

Jürgen Audretsch

Verschränkte Systeme

Die Quantenphysik auf neuen Wegen



WILEY-
VCH

WILEY-VCH Verlag GmbH & Co. KGaA

This Page Intentionally Left Blank

Jürgen Audretsch

Verschränkte Systeme

Die Quantenphysik auf neuen Wegen

Jürgen Audretsch

Verschränkte Systeme

Die Quantenphysik auf neuen Wegen



WILEY-
VCH

WILEY-VCH Verlag GmbH & Co. KGaA

Autor

Jürgen Audretsch
Universität Konstanz, Fachbereich Physik
e-mail: juergen.audretsch@uni-konstanz.de

Das vorliegende Werk wurde sorgfältig erarbeitet. Dennoch übernehmen Autor und Verlag für die Richtigkeit von Angaben, Hinweisen und Ratschlägen sowie für eventuelle Druckfehler keine Haftung.

Umschlagbild

Itten, Johannes: Die Begegnung, 1916
© VG Bild-Kunst, Bonn 2004

Bibliografische Information

Der Deutschen Bibliothek
Die Deutsche Bibliothek verzeichnet diese Publikation in der Deutschen Nationalbibliografie; detaillierte bibliografische Daten sind im Internet über <http://dnb.ddb.de> abrufbar.

© 2005 WILEY-VCH Verlag GmbH & Co. KGaA,
Weinheim

Alle Rechte, insbesondere die der Übersetzung in andere Sprachen vorbehalten. Kein Teil dieses Buches darf ohne schriftliche Genehmigung des Verlages in irgendeiner Form – durch Photokopie, Mikroverfilmung oder irgendein anderes Verfahren – reproduziert oder in eine von Maschinen, insbesondere von Datenverarbeitungsmaschinen, verwendbare Sprache übertragen oder übersetzt werden.

Printed in the Federal Republic of Germany
Gedruckt auf säurefreiem Papier

Satz Uwe Krieg, Berlin

Druck Strauss GmbH, Mörlenbach

Bindung Litges & Dopf Buchbinderei GmbH,
Heppenheim

ISBN-13: 978-325-40452-0

ISBN-10: 3-527-40452-X

This Page Intentionally Left Blank

Inhaltsverzeichnis

Vorwort	XI
1 Der mathematische Rahmen	1
1.1 Hilbert-Raum der Vektoren	2
1.1.1 Skalarprodukt, Dirac-Schreibweise	2
1.1.2 Lineare Operatoren auf dem Hilbert-Raum	3
1.1.3 Normale Operatoren und spektrale Zerlegung	6
1.1.4 Hermitesche Operatoren	9
1.1.5 Unitäre Operatoren	11
1.1.6 Positive Operatoren und Projektionsoperatoren	11
1.2 Liouville-Raum der Operatoren	13
1.2.1 Skalarprodukt	13
1.2.2 Superoperatoren	15
1.3 Elemente der Wahrscheinlichkeitstheorie	15
1.3.1 Wahrscheinlichkeit zufälliger Ereignisse	16
1.3.2 Bedingte Wahrscheinlichkeit und Satz von Bayes	17
1.3.3 Zufallsgrößen	19
1.4 Ergänzende Themen und weiterführende Literatur	20
1.5 Übungsaufgaben	20
2 Grundkonzepte der Quantentheorie	23
2.1 Erste Fassung der Postulate (reine Zustände abgeschlossener Quantensysteme)	23
2.1.1 Das Szenario der Quantentheorie	23
2.1.2 Postulate für reine Zustände abgeschlossener Quantensysteme	29
2.1.3 Kommentare zu den Postulaten	35
2.2 Ausblick	36
2.3 Manipulation der Zustandsbewegung durch projektive Messungen	37
2.3.1 Quanten-Zeno-Effekt	37
2.3.2 Treiben eines Zustandsvektors durch eine Sequenz von Projektions-	
messungen	38
2.4 Die Struktur physikalischer Theorien*	39
2.4.1 Bauelemente einer physikalischen Theorie*	39
2.4.2 Theoretische Terme*	41

Die mit einem Stern * gekennzeichneten Kapitel können bei einem ersten Durchgang überschlagen werden.

