

**Julius-Maximilians-Universität  
Würzburg**

Erste Staatsprüfung für ein Lehramt an Gymnasien 2019

Schriftliche Hausarbeit

Thema: „Die mathematische Struktur der Quantenmechanik“

eingereicht von: Juliane Fischer

Fach: Physik

eingereicht am:

Dozent: Prof. Dr. Wolfgang Kinzel

## Vorwort

Der berühmte Physiker und geschätzte Dozent Richard Feynman schrieb 1990 in seinem Buch *Vom Wesen physikalischer Gesetze* folgende Worte: „Früher konnte man in den Zeitungen lesen, es gebe nur zwölf Menschen, die die Relativitätstheorie verstünden. Das glaube ich nicht. [...] Andererseits kann ich mit Sicherheit behaupten, daß niemand die Quantenmechanik versteht.“<sup>1</sup> Aufgrund seines Wissens um die Komplexität der Quantenphysik machte er es sich zur Aufgabe, die abstrakten Zusammenhänge dieser physikalischen Disziplin möglichst anschaulich und verständlich zu erklären und für Studenten leichter zugänglich aufzubereiten. Angelehnt an diese Idee ist es das Ziel dieser Arbeit, die mathematische Struktur der Quantenmechanik in einem für Studenten interessanten Umfang schrittweise zu erläutern und mit anschaulichen Beispielen zu umrahmen.

---

<sup>1</sup> vgl. Richard P. Feynman. *Vom Wesen physikalischer Gesetze*. München 1990, S. 159 f.

## Gliederung

1	Ein Streifzug durch die Quantenmechanik.....	5
2	Der Hilbert-Raum.....	7
2.1	Vektorraum über einem Zahlenkörper.....	12
2.1.1	Gruppe.....	13
2.1.2	Körper.....	14
2.1.3	Vektorraum.....	18
2.2	Das Skalarprodukt.....	21
2.2.1	Normierter Raum.....	24
2.2.2	Metrischer Raum.....	26
2.3	Vollständiger Raum.....	28
2.4	Der Äquivalenzklassenraum $\mathcal{L}_2$ als Beispiel für einen Hilbert-Raum.....	33
2.4.1	Die Unvollständigkeit des Raumes $\mathcal{C}[a, b]$ .....	33
2.4.2	Der Vektorraum $\tilde{\mathcal{L}}_2(E, \mathcal{F}, \mu)$ der messbaren Funktionen.....	35
2.4.3	Äquivalenzrelation.....	38
3	Vollständiges Orthonormalsystem.....	43
4	Der Messprozess in der Quantenmechanik.....	51
4.1	Operatoren.....	56
4.1.1	Der Kommutator.....	60
4.1.2	Lineare Operatoren.....	62
4.1.3	Überall definite Operatoren.....	62
4.1.4	Gleichheit von Operatoren.....	63
4.1.5	Beschränktheit von Operatoren.....	63
4.1.6	Stetigkeit von Operatoren.....	64
4.1.7	Der inverse Operator.....	64
4.1.8	Eigenvektor und Eigenwert.....	66
4.2	Der Dualraum.....	69
4.3	Der adjungierte und der selbstadjungierte Operator.....	74
4.4	Der Projektor.....	80
4.5	Beispiele für quantenmechanische Operatoren.....	85
4.6	Stochastische Größen beim Messprozess.....	93
4.7	Die Unschärferelation.....	94
5	Der Drehimpulsoperator.....	96
6	Ein kleiner Einblick in die Welt Quantencomputer.....	101

