psi\rangle$, $|u\rangle$, $|\Phi\rangle$ usw., $|\text{Null}\rangle$ ist der Nullvektor.

Addition, Multiplikation mit einer komplexen Zahl, lineare Unabhängigkeit, Basis und Dimension des Hilbert-Raums $\mathcal{H}_d$ sind analog zu den Begriffen in reellen Vektorräumen definiert.

Je zwei Vektoren $|\varphi\rangle$ und $|\psi\rangle$ ist als *Skalarprodukt*(scalar product) oder *inneres Produkt* (inner product) eine komplexe Zahl zugeordnet, die wir in der Form $\langle\varphi|\psi\rangle$ schreiben. Als Grundlage für diese *Dirac-Schreibweise*[1] (Dirac notation) haben wir einen *Ket-Raum* mit den *Ket-Vektoren* $|\varphi\rangle, |\psi\rangle, \ldots$ und den hierzu dualen Vektorraum der *Bra-Vektoren* $\langle\chi|, \langle\theta|, \ldots$ eingeführt (Raum der linearen Funktionale). Es ist eine Korrespondenz zwischen den Vektoren des Ket- und des Bra-Raum erklärt (wir verwenden das gleiche Kernsymbol).

$$|\varphi\rangle \overset{d.K.}{\leftrightarrow} \langle\varphi| \,, \tag{1.1}$$

die *duale Korrespondenz* (dual correspondence) genannt wird. Dabei wird dem Ket-Vektor $|\varphi\rangle = c_1|\varphi_1\rangle + c_2|\varphi_2\rangle$ eineindeutig der Bra-Vektor $\langle\varphi| = c_1^*\langle\varphi_1| + c_2^*\langle\varphi_2|$ zugeordnet ($*$ bedeutet konjugiert komplex). Die Reihenfolge im Produkt $\langle\varphi|\psi\rangle$ ist daher wichtig. Es gilt:

$$\begin{aligned} &\langle\varphi|\psi\rangle = \langle\psi|\varphi\rangle^* \\ &\langle\varphi|c_1\psi_1 + c_2\psi_2\rangle = c_1\langle\varphi|\psi_1\rangle + c_2\langle\varphi|\psi_2\rangle \,, \quad c_1, c_2 \in \mathbb{C} \\ &\langle\varphi|\varphi\rangle \geq 0 \quad \forall\,|\varphi\rangle \in \mathcal{H}_n \,, (\langle\phi|\phi\rangle = 0 \Leftrightarrow |\varphi\rangle = |\text{Null}\rangle) \,. \end{aligned} \tag{1.2}$$

Daraus folgt

$$\langle c_1\varphi_1 + c_2\varphi_2|\psi\rangle = c_1^*\langle\varphi_1|\psi\rangle + c_2^*\langle\varphi_2|\psi\rangle \,. \tag{1.3}$$

Das Skalarprodukt ist linear im zweiten Argument und *antilinear* im ersten Argument. Falls $\langle\varphi|\psi\rangle = 0$ gilt, werden die Vektoren als zueinander *orthogonal* (orthogonal) bezeichnet.

Durch das Produkt wird auf dem Hilbert-Raum eine *Norm* (norm) gemäß

$$\|\varphi\| =: \||\varphi\rangle\| := \sqrt{\langle\varphi|\varphi\rangle} \tag{1.4}$$

induziert. Sie verschwindet genau dann, wenn $|\varphi\rangle$ der Nullvektor ist. Wir erwähnen ohne Beweis die *Schwarzsche Ungleichung*

$$|\langle\varphi|\psi\rangle| \;\leq\; \|\varphi\|\,\|\psi\| \tag{1.5}$$

[1] Nach Dirac wird das Skalarprodukt $\langle\varphi|\psi\rangle$ geschrieben und „bracket“ genannt. Die Bestandteile „bra“ $\langle\varphi|$ und „ket“ $|\psi\rangle$ haben eine eigenständige Bedeutung

und die *Dreiecksungleichungen*

$$\|\varphi\| - \|\psi\| \;\leq\; \|\psi - \varphi\| \;, \qquad \|\varphi + \psi\| \;\leq\; \|\varphi\| + \|\psi\| \;. \tag{1.6}$$

Durch Einsetzen bestätigt man

$$\langle\varphi|\psi\rangle = \frac{1}{4}\left(\|\varphi+\psi\|^2 - \|\varphi-\psi\|^2 + i\,\|\varphi - i\psi\|^2 - i\,\|\varphi + i\psi\|^2\right) \tag{1.7}$$

sowie die *Parallelogrammgleichung*

$$\|\varphi+\psi\|^2 + \|\varphi-\psi\|^2 = 2\,\|\varphi\|^2 + 2\,\|\psi\|^2 \;. \tag{1.8}$$

Für einen Satz $\{|\varphi_1\rangle, |\varphi_2\rangle, \ldots, |\varphi_l\rangle\}$ von Vektoren aus $\mathcal{H}_d$ wird durch span$(|\varphi_1\rangle, \ldots, |\varphi_l\rangle)$ die Menge aller möglichen Linearkombinationen dieser Vektoren bezeichnet. Diese Menge bildet einen Unterraum von $\mathcal{H}_d$, der ebenfalls ein Hilbert-Raum ist. Wir bezeichnen eine *orthonormale Basis* (orthonormal basis) mit *ONB*. Für eine ONB $\{|i\rangle, i = 1, \ldots, d\}$ gilt die Identität

$$|\varphi\rangle = \sum_{i=1}^{d} |i\rangle\langle i|\varphi\rangle \tag{1.9}$$

mit den *Komponenten* $\langle i|\varphi\rangle$ des Vektors $|\varphi\rangle$ bezüglich der ONB. Zu einem Unterraum $\hat{\mathcal{H}}$ von $\mathcal{H}$ bildet die Menge aller Vektoren $|\psi\rangle$, die zu allen Vektoren $|\chi\rangle \in \hat{\mathcal{H}}$ orthogonal sind ($\langle\psi|\chi\rangle$=0), einen weiteren Unterraum von $\mathcal{H}$, der das *orthogonale Komplement*(orthogonal complement) $\hat{\mathcal{H}}^\perp$ genannt wird. Die direkte Summe beider Unterräume ist wieder der Hilbert-Raum $\mathcal{H} = \hat{\mathcal{H}} \oplus \hat{\mathcal{H}}^\perp := \{\alpha|\chi\rangle + \beta|\psi\rangle$ mit $|\chi\rangle \in \hat{\mathcal{H}},\ |\psi\rangle \in \hat{\mathcal{H}}^\perp$ und $\alpha, \beta \in \mathbb{C}\}$.

1.1.2 Lineare Operatoren auf dem Hilbert-Raum

Lineare Operatoren(linear operators) $A, B, \ldots$ bilden Ket-Vektoren in linearer Weise aufeinander ab

$$\begin{aligned}
A(\alpha|\psi\rangle + \beta|\phi\rangle) &= \alpha A|\psi\rangle + \beta A|\phi\rangle && \text{Linearität}\\
(A+B)|\psi\rangle &= A|\psi\rangle + B|\psi\rangle && \text{Summe}\\
(AB)|\psi\rangle &= A(B|\psi\rangle) && \text{Produkt}\\
A|\psi_a\rangle &= a|\psi_a\rangle && \textit{Eigenvektor}\text{ (eigenvector) } |\psi_a\rangle \text{ von } A\\
& && \textit{Eigenwert}\text{ (eigenvalue) } a \text{ von } A\\
\mathbb{1}|\psi\rangle &= |\psi\rangle && \textit{Identitätsoperator, Einsoperator}\\
& && \text{(identity operator).}
\end{aligned} \tag{1.10}$$

$(\alpha, \beta \in \mathbb{C})$. Für den Identitätsoperator $\mathbb{1}$ gilt $\mathbb{1}|\psi\rangle = |\psi\rangle$ für alle $|\psi\rangle$ aus $\mathcal{H}_d$. Der Definitionsbereich von A muss nicht der gesamte Hilbert-Raum sein und der Wertebereich muss nicht mit dem Definitionsbereich übereinstimmen. Wenn nötig, weisen wir darauf hin. Für den *inversen Operator* (invers operator) A^{-1} gilt $AA^{-1} = A^{-1}A = \mathbb{1}$.