2.5	Interpretationen der Quantentheorie und physikalische Wirklichkeit*	42
2.5.1	Minimalinterpretation*	42
2.5.2	Standardinterpretation*	42
2.6	Ergänzende Themen und weiterführende Literatur	43
3	Die einfachsten Quantensysteme: Qubits	45
3.1	Pauli-Operatoren	46
3.2	Veranschaulichung von Qubits auf der Bloch-Kugel	48
3.3	Veranschaulichung der Messdynamik und der unitären Dynamik	51
3.4	Quantengatter für einzelne Qubit-Systeme	55
3.5	Spin- $\frac{1}{2}$	57
3.6	Photonenpolarisationen	58
3.7	Einzelne Photonen im Strahlteiler und Interferometer	59
3.7.1	Strahlteiler	59
3.7.2	Interferometer	62
3.8	Ergänzende Themen und weiterführende Literatur	64
3.9	Übungsaufgaben	64
4	Gemischter Zustand und Dichteoperator	67
4.1	Dichteoperator zu gegebenem Ensemble (statistisches Gemisch)	67
4.1.1	Reiner Zustand	67
4.1.2	Die Physik der statistischen Gemische (Gemenge)	69
4.1.3	Definition und Eigenschaften des allgemeinen Dichteoperators	73
4.1.4	Inkohärente Überlagerung reiner Zustände	74
4.2	Der allgemeine Quantenzustand	76
4.3	Verschiedene Ensemblezerlegungen eines Dichteoperators und Ignoranzinterpretation	76
4.4	Dichteoperatoren von Qubits	79
4.5	Ergänzende Themen und weiterführende Literatur	80
4.6	Übungsaufgaben	80
5	Shannon-Entropie und klassische Information	83
5.1	Definition und Eigenschaften	83
5.2	Shannons Theorem	87
5.2.1	Typische Sequenzen	87
5.2.2	Klassische Datenkompression	89
5.3	Information	90
5.4	Klassische relative Entropie	91
5.5	Wechselseitige Information als Maß für die Korreliertheit zweier Botschaften	92
5.5.1	Wechselseitige Information	92
5.5.2	Bedingte Entropie	93
5.6	Ergänzende Themen und weiterführende Literatur	95
5.7	Übungsaufgaben	95

6	Von-Neumann-Entropie und Quanteninformation	97
6.1	Quantenkanal und Quantenentropie	97
6.2	Qubit als Einheit der Quanteninformation	100
6.3	Eigenschaften	102
6.4	Die Schnittstellen von Präparation und Messung	104
6.4.1	Entropie der projektiven Messung	104
6.4.2	Entropie der Präparation	106
6.5	Quanteninformation	106
6.6	Ergänzende Themen und weiterführende Literatur	107
6.7	Übungsaufgaben	107
7	Zusammengesetzte Systeme	109
7.1	Teilsysteme	109
7.2	Produktraum	110
7.2.1	Vektoren	111
7.2.2	Operatoren	112
7.3	Grundlagen der Physik zusammengesetzter Quantensysteme	114
7.3.1	Postulat für zusammengesetzte Systeme und Ausblick	114
7.3.2	Messungen an einem Teilsystem und reduzierter Dichteoperator	116
7.3.3	Zustand nach einer Messung an einem Teilsystem	117
7.3.4	Lokale Messungen an zwei Teilsystemen	119
7.3.5	Unitäre Dynamik zusammengesetzter Systeme	123
7.4	Quantengatter für mehrere Qubit-Systeme	123
7.4.1	Verschränkung durch das CNOT-Gatter	123
7.4.2	Toffoli-Gatter	126
7.5	Ergänzende Themen und weiterführende Literatur	126
7.6	Übungsaufgaben	127
8	Verschränkung	129
8.1	Korrelationen und Verschränkung	129
8.1.1	Klassisch korrelierte Quantenzustände und LOCC	129
8.1.2	Separabilität und Verschränkung	131
8.1.3	Das Separabilitätsproblem	132
8.2	Verschränkte reine Zustände	133
8.2.1	Schmidt-Zerlegung	133
8.2.2	Schmidt-Zahl und Verschränkung	135
8.2.3	Entropie der Teilsysteme als Maß für Verschränkung	136
8.2.4	Teilsysteme in reinen Zuständen sind total isoliert	137
8.3	Erzeugung verschränkter Zustände	139
8.4	Informationsübertragung mit Überlichtgeschwindigkeit und das No-cloning-Theorem	141
8.5	Zustandsmarkierung durch Verschränkung	143
8.5.1	Welcher-Weg-Markierung	143
8.5.2	Quantenradieren	146
8.5.3	Tatsächlich „delayed choice“?	147