7	Abbildungsverzeichnis.....	106
8	Literaturverzeichnis.....	107
	Eidesstattliche Erklärung.....	109

## 1 Ein Streifzug durch die Quantenmechanik

Um die Wende vom 19. zum 20. Jahrhundert kristallisierten sich bei der Erklärung von Phänomenen aus der mikroskopischen Welt immer deutlicher die Grenzen der klassischen Physik heraus. Für Teilchen wie Elektronen und Atome oder für das Licht galten offensichtlich andere Gesetzmäßigkeiten als für Objekte, die mit bloßem Auge beobachtet werden konnten. Über die Jahre entwickelte sich daher ein neuer Fachbereich, dem es zunehmend besser gelang, die Phänomene auf Teilchenebene zu erklären: Die Quantenphysik. Ihren Anfang nahm sie im Jahr 1900, als Max Planck bei der Entwicklung seines Strahlungsgesetzes die Annahme traf, die Energie des Lichtes könne in einem schwarzen Körper nur in diskreten Quanten vorkommen.<sup>2</sup> Trotz dieser Erkenntnis herrschte weiterhin die Vorstellung, dass Strahlung in Form von Licht oder bewegten Quantenteilchen entweder als Welle oder als Teilchen beschrieben werden muss, diese Eigenschaften aber nicht in sich vereinen kann.<sup>3</sup> Erst fünf Jahre später postulierte Albert Einstein nach Untersuchungen des photoelektrischen Effekts den Teilchencharakter von Licht. Diese Vorstellung wurde lange Zeit kritisiert und von vielen Physikern nicht anerkannt. So auch von Max Planck, der Einsteins Deutung noch 1913 als „über das Ziel hinausgeschossen“<sup>4</sup> bezeichnete. Im Jahr 1924 postulierte der französische Physiker Louis de Broglie auch für materielle Teilchen, wie beispielsweise Elektronen, den Welle-Teilchen-Dualismus. Nach seiner Theorie besitzt nicht nur Licht, sondern auch Materie Welleneigenschaften und jedem Quant mit dem wohldefinierten Impuls  $p$  kann die Wellenlänge  $\lambda = \frac{h}{p}$  zugeordnet werden. Diese wurde zu seinen Ehren als De-Broglie-Wellenlänge bezeichnet. Das in dieser Beziehung vorkommende  $h$  ist eine als Planck'sches-Wirkungsquantum bezeichnete Naturkonstante. Nach bereits früheren experimentellen Nachweisen dieser Theorie, darunter der 1923 beobachtete Compton-Effekt oder das 1927 durchgeführte Davisson-Germer-Experiment, gelang es dem deutschen Physiker Claus Jönsson im Jahr 1962 das zuvor von Thomas Young für Licht entwickelte Doppelspaltexperiment mit Elektronen durchzuführen und dadurch die Welle-Teilchen-Hypothese für Materie abermals zu bestätigen. Hierbei schoss der Physiker Elektronen so auf einen Doppelspalt, dass er dahinter auf einem fluoreszierenden Schirm ein Interferenzmuster beobachten konnte, welches dem Muster von monochromatischem gebeugtem Licht sehr stark ähnelte.

---

<sup>2</sup> vgl. Alfred Ziegler und Rahel Vortmeyer-Kley. Physik verständlich. Haan-Gruiten 2016, S. 363 ff.

<sup>3</sup> vgl. Torsten Fließbach. Quantenmechanik. Berlin 2018, S. 1.

<sup>4</sup> Alfred Ziegler. Physik verständlich, S. 367.

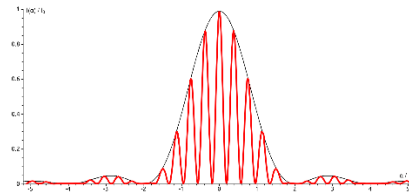
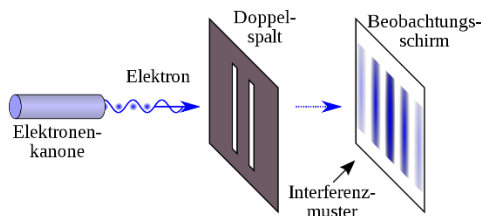


Abb. 1: Doppelspaltexperiment mit Elektronen<sup>5</sup>

Abb. 2: Intensitätsverteilung Doppelspaltexperiment<sup>6</sup>

Der für Licht und auch für Materie entdeckte Welle-Teilchen-Dualismus stellt eine wichtige Erkenntnis der Quantenmechanik dar.