Wir wollen die Dirac-Schreibweise weiter ausbauen und vereinbaren, dass Operatoren auf dem Bra-Raum von rechts auf die Bra-Vektoren wirken sollen:

$$\langle\varphi'| = \langle\varphi|B =: |B\varphi\rangle \ . \tag{1.11}$$

Die Operatoren auf dem Ket-Raum wirken entsprechend von links. Wir schreiben für den resultierenden Vektor

$$|\psi'\rangle = A|\psi\rangle =: |A\psi\rangle \ . \tag{1.12}$$

Dem Ket-Vektor $|\psi'\rangle$ entspricht über die duale Korrespondenz (1.1) ein Bra-Vektor $\langle\psi'|$

$$|\psi'\rangle \overset{d.K.}{\leftrightarrow} \langle\psi'| = \langle A\psi| \ . \tag{1.13}$$

Wir führen noch zusätzlich eine duale Korrespondenz für Operatoren ein. In der Dirac-Schreibweise wird der zum Ket-Operator A korrespondierende Bra-Operator ebenfalls mit demselben Symbol A bezeichnet und durch folgende Bedingung an die Skalarprodukte festgelegt (erste Gleichung):

$$(\langle\varphi|A)|\psi\rangle = \langle\varphi|(A|\psi\rangle) =: \langle\varphi|A|\psi\rangle \ . \tag{1.14}$$

Die zweite Gleichung ist eine für die Dirac-Schreibweise charakteristische geschickte Abkürzung.

Adjungierter Operator Die duale Korrespondenz für Vektoren ordnet dem Ket-Vektor $|\psi\rangle$ einen Bra-Vektor $\langle\psi|$ zu und dem Ket-Vektor $|\psi'\rangle$ einen Bra-Vektor $\langle\psi'|$:

$$\langle\psi| \overset{d.K.}{\leftrightarrow} |\psi\rangle \tag{1.15}$$

$$\langle\psi'| = \langle A\psi| \overset{d.K.}{\leftrightarrow} |\psi'\rangle = |A\psi\rangle \ . \tag{1.16}$$

Hiervon ausgehend definieren wir einen zu einem Operator A im Ket-Raum *adjungierten Operator* (adjoint operator) $A^\dagger$ im Bra-Raum, der die linken Seiten der Gl. (1.15) und (1.16) verknüpft und $\langle\psi|$ auf $\langle\psi'|$ abbildet:

$$\langle\psi'| = \langle A\psi| =: \langle\psi|A^\dagger \ . \tag{1.17}$$

Bei der dualen Schreibweise von Operatoren wird sich diese Relation als nützlich erweisen.

Über die duale Korrespondenz der Operatoren ist damit aber wiederum ein Ket-Operator $A^\dagger$ eingeführt. Wir werten $\langle\psi'|\varphi\rangle$ mit Gl. (1.17) und (1.14) aus.

$$\langle A\psi|\varphi\rangle = (\langle\psi|A^\dagger)|\varphi\rangle = \langle\psi|(A^\dagger|\varphi\rangle) = \langle\psi|A^\dagger\varphi\rangle = \langle\psi|A^\dagger|\varphi\rangle \tag{1.18}$$

und fassen zusammen

$$\langle A\psi|\varphi\rangle = \langle\psi|A^\dagger\varphi\rangle = \langle\psi|A^\dagger|\varphi\rangle \ . \tag{1.19}$$

Mit $\langle\varphi|\psi\rangle = \langle\psi|\varphi\rangle^*$ folgt aus Gl. (1.19)

$$\langle\psi|A^\dagger|\varphi\rangle = \langle\varphi|A\psi\rangle^* = \langle\varphi|A|\psi\rangle^* \, . \tag{1.20}$$

Zweifache Anwendung der Gl. (1.20) ergibt

$$\langle\varphi|A|\psi\rangle = (\langle\varphi|A|\psi\rangle^*)^* = \langle\psi|A^\dagger|\varphi\rangle^* = \langle\varphi|(A^\dagger)^\dagger|\psi\rangle \tag{1.21}$$

für beliebige Vektoren $\langle\varphi|$ und $\langle\psi|$. Daher gilt

$$(A^\dagger)^\dagger = A \tag{1.22}$$

und wir erhalten die der Gl. (1.19) entsprechende Relation

$$\langle A^\dagger\psi|\varphi\rangle = \langle\psi|A\varphi\rangle = \langle\psi|A|\varphi\rangle \, . \tag{1.23}$$

In ähnlicher Weise überzeugt man sich leicht von der Gültigkeit der folgenden Operatorrelationen:

$$\left(A^{-1}\right)^\dagger = \left(A^\dagger\right)^{-1} \, , \quad (cA)^\dagger = c^* A^\dagger \tag{1.24}$$

$$(A+B)^\dagger = A^\dagger + B^\dagger \, , \quad (AB)^\dagger = B^\dagger A^\dagger \, . \tag{1.25}$$

Neben der Definition (1.17) werden die Gleichungen (1.22) und (1.23) häufig verwendet.

Dyadische Zerlegung Aus zwei Vektoren $|u\rangle$ und $|v\rangle$ können wir das *dyadische Produkt* (outer product) oder die *Dyade* (dyad) $|u\rangle\langle v|$ bilden. Sie ist ein linearer Operator

$$|\varphi\rangle \to |\psi\rangle = |u\rangle\langle v|\varphi\rangle \, ,$$

der in einen Vektor parallel zu $|u\rangle$ überführt. Dabei gilt

$$(\alpha|u\rangle\langle v|)^\dagger = \alpha^*|v\rangle\langle u| \, . \tag{1.26}$$

Für Operatorprodukte finden wir

$$A|u\rangle\langle v| = |Au\rangle\langle v| \, , \qquad |u\rangle\langle v|A = |u\rangle\langle A^\dagger v| \, . \tag{1.27}$$

Wir haben in Gl. (1.9) gesehen, dass sich mit Hilfe einer ONB $\{|i\rangle, i = 1, \ldots, d\}$ des Hilbert-Raums der Identitätsoperator dyadisch darstellen lässt:

$$\mathbb{1} = \sum_i |i\rangle\langle i| \, . \tag{1.28}$$

Man nennt dies auch eine *Vollständigkeitsrelation* (completeness relation) oder die *dyadische Zerlegung des Identitätsoperators* (resolution of the identity). Es folgt unmittelbar, dass jeder lineare Operator eine *dyadische Zerlegung* (Äußere-Produkt-Darstellung)

$$A = \sum_{i,j} |i\rangle\langle i|A|j\rangle\langle j| = \sum_{i,j} \langle i|A|j\rangle|i\rangle\langle j| = \sum_{i,j} A_{ij}|i\rangle\langle j| \tag{1.29}$$

mit den *Matrixelementen* $A_{ij} := \langle i|A|j\rangle$ besitzt. Für den adjungierten Operator ergibt sich

$$A^\dagger = \sum_{i,j} A^*_{ij}|j\rangle\langle i| \ . \tag{1.30}$$

Über die *Supremumsnorm* $\|A\|$ kann man einem linearen Operator A eine positive Zahl zuordnen

$$\|A\| := \max_{\langle\varphi|\varphi\rangle=1} |\langle\varphi|A|\varphi\rangle| \ . \tag{1.31}$$

Spur Die *Spur* (trace) ist eine sehr häufig gebrauchte komplexwertige Funktion eines linearen Operators:

$$\mathrm{tr}[A] := \sum_i \langle i|A|i\rangle = \sum_i A_{ii} \ , \quad \{|i\rangle\}\ \text{ONB} \ . \tag{1.32}$$

Die Spur eines Operators ist unabhängig von der Wahl der Basis. Der Beweis demonstriert die Nützlichkeit der dyadischen Zerlegung (1.28) des Identitätsoperators. Seien $\{|l_i\rangle\}$ und $\{|m_j\rangle\}$ beliebige ONB, dann gilt:

$$\begin{aligned}
\mathrm{tr}[A] &= \sum_i \langle l_i|A|l_i\rangle = \sum_{i,j,k} \langle l_i|m_j\rangle\langle m_j|A|m_k\rangle\langle m_k|l_i\rangle \\
&= \sum_{i,j,k} \langle m_k|l_i\rangle\langle l_i|m_j\rangle\langle m_j|A|m_k\rangle = \sum_{j,k} \langle m_k|m_j\rangle\langle m_j|A|m_k\rangle \\
&= \sum_j \langle m_j|A|m_j\rangle \ .
\end{aligned} \tag{1.33}$$