8.6	Ergänzende Themen und weiterführende Literatur	149
8.7	Übungsaufgaben	150
9	Korrelationen und nicht-lokale Messungen	151
9.1	Entropien und Korreliertheit zusammengesetzter Quantensysteme	151
9.1.1	Wechselseitige Information als Maß für Korreliertheit	151
9.1.2	Dreiecksungleichung	152
9.1.3	Verschränkte versus klassische korrelierte Quantensysteme	153
9.2	Nicht-lokale Messungen	156
9.2.1	Bell-Zustände	156
9.2.2	Lokale und nicht-lokale Messungen	157
9.2.3	Nicht-lokal gespeicherte Information und Bell-Messungen	159
9.3	Ergänzende Themen und weiterführende Literatur	161
9.4	Übungsaufgaben	161
10	Es gibt keine (lokal-realistische) Alternative zur Quantentheorie	163
10.1	EPR-Experimente und ihre quantentheoretische Deutung	163
10.2	Korrelierte Handschuhe	166
10.3	Lokaler Realismus	167
10.4	Verborgene Parameter, Bellsche Ungleichungen und Konflikt mit dem Experiment	168
10.5	Separable Quantengemische erfüllen die Bellsche Ungleichung	171
10.6	Bell-Verletzung als Kriterium für Verschränkung bei reinen Zuständen	172
10.7	3-Teilchen-Verschränkung und Quantennichtlokalität	172
10.7.1	GHZ-Zustand	172
10.7.2	Lokaler Realismus und Quantentheorie im Konflikt	173
10.8	Ergänzende Themen und weiterführende Literatur	174
10.9	Übungsaufgaben	175
11	Verschränkung als Hilfsmittel	177
11.1	Quantenkryptographie	177
11.1.1	Die Vernam-Verschlüsselung	177
11.1.2	B92-Protokoll	178
11.1.3	Weitere 1-Qubit-Protokolle	179
11.1.4	EPR-Protokolle	180
11.1.5	Das Schema der Quantenkryptografie	181
11.2	Ein Qubit überträgt zwei Bit (dense coding)	182
11.3	Quantenteleportation	182
11.4	Verschränkungs-austausch	184
11.5	Ergänzende Themen und weitere Literatur	185
11.6	Übungsaufgaben	186
12	Quantencomputer	187
12.1	Register und Netzwerke	187
12.2	Funktionsberechnung und Quantenparallelismus	189

12.3	Quantenparallelismus	192
12.4	Zwei einfache Quantenalgorithmen	194
12.4.1	Deutsch-Problem	194
12.4.2	Deutsch-Jozsa-Problem	195
12.5	Suchalgorithmus von Grover	197
12.6	Faktorisierungsalgorithmus von Shor	199
12.6.1	Rückführung von Faktorisierung auf Periodensuche	200
12.6.2	Quantenalgorithmus zur Periodenbestimmung	203
12.7	Quantenfehlerkorrektur mit Hilfe nicht-lokaler Messungen	207
12.7.1	Bit-Flip-Fehler	207
12.7.2	Phasen-Flip-Fehler	209
12.8	Ergänzende Themen und weiterführende Literatur	209
12.9	Übungsaufgaben	211
13	Verallgemeinerte Messungen, POVM	213
13.1	Aufgaben einer allgemeinen Dynamik offener Quantensysteme	213
13.1.1	Fragestellungen	213
13.1.2	Ein einfaches Beispiel	214
13.2	Das nicht-ideale Stern-Gerlach-Experiment als Beispiel für eine verallgemeinerte Messung	217
13.2.1	Der Versuchsaufbau	217
13.2.2	Beispiel einer verallgemeinerten Messung	219
13.2.3	Unschärfe und schwache Messungen	221
13.3	Verallgemeinerte Messungen	222
13.3.1	Was ist eine Quantenmessung?	222
13.3.2	Verallgemeinerte Messpostulate	223
13.3.3	Polare Zerlegung eines linearen Operators	224
13.3.4	Minimale Messungen	225
13.3.5	Realisierung einer verallgemeinerten Messung durch unitäre Transformation und Projektion	227
13.4	POVM-Messung	228
13.4.1	Messwahrscheinlichkeiten und positive Operatoren	228
13.4.2	Zusammengesetzte Messung als Beispiel einer POVM-Messung	229
13.4.3	Kann eine einzelne POVM-Messung zwei Zustände sicher unterscheiden?	230
13.4.4	Vorteil einer POVM-Messung bei der Zustandsermittlung	231
13.4.5	Informationell vollständiges POVM	232
13.4.6	Schätzung des Zustands vor der Messung	233
13.5	Ergänzende Themen und weiterführende Literatur	234
13.6	Übungsaufgaben	235
14	Allgemeine Entwicklung eines offenen Quantensystems und spezielle Quantenkanäle	237
14.1	Quantenoperationen und ihre Operatorsummenzerlegungen	237
14.1.1	Quantenoperationen	237