Für ihre mathematische Beschreibung wurden 1925/26 zunächst zwei verschiedene Ansätze verfolgt. Erwin Schrödinger benutzte hierfür die Wellenmechanik und entwickelte die nach ihm benannte Schrödingergleichung. Im Gegensatz zur klassischen Mechanik, in der die Bewegung eines Objektes eindeutig durch eine Bahn beschrieben werden kann, existieren in der Quantenmechanik keine solchen Bahnen. Die Quantenobjekte werden durch Wellenfunktionen  $\psi(\vec{x}, t)$  dargestellt, welche den Zustand des Teilchens und die Wahrscheinlichkeiten für Messergebnisse charakterisieren. Der Zustand ist beispielsweise durch den Ort, den Impuls oder die Energie charakterisiert. Die Wellenfunktionen sind die Lösungen der Schrödingergleichung, welche in Form einer partiellen Differentialgleichung eindeutig die zeitliche Entwicklung des quantenmechanischen Zustands eines nichtrelativistischen Systems beschreibt. Für ein einzelnes Teilchen der Masse  $m$  im orts- und zeitabhängigen Potential  $U(\vec{x}, t)$  lautet diese wie folgt:

$$i\hbar \frac{\partial \psi(\vec{x}, t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta^2 \psi(\vec{x}, t) + U(\vec{x}, t)\psi(\vec{x}, t)$$

Der Messprozess sorgt allerdings für ein Eingreifen in dieses Quantensystem, wodurch der Zustand geändert wird und nur noch statistische Aussagen möglich sind.

Heisenberg, Born und Jordan verwendeten dagegen eine diskrete Matrizenmechanik für die mathematische Darstellung der Quantenmechanik. Die Grundidee besteht darin, die linearen Operatoren, welche die Messung eines Zustandes beschreiben, durch Matrizen darzustellen. Je nach untersuchtem Problem können diese endlich oder unendlich dimensional sein, was eine Beschreibung erheblich erschweren kann.

<sup>5</sup> Johannes Kalliauer. An illustration of the 'Double-slit experiment' in physics. In: Wikipedia Doppelspaltexperiment. erst. 06.08.2017. <https://de.wikipedia.org/wiki/Doppelspaltexperiment> [11.03.2019.] license: CC0 1.0.

<sup>6</sup> Klaus-Dieter Keller. Intensitätsverteilung beim Doppelspalt mit der Einhüllenden. In: Wikipedia Doppelspaltexperiment. erst. 02.05.2013. <https://de.wikipedia.org/wiki/Doppelspaltexperiment> [11.03.2019.] license: CC BY 3.0.

Obwohl die Wellen- und Matrizenmechanik äußerlich sehr verschieden waren, führten sie nicht nur zu denselben Ergebnissen, sondern waren mathematisch sogar völlig äquivalent, was Schrödinger einige Jahre später nachweisen konnte.<sup>7</sup> In den Jahren 1930 und 1932 gelang es Paul Dirac bzw. John von Neumann diese beiden Ansätze zu vereinen und die für heute maßgebende mathematische Beschreibung der Quantenmechanik zu entwickeln. Bei dieser Darstellung werden die quantenmechanischen Zustände als abstrakte Elemente eines besonderen Vektorraumes, eines Hilbert-Raumes, behandelt. Dies ermöglicht eine sehr vorteilhafte koordinatenunabhängige Beschreibung des Systems. Obwohl dies auf Kosten der Anschaulichkeit geschieht, überwiegen für die Wissenschaftler deutlich ihre Vorteile, sodass sich diese abstrakte Beschreibung als Standardsprache der Quantenmechanik durchgesetzt hat. In den folgenden Kapiteln soll auf Grundlage der Funktionalanalysis der mathematische Formalismus der Quantenmechanik nach von Neumann und Dirac schrittweise erklärt und in verschiedenen physikalischen Beispielen umgesetzt werden. Dafür wird zunächst der zu Grunde liegende mathematische Raum, der Hilbert-Raum, definiert und mit dem  $\mathcal{L}_2$  ein für die Quantenmechanik wichtiges Beispiel erläutert. Anschließend soll eine besondere Teilmenge des Hilbert-Raumes, das vollständige Orthonormalsystem, untersucht werden, mit welchem eine strukturiertere Beschreibung des Raumes ermöglicht wird. Bevor der Drehimpuls in einem abschließenden Beispiel näher analysiert werden kann, wird der quantenmechanische Messprozess auf physikalischer und mathematischer Ebene untersucht. Dieser ermöglicht es, Informationen über das System und dessen mögliche Zustände zu gewinnen.