In ähnlicher Weise beweist man mit Hilfe von Gl. (1.28) die folgenden Eigenschaften der Spur:

$$\begin{aligned}
\mathrm{tr}[AB] &= \mathrm{tr}[BA] && \text{zyklische Vertauschung} \\
\mathrm{tr}[A+B] &= \mathrm{tr}[A] + \mathrm{tr}[B] && \text{Linearität} \\
\mathrm{tr}[\alpha A] &= \alpha\, \mathrm{tr}[A] && \text{Linearität} \\
\mathrm{tr}[A|\psi\rangle\langle\psi|] &= \langle\psi|A|\psi\rangle && \text{Erwartungswert von } A \\
\mathrm{tr}[|\varphi\rangle\langle\psi|] &= \langle\varphi|\psi\rangle && \text{Spur einer Dyade} \\
\mathrm{tr}[A^\dagger] &= (\mathrm{tr}[A])^* && \text{adjungierter Operator}
\end{aligned} \tag{1.34}$$

Die physikalische Bezeichnung *Erwartungswert* (expectation value) von A wird später gerechtfertigt.

1.1.3 Normale Operatoren und spektrale Zerlegung

Unter den linearen Operatoren auf $\mathcal{H}_d$ spielen die diagonalisierbaren oder *normalen Operatoren* (normal operators) mathematisch und physikalisch eine herausragende Rolle. Ein Operator N heißt *diagonalisierbar*, wenn es eine ONB $\{|i\rangle\}$ von $\mathcal{H}_d$ und komplexe Zahlen $\lambda_i \in \mathbb{C}$

gibt, so dass

$$N|i\rangle = \lambda_i|i\rangle \tag{1.35}$$

gilt. Dabei ist $\lambda_i = 0$ nicht ausgeschlossen. Als unmittelbare Folge ergibt sich, dass die Matrix von N in der ONB der Eigenvektoren diagonal ist

$$N_{ij} = \langle i|N|j\rangle = \lambda_i\delta_{ij} \tag{1.36}$$

und sich der Operator A in der Form der *spektralen Zerlegung* (spectral decomposition)

$$N = \sum_i \lambda_i|i\rangle\langle i| \tag{1.37}$$

schreiben lässt. Sie heißt auch *orthogonale Zerlegung* (orthogonal decomposition). Die ONB $\{|i\rangle\}$ von Gl. (1.35) wird auch *Eigenbasis* (eigenbasis) von N genannt. Umgekehrt folgt aus jeder dieser Relationen direkt die Erfüllung der Diagonalisierbarkeitsbedingung (1.35).

Gehören zu einem Eigenwert λ_i des Eigenwertproblems (1.35) $g \geq 2$ linear unabhängige Eigenvektoren, so heißt λ_i *g-fach entartet* (degenerate). Jede Linearkombination dieser Eigenvektoren

$$|\psi\rangle = \sum_{i=1}^{g} c_i|i\rangle \tag{1.38}$$

ist dann ebenfalls Eigenvektor zum Eigenwert a. Die Eigenvektoren spannen einen g-dimensionalen Unterraum $\mathcal{H}_{(a)}$ von $\mathcal{H}$ auf. Der *Projektor*

$$P = \sum_{i=1}^{g} |i\rangle\langle i|\,; \quad P^\dagger = P\,; \quad P^2 = P \tag{1.39}$$

projiziert in den Unterraum $\mathcal{H}_{(a)}$.Der Projektor $Q = 1 - P$ projiziert in das orthogonale Komplement von $\mathcal{H}_{(a)}$.

Diagonalisierbarkeit ist keine trivialerweise vorliegende Eigenschaft. Bereits im zweidimensionalen Hilbert-Raum $\mathcal{H}_2$ gibt es vielfach gebrauchte Operatoren, die nicht diagonalisierbar sind. Ein Beispiel ist

$$A = |0\rangle\langle 1| \quad \text{mit} \quad \langle 0|1\rangle = 0 \quad \text{und} \quad \langle 0|0\rangle = \langle 1|1\rangle = 1 \tag{1.40}$$

wie mit dem nachfolgenden Satz gezeigt werden kann.

Um zu erkennen, ob ein gegebener Operator ein normaler Operator ist, ist der folgende zentrale Satz sehr nützlich: *Notwendig und hinreichend dafür, dass es für einen Operator N eine spektrale Zerlegung gibt – dass er also diagonalisierbar ist – ist das Verschwinden des Kommutators ($[A, B]_- := AB - BA$) von N und $N^\dagger$:*

$$[N, N^\dagger]_- = 0\,. \tag{1.41}$$

Der Beweis kann als Anwendungsbeispiel für den bisher aufgebauten Formalismus dienen. Dass aus der Diagonalisierbarkeit die Gl. (1.41) folgt, ist offensichtlich. Die andere Richtung des Beweises zerlegen wir in zwei Schritte:

1. Schritt: Jeder Operator in $\mathcal{H}_n$ hat zumindest einen Eigenwert λ und einen Eigenvektor $|1\rangle$, die sich mit Hilfe der Säkulargleichung ergeben.

$$N|1\rangle = \lambda|1\rangle\,, \quad \langle 1|N^\dagger = \lambda^*\langle 1|\,. \tag{1.42}$$

Daraus folgt

$$\langle 1|N|1\rangle = \lambda\,, \quad \langle 1|N^\dagger|1\rangle = \lambda^* \tag{1.43}$$

und damit

$$N^\dagger|1\rangle = \lambda^*|1\rangle + |a\rangle\,, \quad \langle 1|N = \lambda\langle 1| + \langle a| \tag{1.44}$$

mit $\langle 1|a\rangle = 0$. Mit Normalitätsbedingung $[N, N^\dagger]_- = 0$ ergibt sich nach Auswertung mit Gl. (1.42) und (1.44)

$$0 = \langle 1|[N, N^\dagger]_-|0\rangle = \langle a|a\rangle\,. \tag{1.45}$$

$|a\rangle$ ist somit der Nullvektor $|\text{Null}\rangle$ und (1.44) lässt sich folgendermaßen schreiben

$$N^\dagger|1\rangle = \lambda^*|1\rangle\,, \quad \langle 1|N = \lambda\langle 1|\,. \tag{1.46}$$

Wir kennen damit die Wirkung von N und $N^\dagger$ auf $|1\rangle$.

2. Schritt: Wir ergänzen $|1\rangle$ zu einer ONB $\{|i\rangle\}$ und führen mit Hilfe der dualen Schreibweise von N

$$N = \sum_{ij} n_{ij}|i\rangle\langle j|, \quad n_{ij} := \langle i|N|j\rangle, \quad n_{1i} = n_{i1} = \lambda\delta_{i1} \tag{1.47}$$

den Operator M ein:

$$M := N - \lambda|1\rangle\langle 1|\,, \quad M = \sum_{i,j\neq 1} n_{ij}|i\rangle\langle j|\,. \tag{1.48}$$

M ist die Einschränkung von N auf das orthogonale Komplement von $|1\rangle$.

Mit Hilfe von Gl. (1.42) und (1.46) können wir zeigen, dass auch M ein normaler Operator ist ($[M, M^\dagger]_- = 0$). Für ihn lässt sich auf dem zu $|1\rangle$ senkrechten Unterraum das gleiche Verfahren anwenden. Auch M hat einen Eigenvektor, den wir $|2\rangle$ nennen. Wir ergänzen $|1\rangle$ und $|2\rangle$ zu einer ONB und wiederholen die Prozedur. So fahren wir fort bis der ganze Hilbert-Raum ausgeschöpft ist und $|1\rangle$ zu einer wohlbestimmten ONB ergänzt wurde. Zugleich wird dadurch N bezüglich dieser Basis spektral zerlegt. Das schließt den Beweis ab.