14.1.2	Operatorsummenzerlegung von Quantenoperationen	239
14.1.3	Quantenoperationen sind noch nicht die allgemeinsten Entwicklungen	240
14.1.4	Einfache Beispiele	241
14.1.5	Mehrdeutigkeit der Operatorsummenzerlegung	242
14.2	Völlig allgemeine Messung und POVM	242
14.3	Quantenkanäle	243
14.3.1	Depolarisierungskanal	243
14.3.2	Quantensprünge und Amplitudendämpfungskanal	245
14.4	Blick zurück: Das Szenario und die Regeln der Quantentheorie	245
14.5	Ergänzende Themen und weiterführende Literatur	248
14.6	Übungsaufgaben	248
15	Dekohärenz und Ansätze für die Beschreibung des Quantenmessprozesses	249
15.1	Dekohärenz erzeugende Kanäle	249
15.1.1	Phasendämpfungskanal	249
15.1.2	Streuung und Dekohärenz	251
15.1.3	Phasenflipkanal	252
15.2	Umgebungsinduzierte Dekohärenz	253
15.2.1	Die Herausbildung der klassischen Welt	253
15.2.2	Schrödingers Katze	255
15.3	Quantenmessprozess*	257
15.3.1	Das Forschungsprogramm*	257
15.3.2	Vormessung*	257
15.3.3	Verschränkung mit der Umgebung fixiert die Observable*	258
15.3.4	Verschränkung mit vielen Freiheitsgraden der Umgebung*	259
15.4	Ist das Messproblem gelöst?*	262
15.5	Die Viele-Welten-Interpretation*	263
15.6	Ergänzende Themen und weiterführende Literatur	264
15.7	Übungsaufgaben	264
16	Zwei Realisierungen von Quantenoperationen*	267
16.1	Operatorsummenzerlegung*	267
16.2	Unitäre Realisierung von Quantenoperationen*	270
16.3	Realisierung einer völlig allgemeinen Messung durch unitäre Transformation und Projektion*	271
16.4	Ergänzende Themen und Literatur	273
16.5	Übungsaufgaben	273
Literatur		275
	Literaturhinweise	275
	Literaturverzeichnis	276
Register		287

Vorwort

Dieses Buch ist ein

Lehrbuch der theoretischen Physik.

Es ist aus Vorlesungen und Seminaren entstanden, die ich in den letzten Jahren an der Universität Konstanz zum Thema

Quanteninformationstheorie und die Grundlagen der Quantentheorie

gehalten bzw. veranstaltet habe.

Die unrelativistische Quantenphysik hat in den letzten ein bis zwei Jahrzehnten eine stürmische Entwicklung durchgemacht. Quantencomputer, Quantenteleportation, Quantenkryptographie, Quanteninformation sind die typischen Schlagwörter, die über den Kreis der Physiker hinaus in populärwissenschaftlichen Artikeln und im Feuilleton mit dieser Entwicklung verbunden werden. Das Konzept der Verschränkung ist das zentrale theoretische Konzept auf diesen „neuen Wegen“ der Quantenphysik, die immer häufiger auch im Physikunterricht an den Schulen beschrieben werden. Die theoretischen Grundlagen der neuen Entwicklungen sind das Thema dieses Buches.

An wen wendet sich das Buch? Das Buch wendet sich in erster Linie an Studenten, aber darüber hinaus auch an alle, die an der Quantenphysik interessiert oder vielleicht sogar von ihr fasziniert sind. Es sollen aber nicht nur Physikstudenten und Physiker, sondern auch Studenten der Informatik, Chemie und anderer Naturwissenschaften, sowie Ingenieure und Lehrer angesprochen werden. Das Buch setzt voraus, dass der Leser schon durch eine Lehrveranstaltung oder durch Selbststudium erste Einblicke in die Quantentheorie hatte. Es fängt also nicht bei null an.

Allerdings werden alle mathematischen und physikalischen Grundkenntnisse, die für die Lektüre späterer Kapitel benötigt werden, als Einstieg in den Anfangskapiteln 1 und 2 wiederholt und aus einer für den Leser möglicherweise neuen Sicht aufgearbeitet. Dabei soll u.a. darauf vorbereitet werden, dass in der Quantentheorie die Konzepte Zustand und Zustandsentwicklung einschließlich Messung anders als in der klassischen Physik zu verstehen sind. Hierauf bauen die in den späteren Kapiteln beschriebenen Verallgemeinerungen auf. Das zweite Kapitel enthält auch ein wissenschaftstheoretisches Rüstzeug, mit dem die Frage diskutiert werden kann, auf welche Realität sich die Quantentheorie bezieht.

Anschließend steigen die Anforderungen an den Leser von Kapitel zu Kapitel an. Die Kapitel bauen aufeinander auf. Übungsaufgaben können zur Kontrolle dienen. Kursiv geschriebene Sätze fassen Ergebnisse zusammen. Fortgeschrittene Leser können mit ihrer Hilfe den Text schnell querlesen.

Zielsetzung Dieses Buch will dem Leser dabei helfen, die raschen Entwicklungen der Quanteninformationstheorie besser überblicken, einordnen und mit angemessenem Aufwand nachvollziehen zu können.