## 2 Der Hilbertraum

Der Physiker Erwin Schrödinger verwendete zur Beschreibung quantenmechanischer Zustände Wellenfunktionen. Diese können je nach Wahl der Basis sowohl im Ortsraum als auch im Impulsraum aufgestellt werden. Um für eine Funktion die Darstellung wechseln zu können und sie beispielsweise vom Ortsraum in den Impulsraum zu übertragen, muss mit Hilfe einer Fourier-Transformation ein Basiswechsel durchgeführt werden. Dies kann unter Umständen sehr aufwändig und umständlich sein und erfordert viel mathematisches Geschick. Stattdessen ist es v

---

<sup>7</sup> vgl. Eckhard Rebban. Theoretische Physik: Quantenmechanik. Heidelberg 2008, S. 2.

urteilhaft, die Zustände unabhängig von ihren Koordinaten zu beschreiben und nach dem Rechenprozess die richtigen physikalischen Schlüsse zu ziehen. Genau dies leistet die von von Neumann und Dirac entwickelte Formulierung der Quantenmechanik, welche den mathematischen Apparat der Analysis und Funktionalanalysis benutzt. Auf Kosten der Anschaulichkeit und Intuition hat diese gegenüber der Wellenmechanik den Vorteil, quantenmechanische Zustände allgemein und unabhängig von einer speziellen Darstellung zu formulieren.

Ausgangspunkt ist die Betrachtung eines quantenmechanischen **Systems**, das sich in einem bestimmten **Zustand** befindet und in dem es verschiedene beobachtbare Größen, sogenannte **Observablen**, gibt. Dabei handelt es sich beispielsweise um den Ort, den Impuls, die Energie oder den Spin eines Teilchens. Wie in der klassischen Physik können Informationen über die Eigenschaften eines Systems nur gewonnen werden, indem eine **Messung** hieran durchgeführt wird. Dieser Prozess unterscheidet sich allerdings grundlegend von denen der makroskopischen Welt und kann daher nicht aus der klassischen Perspektive heraus betrachtet werden. Wie diese Besonderheiten aussehen, soll im Verlauf dieser Arbeit genauer beleuchtet werden. Um die theoretischen Begriffe System, Zustand, und Observable etwas greifbarer zu machen, sollen sie nun anhand des quantenmechanischen linearen harmonischen Oszillators beispielhaft untersucht werden.

---

#### Beispiel für quantenmechanisches System: linearer harmonischer Oszillator

---

Beim harmonischen Oszillator kommt einem vermutlich zunächst derjenige aus der klassischen Physik in den Sinn. Dieser beschreibt einen Massepunkt, auf welchen eine Kraft wirkt, die proportional zum Abstand von der Ruhelage ist. Je größer die Auslenkung aus der Ruhelage, desto stärker ist die Kraft, die auf den Körper in Richtung der Ruhelage wirkt. Beim *linearen* harmonischen Oszillator werden nur Auslenkungen entlang einer Achse, also der eindimensionale Fall, betrachtet. Bei diesem System handelt es sich allerdings nur um ein Modell, das nicht exakt so auf reale Fälle übertragen werden kann, für viele Systeme aber eine gute Näherung darstellt. So beispielsweise auch ein Massestück, das an einer Feder hängt und nur kleine Auslenkungen aus der Ruhelage erfährt. Wird das Massestück aus der Ruhelage ausgelenkt, sorgt die Rückstellkraft für eine Schwingung der Masse um seine Ruhelage.



Auch beim quantenmechanischen linearen harmonischen Oszillator handelt es sich um ein Modellsystem, welches sich in guter Näherung auf verschiedene physikalische Konstellationen anwenden lässt. Beispielsweise können hierdurch die Bindungsverhältnisse zwischen Atomen in einem Molekül genähert sowie Molekül- und Kristallschwingungen beschrieben werden.<sup>8</sup> Obwohl es grundsätzlich problematisch ist, sich quantenmechanische Phänomene bildlich vorzustellen und damit die Gefahr einzugehen, diese klassisch zu interpretieren, kann dies teilweise dennoch helfen, ein Grundverständnis für die abstrakten Phänomene zu entwickeln. Allerdings sollte dabei immer im Hinterkopf behalten werden, dass diese Bilder nicht der Realität entsprechen und nicht verabsolutiert werden dürfen. Eine Schwingung von Atomen in einem Molekül könnte man sich anschaulich als Massepunkte vorstellen, die durch Federn miteinander verbunden sind und gegeneinander ausgelenkt werden. Je nach Form des Moleküls sind hierbei verschiedene Schwingungsmoden möglich. Welche Grenzen dieses Bild allerdings mit sich bringt, wird in Kürze deutlich werden.