Das Diagramm in Abb. 1.1 demonstriert wie den verschiedenen Eigenschaften der Operatoren im Hilbert-Raum eine zunehmende Spezialisierung in der dyadischen Zerlegung entspricht. Wir werden im Folgenden im Diagramm Schritt für Schritt nach unten gehen.

linearer Operator (bi-orthogonale Entwicklung,
$L = \sum_i \lambda_i |l_i\rangle\langle r_i|$ mit ONB $\{|l_i\rangle\}$ und ONB $\{|r_i\rangle\}$, $\lambda_i \in \mathbb{C}$)

$\downarrow$

normaler Operator (diagonalisierbar, $N = \sum_i \lambda_i |i\rangle\langle i|$, mit ONB $\{|i\rangle\}$, $\lambda_i \in \mathbb{C}$)

„reell“

hermitescher Operator ($\lambda_i \in \mathbb{R}$)

$\downarrow$

„Phase“ positiver Operator ($\lambda_i \geq 0$)

$\downarrow$

Projektionsoperator ($\lambda_i = \{0, 1\}$)

$\downarrow$

Identitätsoperator ($\lambda_i = 1\,, \forall i$)

unitärer Operator ($\lambda_i = e^{i\varphi_i}$, reine Phase)

Abbildung 1.1: Operatorenhierarchie. Charakterisierung von Operatoren durch ihre dyadische Zerlegung. $\rightarrow$ ist jeweils die Richtung einer Spezialisierung. In den Klammern ( ) werden die Eigenwerte charakterisiert. Man beachte, dass mit $\lambda_i = \{1, -1\}$ spezielle hermitesche Operatoren auch unitär sein können und umgekehrt. Die bi-orthogonale Entwicklung eines linearen Operators wird in Abschn. 13.3.3 abgeleitet.

Funktionen von Operatoren Eine *Operatorfunktion* $f(N)$ ist durch ihre Entwicklung in eine Potenzreihe definiert. Für einen normalen Operator N lässt sie sich in der dyadischen Zerlegung in einfacher Weise auf die Funktionen der Eigenwerte zurückführen.

$$f(N) := \sum_i f(\lambda_i)|i\rangle\langle i| \quad \rightarrow \quad f(N)|i\rangle = f(\lambda_i)|i\rangle \; . \tag{1.49}$$

$f(N)$ hat die gleichen Eigenvektoren wie N. Wir geben ein Beispiel, das in der Matrixdarstellung bezüglich der Basis der Eigenvektoren formuliert ist:

$$\sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} = |0\rangle\langle 0| - |1\rangle\langle 1| \tag{1.50}$$

$$e^{\varphi\sigma_z} = e^{\varphi}|0\rangle\langle 0| + e^{-\varphi}|1\rangle\langle 1| = \begin{pmatrix} e^{\varphi} & 0 \\ 0 & e^{-\varphi} \end{pmatrix} \; . \tag{1.51}$$

1.1.4 Hermitesche Operatoren

Wir folgen dem rechten Ast der Verzweigung in Abb. 1.1. Ein linearer Operator H heißt *hermitesch* (hermitian) oder *selbstadjungiert* (self-adjoint) auf $\mathcal{H}_d$, wenn für ihn $H^\dagger = H$ gilt. *Hermitesche Operatoren sind spezielle normale Operatoren.* Wegen der folgenden Eigenschaften spielen sie in der Quantentheorie ein wichtige Rolle: *Hermitesche Operatoren* *besitzen eine Spektralzerlegung mit einer ONB* $\{|i\rangle\}$

$$H = \sum_i r_i |i\rangle\langle i| \,, \quad r_i \in \mathbb{R} \tag{1.52}$$

und reellen Eigenwerten r_i. Bei Entartung können die Eigenvektoren orthonormal gewählt werden, sodass $\{|i\rangle\}$ eine ONB bildet. Eigenvektoren zu verschiedenen Eigenwerten sind orthogonal. Dies wird oft als *Spektraltheorem* (spectral theorem) bezeichnet. Hermitesche Operatoren heißen auch *Observable* (observable). Der Grund für diese physikalische Bezeichnung wird später deutlich werden.

Aus Gl. (1.52) folgt unmittelbar, dass für einen beliebigen Vektor $|\varphi\rangle$ der *Erwartungswert* (expectation value) $\langle\varphi|H|\varphi\rangle$ reell ist. Es ist eine wichtige Kennzeichnung hermitescher Operatoren, dass auch die Umkehrung gilt: *Der Erwartungswert* $\langle\varphi|A|\varphi\rangle$ *ist genau dann für alle Vektoren reell, wenn A hermitesch ist.*

Für den Beweis der Umkehrung nehmen wir an, dass für einen Operator A der Mittelwert $\langle\chi|A|\chi\rangle$ für alle Vektoren $|\chi\rangle$ reell ist. Für irgend zwei Vektoren $|\varphi\rangle$ und $|\psi\rangle$ aus $\mathcal{H}$ gilt die Identität

$$\begin{aligned} 4\langle\varphi|A|\psi\rangle = & \quad \{((\langle\varphi| + \langle\psi|)A(|\varphi\rangle + |\psi\rangle)) - ((\langle\varphi| - \langle\psi|)A(|\varphi\rangle - |\psi\rangle))\} \\ & + \quad i[((\langle\varphi| - i\langle\psi|)A(|\varphi\rangle - i|\psi\rangle)) - ((\langle\varphi| + i\langle\psi|)A(|\varphi\rangle + i|\psi\rangle))] \end{aligned} \tag{1.53}$$

Wenn wir in diesem Ausdruck $|\varphi\rangle$ und $|\psi\rangle$ vertauschen, dann geht der Teil $\{\dots\}$ in sich über und der Teil $[\dots]$ wird mit (-1) multipliziert. Berücksichtigen wir noch, dass alle Erwartungswerte reell sind, so folgt daraus $\langle\psi|A\varphi\rangle = \langle\varphi|A\psi\rangle^* = \langle A\psi|\varphi\rangle$. Der Operator A ist also hermitesch. Es ist bemerkenswert, dass in Gl. (1.53) rechts nur Erwartungswerte und links ein Übergangsmatrixelement stehen. *Wenn für einen hermiteschen Operator alle Erwartungswerte bekannt sind, sind auch alle Übergangsmatrixelemente bekannt.*

Kommutierende hermitesche Operatoren Für sie gilt der Satz (o.B.) über die simultane Diagonalisierbarkeit: *Zwei hermitesche Operatoren (Observablen)* A *und* B *sind genau dann vertauschbar (*$[A, B]_- = 0$*), wenn sie eine gemeinsame ONB* $\{|i\rangle\}$ *aus Eigenvektoren besitzen.*

Ist der Eigenwert a einer Observablen A entartet, so bilden die Eigenvektoren einen mindestens zweidimensionalen Unterraum. Mit Angabe von a ist daher kein zugehöriger Eigenvektor eindeutig charakterisiert. Wenn wir im Unterraum nur solche Eigenvektoren von A betrachten, die zugleich Eigenvektoren einer Observablen B zum Eigenwert b sind (Schnittmenge), könnte ein gemeinsamer Eigenvektor durch diese Zusatzforderung bereits eindeutig festgelegt sein. Wir bezeichnen ihn mit $|a, b\rangle$:

$$A|a, b\rangle = a|a, b\rangle, \quad B|a, b\rangle = b|a, b\rangle \ . \tag{1.54}$$

Sollte wiederum dadurch nur ein Unterraum festgelegt sein, dann werden wir fortfahren und verlangen, dass ein Eigenvektor von A und B zugleich Eigenvektor von einer mit A und B vertauschbaren Observablen C ist: $|a, b, c\rangle$ Das Verfahren muß bis zur Aufhebung aller Entartung fortgesetzt werden. Man nennt einen Satz von Observablen, die genau ein gemeinsames System von Eigenvektoren besitzen, ein *vollständiges System kommutierender Observabler*.