Beschränkung und Ergänzung Der Anspruch an mathematische Präzision entspricht dem der gebräuchlichen Lehrbücher der theoretischen Physik. Inhaltlich beschränke ich mich auf die theoretischen Aspekte. Die Beschreibung der entsprechenden Experimente und technischen Anwendungen würde noch einmal so viele Kapitel benötigen. Jedes Kapitel enthält aber ein Unterkapitel über ergänzende Themen und weiterführende Literatur. Dort wird auf Experimente hingewiesen.

Diese Unterkapitel weisen auch auf theoretische Übersichtsartikel und Bücher hin. Mit deren Hilfe kann der Leser das Dargestellte vervollständigen und vertiefen. Zusammenfassenden Darstellungen wurde gegenüber Originalartikeln der Vorzug gegeben. Es werden also nicht die für die Entwicklung wichtigen Arbeiten rückblickend historisch korrekt aufgelistet, vielmehr sollen in erster Linie für den Leser nützliche weiterführende Literaturhinweise gegeben werden.

Inhalt Im Anschluss an die beiden ersten Kapitel wird in Kap. 3 und 4 zunächst die Physik abgeschlossener Quantensysteme weiterentwickelt. Viele Beispiele und Anwendungen beziehen sich auf Qubits (2-Niveau-Systeme). Mit dem Dichteoperator wird das Konzept des Quantenzustands in Kap. 4 abschließend erweitert. Allgemeinere Zustände gibt es nicht. Kapitel 5 und 6 führen in das klassische bzw. quantentheoretische Entropie- und Informationskonzept ein.

Die Grundlagen der Physik zusammengesetzter Quantensysteme werden in Kap. 7 beschrieben. Dass sich Teilsysteme zusammen in einem verschränkten Zustand befinden können, hat eine Vielzahl von überraschenden Effekten zur Folge. Eine Einführung wird in Kap. 8 gegeben. Verschränkung bedingt Korreliertheit der Teilsysteme. Zur Nicht-Lokalität der Zustände treten noch die Möglichkeiten nicht-lokaler Messungen hinzu (Kap. 9).

Die experimentell nachgewiesenen spezifischen Quantenkorrelationen (EPR-Korrelationen) bestätigen die fundamentale Aussage, dass es keine klassische Alternative zur Quantentheorie gibt (Kap. 10). Diese EPR-Korrelationen können zur Grundlage einer im Prinzip völlig abhörsicheren Quantenkryptographie gemacht werden. Auch die Quantenteleportation beruht auf ihnen (Kap. 12). Für den Quantencomputer ist Verschränkung ein wesentliches Hilfsmittel. Die Ausnutzung der Quantenparallelität erlaubt es, sehr viele Funktionswerte in sehr wenigen Operationen zu berechnen. Das Problem ist dann das Auslesen der Ergebnisse (Kap. 12).

In Kap. 13 wenden wir uns der allgemeinen Dynamik offener Quantensysteme zu und diskutieren zunächst verallgemeinerte Messungen, die die projektiven Messungen als Spezialfall enthalten. Sie spielen zusammen mit den operatorwertigen Maßen (POVM) eine immer

größere Rolle in den aktuellen Publikationen. Die allgemeine Entwicklung von offenen Quantensystemen zwischen Präparation und Messung wird mit Hilfe der Quantenoperationen beschrieben. Verschiedene Quantenkanäle werden diskutiert (Kap. 14). Die Verallgemeinerung der projektiven Messungen und der unitären Transformationen führen auf ein neues Szenario der Quantenphysik.

Dekohärenz ist der Verlust der Interferenzfähigkeit und stellt daher ein Problem beim Quantencomputer dar. Umgekehrt spielt die umgebungsinduzierte Dekohärenz eine wichtige Rolle bei der Beantwortung der Frage warum es klassische Objekte gibt (Kap. 15). Es liegt nahe, diesen Ansatz auch bei der Begründung des Quantenmessprozesses zu versuchen. Mit dem Nachtrag einiger Beweise in Kap. 16 schließt das Buch ab.

Danksagungen An erster Stelle möchte ich mich bei meiner Frau für ihre Geduld bedanken. Die langjährige Zusammenarbeit mit Thomas Konrad hat sehr zum vertieften Verständnis des Stoffes beigetragen. Der „Montagsrunde“ mit Thomas Konrad, Michael Nock und Artur Scherer verdanke ich ebenfalls viele Hinweise, Anregungen und Korrekturen. Vor allen Dingen haben die vielen gemeinsamen Diskussionen dafür gesorgt, dass die Begeisterung für das Thema nicht nachgelassen hat. Joseph Demuth hat die Entstehung des Manuskripts mit Hinweisen und Kommentaren begleitet. Jan Nötzold und Marcus Kubitzki haben bei der Erstellung des Manuskripts geholfen, aber ohne das unermüdliche Engagement von Stefan Bretzel und insbesondere von Michael Nock wäre das Manuskript nicht termingerecht fertig geworden. Ihnen allen vielen Dank. Danken möchte ich schließlich noch dem Zentrum für angewandte Photonik (CAP) an der Universität Konstanz für seine Unterstützung.