Durch Angabe der Eigenwerte zu allen Operatoren ist genau ein Vektor festgelegt. Wichtig ist, dass das oben beschriebene Verfahren auch tatsächlich abbricht. Dies garantiert der Satz: *Auf jedem Hilbert-Raum $\mathcal{H}$ existiert eine endliche(!) vollständige Menge paarweise kommutierender Operatoren (Funktionen von Operatoren nicht berücksichtigt).* Zum Beweis verweisen wir auf die Literatur (vergl. Abschn. 1.4)

1.1.5 Unitäre Operatoren

Wir folgen zunächst dem linken Ast der Verzweigung der Operatorhierarchie in Abb. 1.1 und kehren danach zum rechten Ast zurück. Ein linearer Operator U heißt *unitär* (unitary), wenn $U^\dagger = U^{-1}$ gilt. *Unitäre Operatoren sind spezielle normale Operatoren. Sie besitzen daher eine Spektralzerlegung*

$$U = \sum_i e^{i\varphi_i} |i\rangle\langle i| \,, \quad \varphi_i \in \mathbb{R}, \tag{1.55}$$

mit einer ONB $\{|i\rangle\}$, wobei aufgrund der definierenden Gleichung die Eigenwerte reine „Phasenterme“ sind. Wie bei hermiteschen Operatoren spannen die Eigenvektoren den ganzen Raum auf. Eigenvektoren zu verschiedenen Eigenwerten sind orthogonal. Eigenvektoren zu entarteten Eigenwerten können orthogonal gewählt werden. Man zeigt leicht: Ein linearer Operator ist genau dann unitär, wenn jede seiner Matrixdarstellungen unitär ist.

Aus der Spektralzerlegung folgt unmittelbar die Unitarität von $U(t) = e^{iHt}, t \in \mathbb{R}$, falls H hermitesch ist. Weiterhin gilt in diesem Fall:

$$U(t=0) = \mathbb{1} \tag{1.56}$$

$$U(t_2)U(t_1) = U(t_2 + t_1) \,. \tag{1.57}$$

Unitäräquivalenz und Normerhaltung Unter kombinierten unitären Transformationen von Vektoren und Operatoren gemäß

$$|\varphi'\rangle = U|\varphi\rangle \quad A' = UAU^{-1} \tag{1.58}$$

bleiben Skalarprodukte (speziell auch die Norm eines Vektors), Eigenwerte und Erwartungswerte unverändert. *Umgekehrt ist ein linearer Operator T, der bei Anwendung auf beliebige Vektoren aus $\mathcal{H}_n$ die Norm erhält*

$$\|T\varphi\| = \|\varphi\| \tag{1.59}$$

ein unitärer Operator: $T^\dagger = T^{-1}$. Zum Beweis verwenden wir die Gl. (1.7) und formen mit Gl. (1.59) um. Für T gilt die Unitaritätsrelation

$$\langle T\varphi|T\psi\rangle = \langle\varphi|\psi\rangle \,. \tag{1.60}$$

1.1.6 Positive Operatoren und Projektionsoperatoren

Wir wollen noch Spezialfälle hermitescher Operatoren diskutieren. Ein *positiver Operator* ist dadurch definiert, dass für einen beliebigen Vektor $|\varphi\rangle$ die Ungleichung

$$\langle\varphi|A|\varphi\rangle \geq 0 \quad \forall|\varphi\rangle \,, \tag{1.61}$$

gilt, dass also sein Erwartungswert stets reell und nicht negativ ist. Wir schreiben dann

$$A \geq 0 \, . \tag{1.62}$$

Weiterhin erklären wir

$$A \geq B \Leftrightarrow (A - B) \geq 0 \, . \tag{1.63}$$

Aus der Positivität folgt für die Spektralzerlegung: *Jeder positive Operator A ist hermitesch $A^\dagger = A$. Er besitzt die Spektralzerlegung*

$$A = \sum_i a_i |i\rangle\langle i|, \quad a_i \geq 0 \, . \tag{1.64}$$

mit nicht-negativen Eigenwerten.

Für einen beliebigen Operator A ist $A^\dagger A$ ein positiver Operator. Andererseits gibt es für jeden positiven Operator A einen linearen Operator B, so dass A sich in der Form

$$A = B^\dagger B \tag{1.65}$$

schreiben lässt. B ist nur bis auf unitäre Transformationen festgelegt ($B \to UB$). Wir finden B explizit über die Spektralzerlegung (1.64) von A und eine ONB $\{|\varphi_i\rangle\}$

$$B = \sum_i \sqrt{a_i} |\varphi_i\rangle\langle i| \, . \tag{1.66}$$

Einsetzen betätigt (1.65).

Ein linearer Operator P ist ein *Projektionsoperator* (projection operator) (genauer: orthogonaler Projektionsoperator), wenn er die folgenden Bedingungen erfüllt:

(i) $P^2 = P$ *idempotent.*

(ii) $P^\dagger = P$ hermitesch.

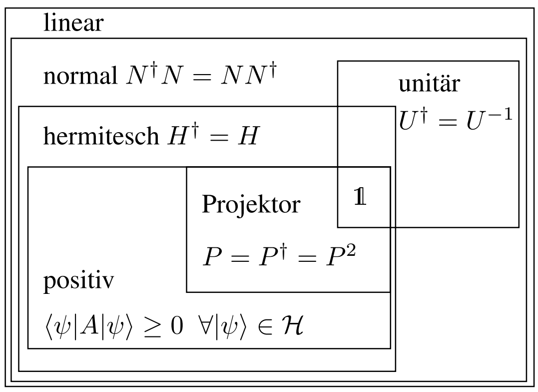

Abbildung 1.2: „Schnittmengen“ der Operatortypen

Aus dieser Eigenschaft folgt

$$\langle v|P|v\rangle = \langle v|PP|v\rangle = \langle v|P^\dagger P|v\rangle = \|P|v\rangle\|^2 \geq 0\,. \tag{1.67}$$

P ist daher ein positiver Operator und es gilt

$$P = \sum_i p_i|i\rangle\langle i|\,; \quad p_i \geq 0 \tag{1.68}$$

mit der ONB $\{|i\rangle\}$. Wegen der Idempotenz (i) haben wir weiterhin

$$P^2 = \sum_i p_i^2|i\rangle\langle i|\,, \quad P = \sum_i p_i|i\rangle\langle i|\,, \tag{1.69}$$

und damit $p_i^2 = p_i$ beziehungsweise $p_i \in \{0,1\}$. Der Projektionsoperator P nimmt deshalb die Form

$$P = \sum_{j\in I} |j\rangle\langle j|, \qquad I \leftrightarrow \text{Untermenge der ONB} \tag{1.70}$$

an. P projiziert auf den durch $\{|j\rangle\}$ mit $j \in I$ aufgespannten Unterraum.

In Ergänzung zu Abb. 1.1 sind in Abb. 1.2 im Rückblick die „Schnittmengen“ der verschiedenen Operatortypen dargestellt.

1.2 Liouville-Raum der Operatoren

Wir werden in Kap. 2 sehen, dass sich im Spezialfall der reinen Zustände quantentheoretische Systeme durch normierte Vektoren $|\psi\rangle$ in einem Hilbert-Raum $\mathcal{H}$ beschreiben lassen. Im allgemeinen Fall der gemischten Quantenzustände erfolgt die Beschreibung über den Dichteoperator (Kap. 4). Alle möglichen dynamischen Zustandsänderungen können als lineare Transformationen von Übergängen zwischen Dichteoperatoren beschrieben werden (Schrödinger Bild). Wir werden das ganz allgemein in Kap. 14 diskutieren. Im Hinblick darauf ist es zweckmäßig den Liouville-Raum $\mathbb{L}$ als den Raum der auf dem Hilbert-Raum wirkenden linearen Operatoren einzuführen. Wir können die Darstellung knapp halten, da im Wesentlichen die Vorgehensweise aus Abschn. 1.1 wiederholt wird.

1.2.1 Skalarprodukt

Der *Liouville-Raum* $\mathbb{L}$ ist ein linearer Vektorraum über dem Körper der komplexen Zahlen, dessen Elemente $|A), |B), \ldots$ die linearen Operatoren $A, B, \ldots$ auf einem Hilbert-Raum sind. Man prüft leicht nach, dass diese linearen Operatoren tatsächlich die Axiome eines linearen Vektorraums erfüllen. Wir werden die Klammern $|)$ später zur Vereinfachung der Schreibweise weglassen.

Die dyadische Zerlegung (1.29) eines Operators A nach der Basis $\{|i\rangle\}$ von $\mathcal{H}_d$ hat in der neuen Schreibweise die Form

$$|A) = \sum_{i,j=1}^{d} A_{ij}\big||i\rangle\langle j|\big)\,. \tag{1.71}$$

Die d^2 Dyaden $|i\rangle\langle j|$ in $\mathcal{H}_d$ bilden die d^2 Elemente $||i\rangle\langle j|)$ einer Basis in $\mathbb{L}$. Für die Dimensionen der Räume gilt daher

$$\dim \mathbb{L} = (\dim \mathcal{H}_d)^2 \; . \tag{1.72}$$

Selbstverständlich gibt es neben den Dyaden andere Basen in $\mathbb{L}$. Wir können den Liouville-Raum $\mathbb{L}$ mit einem Skalarprodukt $(A|B)$ ausstatten. Es hat formal dieselben Eigenschaften wie das Skalarprodukt im Hilbert-Raum $\mathcal{H}_d$ (vergl. Abschn. 1.1.1). $(A|B)$ ist eine komplexe Zahl und es gilt

$$(A|B) = (B|A)^* \; , \; (A|c_1 B_1 + c_2 B_2) = c_1 (A|B_1) + c_2 (A|B_2) \; , \; (A|A) \geq 0 \; . \tag{1.73}$$

Operatorbasis Zwei Operatoren A und B heißen orthogonal, wenn

$$(A|B) = 0 \tag{1.74}$$

erfüllt ist, ohne dass einer der Operatoren der Nulloperator ist. Es gelten die Dreiecksungleichung (1.6) und die zur Parallelogrammungleichung (1.8) analogen Gleichungen. Jeder Operator $|A)$ lässt sich nach einer orthonormalen Basis $\{|Q_s), s = 1, \ldots, d^2\}$ von $\mathbb{L}$

$$(Q_s|Q_t) = \delta_{st}, \quad \sum_{s=1}^{d^2} |Q_s)(Q_s| = \mathbb{1} \tag{1.75}$$

zerlegen:

$$|A) = \sum_{s=1}^{d^2} |Q_s)(Q_s|A) \; . \tag{1.76}$$

Skalarprodukt als Spur Skalarprodukte auf $\mathbb{L}$ können in ganz verschiedener Weise realisiert werden. Wir werden das über die Spur in $\mathcal{H}_d$ gebildete Skalarprodukt verwenden, da in diesem Fall die für die einfachsten Quantensysteme wichtigen Paulischen Spinoperatoren zu einer Basis ergänzt werden können (vergl. Abschn. 3.1)

$$(A|B) := \mathrm{tr}[A^\dagger B] \; . \tag{1.77}$$

Die Zerlegung (1.76) nimmt dann bei weggelassenen Vektorklammern die Form

$$A = \sum_{s=1}^{n^2} Q_s \, \mathrm{tr}[Q_s^\dagger A] \tag{1.78}$$

an. Die aus den Dyaden $|i\rangle\langle j|, \quad i, j = 1, \ldots, d$ gebildete Basis des Liouville-Raums ist bei Bezug auf das Spur-Skalarprodukt (1.77) orthonormal

$$\Big(|i\rangle\langle j| \Big| |i'\rangle\langle j'| \Big) = \delta_{ii'} \delta_{jj'} \; . \tag{1.79}$$

1.2.2 Superoperatoren

Wie zu vermuten ist, lassen sich auf einem Liouville-Raum selber wiederum *lineare* Operatoren definieren, die Elemente aufeinander abbilden:

$$|A) \to |A) = \mathcal{S}|A) = |\mathcal{S}A) \ . \tag{1.80}$$

Diese kursiv geschriebenen Operatoren heißen *Superoperatoren* (superoperators). Aus der Sicht des Hilbert-Raums $\mathcal{H}_n$ bilden sie lineare Operatoren in linearer Weise aufeinander ab

$$A \to B = \mathcal{S}A \ . \tag{1.81}$$

Beispiele Wir geben zwei Beispiele für Superoperatoren an: Beim Superoperator $\mathcal{A}$

$$B \to \mathcal{A}B := ABA^{-1} \tag{1.82}$$

folgt die Linearität aus der Linearität von A. Man sieht leicht, dass

$$\mathcal{A}^{-1}B = A^{-1}BA \tag{1.83}$$

gilt. Ein für die Beschreibung der dynamischen Entwicklung von gemischten Zuständen wichtiger Superoperator (vergl. Kap. 4) ist der *Liouville-Operator* (Liouvillian) $\mathcal{L}$

$$A \to \mathcal{L}A := \frac{1}{\hbar}\,[H, A]_- \ . \tag{1.84}$$

($[H, A] := HA - AH$). In der physikalischen Anwendung ist H dabei der Hamilton-Operator. Die Potenz von $\mathcal{L}$ schreibt sich

$$\mathcal{L}^2 A = \frac{1}{\hbar^2}\left[H, [H, A]_-\right]_- \ . \tag{1.85}$$

Vom Hilbert-Raum lassen sich direkt die Konzepte des adjungierten, hermiteschen, unitären und positiven Superoperators übertragen.

1.3 Elemente der Wahrscheinlichkeitstheorie

Die zentrale Aufgabe der Quantentheorie ist es, Vorhersagen über die Wahrscheinlichkeiten des Eintreffens von Messergebnissen zu machen. Dabei wird vorausgesetzt, dass Informationen über den Zustand des Quantenobjekts vorliegen, an dem gemessen wird. Im Hinblick auf diese Aufgabe ist es sinnvoll die Grundkonzepte der Wahrscheinlichkeitstheorie kurz darzustellen.

Vorhersagen sind ein Schluss von der Vergangenheit auf die Zukunft. In der klassischen Physik spielt die umgekehrte Schlussrichtung eine vergleichbar wichtige Rolle. Aus den Messergebnissen wird auf den Zustand des Objekts vor der Messung zurück geschlossen. In welchem Umfang ist das auch für Quantensysteme möglich? Bei der Diskussion dieser Frage spielt der Satz von Bayes eine wichtige Rolle. Wir skizzieren seinen Beweis nachdem wir Vorüberlegungen zur bedingten Wahrscheinlichkeit angestellt haben.

1.3.1 Wahrscheinlichkeit zufälliger Ereignisse

Bei der Wiederholung eines Zufallsexperiments liegt das Ergebnis nicht vorher fest. Es ist ein *zufälliges Ereignis* (random event). Solche Ereignisse können beim Werfen eines Würfels z. B. das Auftreten einer geraden (bzw. ungeraden) Augenzahl oder das Auftreten einer Augenzahl größer als 2 sein. Sei $\{A_i; \quad i = 1, \ldots, n\}$ die Menge der möglichen Ereignisse. Es werden folgende Bezeichnungen in Analogie zur Mengenlehre eingeführt:

$A_i \cap A_j \cap A_k$ ist das Ereignis das darin besteht, dass die Ereignisse A_i, A_j und A_k zusammen (gleichzeitig) auftreten. Beim Werfen eines Würfels kann A_1 z. B. das Ereignis „gerade Augenzahl" und A_2 das Ereignis „Augenzahl > 4" sein, dann ist $A_1 \cap A_2$ das Ereignis „Es fällt die Sechs". $p(A_1 \cap A_2)$ ist die Wahrscheinlichkeit, dass sowohl A_1 als auch A_2 eintritt (*Verbundwahrscheinlichkeit*, joint probability) . Wir schreiben auch $p(A_1, A_2) := p(A_1 \cap A_2)$.

$A_i \cup A_j \cup A_k$ ist das Ereignis das im Auftreten wenigstens eines der Ereignisse A_i, A_j und A_k besteht. Für die Augenzahl Z möge $2 \leq Z \leq 4$ das Ereignis A_1 und $3 \leq Z \leq 5$ das Ereignis A_2 bedeuten. Dann ist $A_1 \cup A_2$ das Ereignis $2 \leq Z \leq 5$.

Das unmögliche Ereignis wird mit $\varnothing$ und das sichere mit Ω bezeichnet. Zwei Ereignisse A_i und A_j heißen *unvereinbar* (exclusive events), wenn $A_i \cap A_j = \varnothing$ gilt. Sie können nicht gleichzeitig eintreten.