Jürgen Audretsch

Konstanz, im Januar 2005

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	↔	Hilbert-Raum
Quantenzustand	↔	Vektor im oder Operator auf dem Hilbert-Raum
Entwicklung des Quantenzustands	↔	Lineare Operatoren, die auf den Vektoren wirken bzw. lineare Operatoren, die auf den Raum der Operatoren (Liouville-Raum) wirken.
Prognosen	↔	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 ($d = 2, 3, \dots$) 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 $d = 2, 3, \dots$ 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-dimensionalen 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

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* $|\varphi\rangle, |\psi\rangle, \dots$ und den hierzu dualen Vektorraum der *Bra-Vektoren* $\langle\chi|, \langle\theta|, \dots$ eingeführt (Raum der linearen Funktionale). Es ist eine Korrespondenz zwischen den Vektoren des Ket- und des Bra-Raum erklärt (wir verwenden das gleiche Kernsymbol).

$$|\varphi\rangle \xleftrightarrow{d.K.} \langle\varphi|, \quad (1.1)$$

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:

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

Daraus folgt

$$\langle c_1\varphi_1 + c_2\varphi_2|\psi\rangle = c_1^*\langle\varphi_1|\psi\rangle + c_2^*\langle\varphi_2|\psi\rangle. \quad (1.3)$$

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

$$\|\varphi\| := \|\varphi\| := \sqrt{\langle\varphi|\varphi\rangle} \quad (1.4)$$

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

$$|\langle\varphi|\psi\rangle| \leq \|\varphi\| \|\psi\| \quad (1.5)$$

¹Nach 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*

$$\|\varphi\| - \|\psi\| \leq \|\varphi - \psi\|, \quad \|\varphi + \psi\| \leq \|\varphi\| + \|\psi\|. \quad (1.6)$$

Durch Einsetzen bestätigt man

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

sowie die *Parallelogrammgleichung*

$$\|\varphi + \psi\|^2 + \|\varphi - \psi\|^2 = 2\|\varphi\|^2 + 2\|\psi\|^2. \quad (1.8)$$

Für einen Satz $\{|\varphi_1\rangle, |\varphi_2\rangle, \dots, |\varphi_l\rangle\}$ von Vektoren aus \mathcal{H}_d wird durch $\text{span}(|\varphi_1\rangle, \dots, |\varphi_l\rangle)$ 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 $\{|i\rangle, i = 1, \dots, d\}$ gilt die Identität

$$|\varphi\rangle = \sum_{i=1}^d |i\rangle \langle i | \varphi \rangle \quad (1.9)$$

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, \dots bilden Ket-Vektoren in linearer Weise aufeinander ab

$A(\alpha \psi\rangle + \beta \phi\rangle) = \alpha A \psi\rangle + \beta A \phi\rangle$	Linearität	
$(A + B) \psi\rangle = A \psi\rangle + B \psi\rangle$	Summe	
$(AB) \psi\rangle = A(B \psi\rangle)$	Produkt	(1.10)
$A \psi_a\rangle = a \psi_a\rangle$	<i>Eigenvektor</i> (eigenvector) $ \psi_a\rangle$ von A	
$\mathbb{1} \psi\rangle = \psi\rangle$	<i>Eigenwert</i> (eigenvalue) a von A	
	<i>Identitätsoperator, Einsoperator</i> (identity operator).	

($\alpha, \beta \in \mathbb{C}$). 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:

$$\langle \varphi' | = \langle \varphi | B =: | B \varphi \rangle . \quad (1.11)$$

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

$$| \psi' \rangle = A | \psi \rangle =: | A \psi \rangle . \quad (1.12)$$

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

$$| \psi' \rangle \xleftrightarrow{d.K.} \langle \psi' | = \langle A \psi | . \quad (1.13)$$

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):

$$(\langle \varphi | A) | \psi \rangle = \langle \varphi | (A | \psi \rangle) =: \langle \varphi | A | \psi \rangle . \quad (1.14)$$

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 $\langle \psi' |$:

$$\langle \psi | \xleftrightarrow{d.K.} | \psi \rangle \quad (1.15)$$

$$\langle \psi' | = \langle A \psi | \xleftrightarrow{d.K.} | \psi' \rangle = | A \psi \rangle . \quad (1.16)$$

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:

$$\langle \psi' | = \langle A \psi | =: \langle \psi | A^\dagger . \quad (1.17)$$

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.

$$\langle A \psi | \varphi \rangle = (\langle \psi | A^\dagger) | \varphi \rangle = \langle \psi | (A^\dagger | \varphi \rangle) = \langle \psi | A^\dagger \varphi \rangle = \langle \psi | A^\dagger | \varphi \rangle \quad (1.18)$$

und fassen zusammen

$$\langle A \psi | \varphi \rangle = \langle \psi | A^\dagger \varphi \rangle = \langle \psi | A^\dagger | \varphi \rangle . \quad (1.19)$$

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

$$\langle \psi | A^\dagger | \varphi \rangle = \langle \varphi | A \psi \rangle^* = \langle \varphi | A | \psi \rangle^* . \quad (1.20)$$

Zweifache Anwendung der Gl. (1.20) ergibt

$$\langle \varphi | A | \psi \rangle = (\langle \varphi | A | \psi \rangle^*)^* = \langle \psi | A^\dagger | \varphi \rangle^* = \langle \varphi | (A^\dagger)^\dagger | \psi \rangle \quad (1.21)$$

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

$$(A^\dagger)^\dagger = A \quad (1.22)$$

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

$$\langle A^\dagger \psi | \varphi \rangle = \langle \psi | A \varphi \rangle = \langle \psi | A | \varphi \rangle . \quad (1.23)$$

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

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

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

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

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

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

$$(\alpha|u\rangle\langle v|)^\dagger = \alpha^*|v\rangle\langle u| . \quad (1.26)$$

Für Operatorprodukte finden wir

$$A|u\rangle\langle v| = |Au\rangle\langle v| , \quad |u\rangle\langle v|A = |u\rangle\langle A^\dagger v| . \quad (1.27)$$

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

$$\mathbb{1} = \sum_i |i\rangle\langle i| . \quad (1.28)$$

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)

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

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

$$A^\dagger = \sum_{i,j} A_{ij}^* |j\rangle\langle i|. \quad (1.30)$$

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

$$\|A\| := \max_{\langle\varphi|\varphi\rangle=1} |\langle\varphi|A|\varphi\rangle|. \quad (1.31)$$

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

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

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:

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

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

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

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

$$N|i\rangle = \lambda_i|i\rangle \quad (1.35)$$

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

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

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

$$N = \sum_i \lambda_i|i\rangle\langle i| \quad (1.37)$$

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

$$|\psi\rangle = \sum_{i=1}^g c_i|i\rangle \quad (1.38)$$

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

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

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

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

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 :*

$$[N, N^\dagger]_- = 0. \quad (1.41)$$

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.

$$N|1\rangle = \lambda|1\rangle, \quad \langle 1|N^\dagger = \lambda^*\langle 1|. \quad (1.42)$$

Daraus folgt

$$\langle 1|N|1\rangle = \lambda, \quad \langle 1|N^\dagger|1\rangle = \lambda^* \quad (1.43)$$

und damit

$$N^\dagger|1\rangle = \lambda^*|1\rangle + |a\rangle, \quad \langle 1|N = \lambda\langle 1| + \langle a| \quad (1.44)$$

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

$$0 = \langle 1|[N, N^\dagger]_-|0\rangle = \langle a|a\rangle. \quad (1.45)$$

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

$$N^\dagger|1\rangle = \lambda^*|1\rangle, \quad \langle 1|N = \lambda\langle 1|. \quad (1.46)$$

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

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

den Operator M ein:

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

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.

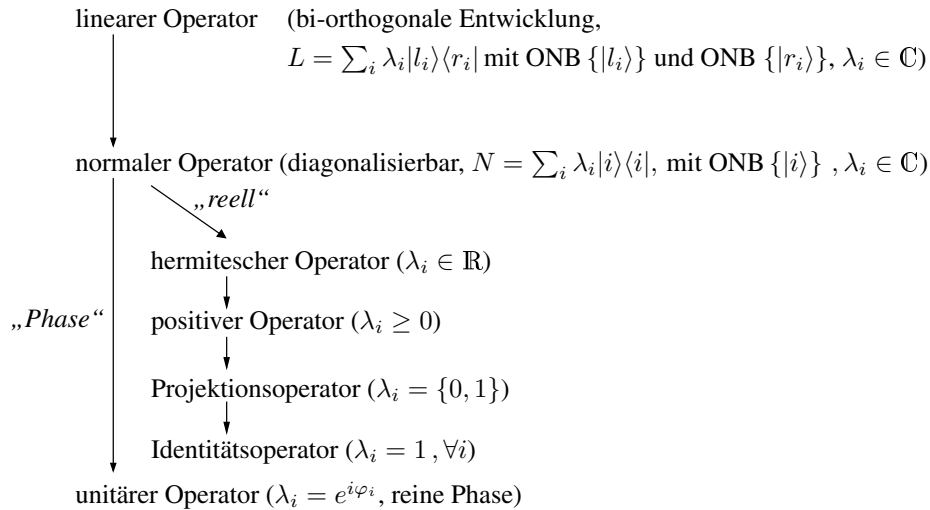


Abbildung 1.1: Operatorenhierarchie. Charakterisierung von Operatoren durch ihre dyadische Zerlegung. \rightarrow ist jeweils die Richtung einer Spezialisierung. In den Klammern () werden die Eigenwerte charakterisiert. Man beachte, dass mit $\lambda_i = \{1, -1\}$ spezielle hermitesche Operatoren auch 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.