Axiomatik Jedem zufälligen Ereignis A wird eine reelle Zahl $p(A)$ mit $0 \leq p(A) \leq 1$ zugeordnet, die die *Wahrscheinlichkeit* (probability) von A genannt wird und eine Reihe von Axiomen erfüllt, die wir hier nicht aufführen wollen. Ein Beispiel ist die Kolmogorov-Axiomatik. Wir notieren nur das *Additivitätsaxiom*: Für paarweise unvereinbare zufällige Ereignisse $A_1, A_2, \ldots, A_n$ gilt

$$p(A_1 \cup A_2 \cup \ldots \cup A_n) = p(A_1) + p(A_2) + \ldots + p(A_n)\ . \tag{1.86}$$

Wenn die Ereignisse A_1 und A_2 vereinbar sind, gilt

$$p(A_1 \cup A_2) = p(A_1) + p(A_2) - p(A_1 \cap A_2)\ . \tag{1.87}$$

Das Mengendiagramm von Abb. 1.3 veranschaulicht diese Relation. Beim Würfeln möge $Z \leq 2$ das Ereignis A_1 und $Z \geq 4$ das Ereignis A_2 sein, dann ist die Wahrscheinlichkeit dafür, dass entweder A_1 oder A_2 eintritt $p(A_1 \cup A_2) = \frac{2}{6} + \frac{3}{6} = \frac{5}{6}$.

Häufigkeitsinterpretation Wir haben uns zur Veranschaulichung des Axioms auf das Werfen eines Würfels bezogen. Tatsächlich erfordert die Axiomatik wie jede mathematische Axiomatik keine physikalische Interpretation. $p(A)$ ist durch die Axiome selber festgelegt. Bei der Anwendung auf physikalische Ereignisse wird Wahrscheinlichkeit üblicherweise als Grenzwert der *relativen Häufigkeit* (relative frequency) interpretiert:

$$p(A) := \lim_{N \to \infty} \frac{N(A)}{N} \tag{1.88}$$

Dabei ist $N(A)$ die absolute Häufigkeit des Auftretens von A bei einer Gesamtzahl N von Versuchen. Diese physikalische Interpretation ist nicht unproblematisch. Für endliche große N kann sie als Schätzung von $p(A)$ aufgefasst werden.

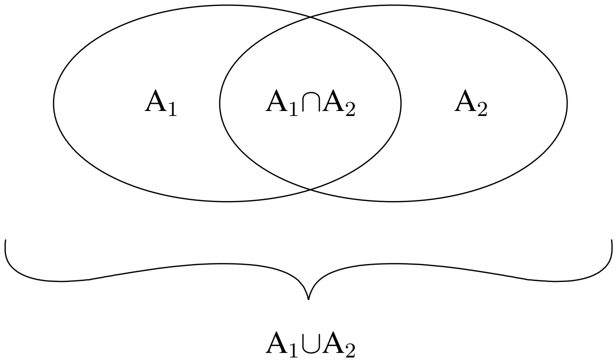

Abbildung 1.3: Mengendiagramm der Wahrscheinlichkeiten.

1.3.2 Bedingte Wahrscheinlichkeit und Satz von Bayes

Wir erweitern das Konzept der Wahrscheinlichkeit, Die *bedingte Wahrscheinlichkeit* (conditional probability) $p(A|B)$ eines Ereignisses A ist die Wahrscheinlichkeit des Eintretens von A unter der Bedingung, dass ein anderes Ereignis B, das selber die Wahrscheinlichkeit $p(B)$ hat, bereits eingetreten ist. Wir definieren:

$$p(A|B) := \frac{p(A \cap B)}{p(B)} \ . \tag{1.89}$$

Auflösung führt auf die plausible Gleichung für die Wahrscheinlichkeit $p(A \cap B)$ dafür, dass sowohl A als auch B eintritt:

$$p(A \cap B) = p(A|B) \cdot p(B) \ . \tag{1.90}$$

Wir schreiben in späteren Kapiteln

$$p(A, B) := p(A \cap B) \ . \tag{1.91}$$

Als Beispiel betrachten wir zwei Urnen. Die Urne U_1 enthält 3 weiße und 3 schwarze Kugeln, die Urne U_2 2 weiße und 4 schwarze Kugeln. In jede der Urnen wird mit gleicher Wahrscheinlichkeit $p(U_1) = p(U_2) = \frac{1}{2}$ gegriffen. Die Wahrscheinlichkeit gezogen zu werden ist für jede Kugel einheitlich $\frac{1}{12}$. Die Wahrscheinlichkeit sowohl in U_1 zu greifen als auch eine weiße Kugel zu ziehen ist $p(w \cap U_1) = \frac{3}{12} = \frac{1}{4}$. Die bedingte Wahrscheinlichkeit $p(w|U_1)$ nachdem man in eine Urne U_1 gegriffen hat eine weiße Kugel zu ziehen ist nach Gl. (1.89)

$$p(w|U_1) = \frac{p(w \cap U_1)}{p(U_1)} = \frac{2}{4} = \frac{1}{2} \ . \tag{1.92}$$

Das folgt auch anschaulich unmittelbar aus der Beschreibung der Zufallssituation. Analog findet man $p(w|U_2) = \frac{1}{3}$.

Unabhängigkeit Zwei zufällige Ereignisse A und B heißen voneinander *unabhängig*, wenn durch das Eintreten des einen das Eintreten des anderen nicht beeinflusst wird

$$p(A|B) = p(A) \ . \tag{1.93}$$

In diesem Fall faktorisiert $p(A \cap B)$

$$p(A \cap B) = p(A)p(B) \ . \tag{1.94}$$

Hiervon ist zu unterscheiden, dass die Ereignisse A und B unvereinbar (einander widersprechend) sind $A \cap B = \varnothing$. Dann gilt $p(A|B) = 0$.

Totale Wahrscheinlichkeit Das sichere Ereignis Ω möge sich als Summe von n paarweise unvereinbaren zufälligen Ereignissen A_i darstellen lassen $(A_i \cap A_j = \varnothing, \quad \forall i \neq j)$:

$$\Omega = A_1 \cup A_2 \cup \ldots \cup A_n; \ A_i \cap A_j = \varnothing, \qquad \forall i \neq j \ . \tag{1.95}$$

Für ein beliebiges zufälliges Ereignis B gilt dann $B = (A_1 \cap B) \cup (A_2 \cap B) \cup \ldots \cup (A_n \cap B)$. Mit dem Additivitätsaxiom (1.86) folgt daraus

$$p(B) = \sum_{i=1}^{n} p(B \cap A_i) \tag{1.96}$$

und mit Gl. (1.90) ergibt sich der *Satz von der totalen Wahrscheinlichkeit*

$$p(B) = \sum_{i=1}^{n} p(B|A_i)p(A_i) \ . \tag{1.97}$$

Wir geben ein Beispiel im nächsten Abschnitt.

Satz von Bayes Mit $p(A \cap B) = p(B \cap A)$ führt die Gl. (1.90) auf

$$p(A|B)p(B) = p(B|A)p(A) \ . \tag{1.98}$$

Unter der Voraussetzung, dass die paarweise Unvereinbarkeit und Vollständigkeit (1.95) erfüllt ist, gewinnen wir daraus mit Gl. (1.97) den fundamentalen Satz von Bayes *(Bayes's theorem)*

$$p(A_i|B) = \frac{p(B|A_i)p(A_i)}{\sum_{j=1}^{n} p(B|A_j)p(A_j)} \ . \tag{1.99}$$

Der Nenner garantiert die Normierung $\sum_i p(A_i|B) = 1$, die besagt, dass irgendeines der Ereignisse A_i eintreten muß.

Der Satz von Bayes hat folgende Bedeutung: Es seien in einer Situation die Wahrscheinlichkeit $p(A_i)$ und die bedingten Wahrscheinlichkeiten $p(B|A_i)$ bekannt. Dann erlaubt die Formel (1.99) die Berechnung der Wahrscheinlichkeit $p(A_i|B)$ dafür, dass in einem Zufallsexperiment unter der Voraussetzung „B ist eingetreten“ die Bedingung A_i erfüllt war (bzw. ist).