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

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

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

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

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 eine wichtige Rolle: *Hermitesche Operatoren*

besitzen eine Spektralzerlegung mit einer ONB $\{|i\rangle\}$

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

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

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

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 $|a, b\rangle$:

$$A|a, b\rangle = a|a, b\rangle, \quad B|a, b\rangle = b|a, b\rangle. \quad (1.54)$$

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*

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

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:

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

$$U(t_2)U(t_1) = U(t_2 + t_1). \quad (1.57)$$

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

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

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*

$$\|T\varphi\| = \|\varphi\| \quad (1.59)$$

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

$$\langle T\varphi|T\psi\rangle = \langle\varphi|\psi\rangle. \quad (1.60)$$

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

$$\langle\varphi|A|\varphi\rangle \geq 0 \quad \forall|\varphi\rangle, \quad (1.61)$$

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

$$A \geq 0. \quad (1.62)$$

Weiterhin erklären wir

$$A \geq B \Leftrightarrow (A - B) \geq 0. \quad (1.63)$$

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

$$A = \sum_i a_i |i\rangle\langle i|, \quad a_i \geq 0. \quad (1.64)$$

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

$$A = B^\dagger B \quad (1.65)$$

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

$$B = \sum_i \sqrt{a_i} |\varphi_i\rangle\langle i|. \quad (1.66)$$

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.

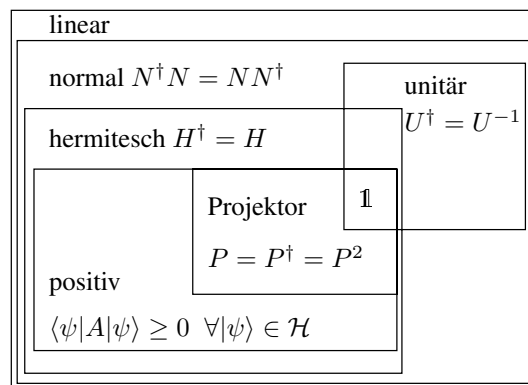


Abbildung 1.2: „Schnittmengen“ der Operatortypen

Aus dieser Eigenschaft folgt

$$\langle v|P|v\rangle = \langle v|PP|v\rangle = \langle v|P^\dagger P|v\rangle = \|P|v\rangle\|^2 \geq 0. \quad (1.67)$$

P ist daher ein positiver Operator und es gilt

$$P = \sum_i p_i |i\rangle\langle i|; \quad p_i \geq 0 \quad (1.68)$$

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

$$P^2 = \sum_i p_i^2 |i\rangle\langle i|, \quad P = \sum_i p_i |i\rangle\langle i|, \quad (1.69)$$

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

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

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 $|A\rangle, |B\rangle, \dots$ die linearen Operatoren A, B, \dots auf einem Hilbert-Raum sind. Man prüft leicht nach, dass diese linearen Operatoren tatsächlich die Axiome eines linearen Vektorraums erfüllen. Wir werden die Klammern $| \rangle$ 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

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

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

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

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

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

Operatorbasis Zwei Operatoren A und B heißen orthogonal, wenn

$$(A|B) = 0 \quad (1.74)$$

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

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

zerlegen:

$$|A) = \sum_{s=1}^{d^2} |Q_s\rangle\langle Q_s|A) . \quad (1.76)$$

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)

$$(A|B) := \text{tr}[A^\dagger B] . \quad (1.77)$$

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

$$A = \sum_{s=1}^{d^2} Q_s \text{tr}[Q_s^\dagger A] \quad (1.78)$$

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

$$\left(|i\rangle\langle j| \middle| |i'\rangle\langle j'| \right) = \delta_{ii'} \delta_{jj'} . \quad (1.79)$$

1.2.2 Superoperatoren

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

$$|A\rangle \rightarrow |A\rangle = \mathcal{S}|A\rangle = |\mathcal{S}A\rangle . \quad (1.80)$$

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

$$A \rightarrow B = \mathcal{S}A . \quad (1.81)$$

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

$$B \rightarrow \mathcal{A}B := ABA^{-1} \quad (1.82)$$

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

$$\mathcal{A}^{-1}B = A^{-1}BA \quad (1.83)$$

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

$$A \rightarrow \mathcal{L}A := \frac{1}{\hbar} [H, A]_- . \quad (1.84)$$

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

$$\mathcal{L}^2 A = \frac{1}{\hbar^2} [H, [H, A]_-]_- . \quad (1.85)$$

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.