Wir geben ein Beispiel an, dass sich wieder auf das Ziehen von Kugeln aus Urnen bezieht. Es mögen drei Urnen von Typ I mit jeweils 2 weißen und 6 schwarzen Kugeln vorliegen und eine Urne vom Typ II mit 1 weißen und 7 schwarzen Kugeln. Mit gleicher Wahrscheinlichkeit wird in eine der Urnen gegriffen und eine Kugel gezogen. Das Ereignis B ist das Ziehen einer weißen Kugel. Das Ereignis A_1 ist das Greifen in eine Urne vom Typ I (bzw. Typ II). Dann liegen die folgenden Wahrscheinlichkeiten vor: $p(A_1) = \frac{3}{4}, p(A_2) = \frac{1}{4}, p(B|A_1) = \frac{1}{4}, p(B|A_2) = \frac{1}{8}$. Die Wahrscheinlichkeit, dass die gezogene weiße Kugel aus einer Urne von Typ I stammt, ist nach dem Satz von Bayes $p(A_1|B) = \frac{6}{7} = 0,86$ und daher größer als $p(A_1)$. Aus der Urne vom Typ II stammt die weiße Kugel mit der Wahrscheinlichkeit $p(A_2|B) = \frac{1}{7} = 0,14$, die kleiner als $p(A_2)$ ist. Die Wahl eines Urnentyps erfolgt mit den a-priori-Wahrscheinlichkeiten $p(A_i)$. Wenn eine weiße Kugel gezogen wurde, kann man darauf rückschließen, in welche Urne gegriffen wurde. Für diesen Rückschluss gibt es i.a. wiederum nur eine Wahrscheinlichkeitsaussage, die durch $p(A_i|B)$ gegeben ist. Würde die Urne vom Typ II keine weiße Kugel enthalten, könnte mit Sicherheit $(p(A_1|B) = 1)$ der Rückschluss gemacht werden, dass in eine Urne vom Typ I gegriffen wurde.

Annahme von Bayes Sie sollte nicht mit dem Satz von Bayes verwechselt werden. Wenn es keinen Anlass zur Vermutung gibt, dass ein Ereignis A_i durch die Situation ausgezeichnet ist, kann es sinnvoll sein, die *Bayessche Annahme* zu machen, dass alle a-priori-Wahrscheinlichkeiten übereinstimmen

$$p(A_1) = p(A_2) = \ldots = p(A_n) \; . \tag{1.100}$$

Nach dem Eintreten von B wird dann diese Annahme durch die Wahrscheinlichkeiten $p(A_i|B)$ von Gl. (1.99) ersetzt. So lassen sich die Wahrscheinlichkeiten schätzen.

1.3.3 Zufallsgrößen

Eine *Zufallsgröße* X ist durch die Zuordnung von Zahlen x zu den zufälligen Ereignissen gegeben. Würfe eines Würfels sind ein Beispiel. Eine diskrete zufällige Größe X ist bestimmt durch die Werte $x_1, x_2, \ldots, x_n$ und die Wahrscheinlichkeiten $p(x_1), p(x_2), \ldots, p(x_n)$, mit denen die Werte angenommen werden ($\sum_{i=1}^n p_i = 1$). Die Verallgemeinerung auf abzählbar unendlich viele Werte x_i und auf stetige x ist i.a. unproblematisch.

Wichtige Größen zur Charakterisierung einer Zufallsgröße X sind *Erwartungswert* (expectation value) oder *Mittelwert* (mean value)

$$\langle X \rangle := \sum_i p_i x_i \tag{1.101}$$

und die *Streuung* (dispersion) oder *mittlere quadratische Abweichung* (mean square deviation)

$$\mathrm{var}(X) = (\Delta X)^2 := \langle X^2 \rangle - \langle X \rangle^2 = \langle (X - \langle X \rangle)^2 \rangle \; , \tag{1.102}$$

die auch *Varianz* (variance) genannt wird. Die *Standardabweichung* (standard deviation) $\Delta X = \sqrt{\mathrm{var}(X)}$ gibt an, wie sehr eine Zufallsvariable um ihren Mittelwert streut. In der Quantentheorie wird $\Delta(X)$ auch als die *Unbestimmtheit* (uncertainty) von X bezeichnet.

1.4 Ergänzende Themen und weiterführende Literatur

- Die meisten Lehrbücher der Quantentheorie enthalten eine Darstellung der mathematischen Grundlagen. Auf folgende Bücher sei besonders hingewiesen: [Sak 85], [CDL 91], [Ish 95], [Bal 98], [Gri 02].
- Eine ausführliche Darstellung des Hilbert-Raums mit Bezug auf die Quantentheorie findet sich in [Jor 69].
- Bra-Raum als Vektorraum aller linearen stetigen Funktionale auf einem Vektorraum V (auch Dualraum V^* genannt): [FK 98, Kap. 2.8 und 4.2].
- Literatursammlung zu 1.3: [Per 93, z. B. 53], [Ish 95], [NC 00].

1.5 Übungsaufgaben

ÜA 1.1 [zu 1.1] Beweisen Sie die Relationen (1.5), (1.6), (1.7), (1.8), (1.24), (1.25), (1.59), (1.34).

ÜA 1.2 [zu 1.1] Geben Sie mehrere Beispiele für eine Basis im $\mathcal{H}_3$ an.

ÜA 1.3 [zu 1.1] $\{|i\rangle, i = 1, \ldots, d\}$ sei eine ONB. Beweisen Sie, dass die Parsevalsche Identität

$$\|\varphi\|^2 = \sum_{i=1}^{n} |\langle\varphi|i\rangle|^2 \tag{1.103}$$

für alle Vektoren $|\varphi\rangle \in \mathcal{H}_2$ gilt.

ÜA 1.4 [zu 1.1] Zeigen Sie, dass die Matrix, die dem Operatorprodukt AB entspricht, gleich dem Produkt der Matrizen zu A und B ist.

ÜA 1.5 [zu 1.1] Zeigen Sie, dass die Determinante einer unitären Matrix $\pm\, 1$ ist.

ÜA 1.6 [zu 1.1] Zeigen Sie, dass für zwei unitäre $n \times n$ Matrizen U_1 und U_2 auch die Matrix $\begin{pmatrix} U_1 & 0 \\ 0 & U_2 \end{pmatrix}$ unitär ist.

ÜA 1.7 [zu 1.1] Besitzt der Projektionsoperator $P = |u\rangle\langle u|$ ein Inverses?

ÜA 1.8 [zu 1.1]

a) Der Operator A sei diagonalisierbar. Wie findet man seine Spektraldarstellung?

b) Sind die Pauli-Operatoren $\sigma_x = |0\rangle\langle 1| + |1\rangle\langle 0|, \sigma_y = -i|0\rangle\langle 1| + i|1\rangle\langle 0|, \sigma_z = |0\rangle\langle 0| - |1\rangle\langle 1|$ diagonalisierbar? Finden Sie ihre Spektraldarstellung.

ÜA 1.9 [zu 1.2] Bestätigen Sie für den in Gl. (1.82) definierten Superoperator A die Relation

$$\text{tr}[C(\mathcal{A}B)] = \text{tr}[(\mathcal{A}^{-1}C)B] \tag{1.104}$$

gilt.

ÜA 1.10 [zu 1.2] H sei ein hermitescher Operator mit Eigenwertgleichung

$$H|e_i\rangle = E_i|e_i\rangle \ . \tag{1.105}$$

Bestimmen Sie Eigenvektoren und Eigenwerte des Liouville-Operators $\mathcal{L}$ von Gl. (1.84).

ÜA 1.11 [zu 1.2] Zeigen Sie, dass der Liouville-Operator von Gl. (1.84) die Matrixdarstellung

$$\mathcal{L}_{ij,i'j'} = \frac{1}{\hbar}(H_{ij'}\delta_{i'j} - \delta_{ij'}H_{i'j}) \tag{1.106}$$

hat.

ÜA 1.12 [zu 1.2] Beweisen Sie mit Bezug auf die Definition des Liouville-Operators $\mathcal{L}$ die Relation

$$e^{c\mathcal{L}}A = e^{\frac{c}{\hbar}H}Ae^{-\frac{c}{\hbar}H} \ . \tag{1.107}$$

ÜA 1.13 [zu 1.2] Geben Sie Situationen an, mit deren Hilfe die bedingte Wahrscheinlichkeit, der Satz von der totalen Wahrscheinlichkeit oder der Satz von Bayes veranschaulicht werden können.