Das Modell des quantenmechanischen harmonischen Oszillators beschreibt ein Teilchen, beispielsweise ein Elektron, das sich in einem Potential der Form

$$U(x, t) = \frac{1}{2}kx^2$$

befindet, wobei  $k$  eine Konstante und  $x$  die Auslenkung aus der Ruhelage beschreiben. Die quadratische Ortsabhängigkeit dieses Potentials kann graphisch durch eine Parabel veranschaulicht werden:

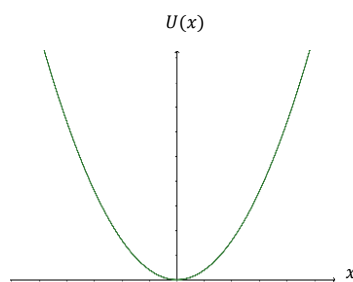


Abb. 3: Potentialverlauf des linearen harmonischen Oszillators<sup>9</sup>

Die Besonderheit des quantenmechanischen harmonischen Oszillators gegenüber dem klassischen Modell liegt in der Quantelung der Energiezustände. Der Oszillator und damit das Teilchen im Potential kann nicht beliebige Energiemengen aufnehmen, sondern nur

<sup>8</sup> vgl. Albert Messiah. Quantenmechanik. Berlin 1991, S. 385.

<sup>9</sup> selbst erstellt.

Portionen fester Größe in Form von Energiequanten, sodass nur ganz bestimmte diskrete Energiezustände für dieses System möglich sind. Beim klassischen Modell ist dies anders. Hier ist bekannt, dass die Feder kontinuierlich um beliebige Strecken ausgelenkt werden kann und sich die potentielle Energie des Massestücks dementsprechend kontinuierlich ändert. Damit werden bereits die ersten Grenzen der klassischen Verbildlichung der Molekülschwingungen deutlich. Diese können nicht wie die klassische Feder beliebige Energiemengen aufnehmen, sondern nur ganz bestimmte diskrete Werte. Ein weiterer Unterschied besteht im Energiewert des Grundzustandes. Ist das Massestück in Ruhe an der Feder montiert, ohne ausgelenkt zu sein, so besitzt es keine potentielle Energie. Der quantenmechanische harmonische Oszillator besitzt allerdings auch im Grundzustand, also am absoluten Temperaturnullpunkt bei  $T = 0K$ , einen von null verschiedenen Energiewert, die Nullpunktsenergie  $E_0$ . Die Ursache hierfür liegt im Pauli-Prinzip. Dies soll allerdings erst später genauer betrachtet werden. Abhängig von der Energie, die im harmonischen Oszillator gespeichert ist, befindet er sich auf einem anderen Energieniveau. Wird von außen Energie zugefügt, beispielsweise durch das Einstrahlen von Licht, wechselt er auf ein höheres Energieniveau.

Nun können diesem quantenmechanischen Beispiel die oben eingeführten Begriffe zugeordnet werden: Beim betrachteten *System* handelt es sich um den quantenmechanischen linearen harmonischen Oszillator. Dieser kann verschiedene *Zustände* annehmen, beispielsweise den Grundzustand. Der Zustand ist abhängig davon, wie viel Energie im System gespeichert ist. Als messbare Größe, als *Observable*, interessiert dementsprechend dieser Energiewert.

<b>Physikalisches Konstrukt</b>		<b>Beispiel</b>
System	↔	quantenmechanischer linearer harmonischer Oszillator
Zustand	↔	Energiezustand
Observable	↔	Energie

Das Beispiel des quantenmechanischen harmonischen Oszillators soll während der gesamten Arbeit schrittweise untersucht und anhand dessen sollen die jeweiligen Definitionen und mathematischen Strukturen verdeutlicht werden.

Nachdem mit dem quantenmechanischen harmonischen Oszillator ein konkretes physikalisches Beispiel eingeführt wurde, soll nun die mathematische Beschreibung der vier Elemente System, Zustand, Observable und Messprozess untersucht werden:

Das quantenmechanische *System* wird nach der Abhandlung von Neumanns durch einen speziellen Vektorraum, einen Hilbert-Raum  $\mathcal{H}$  über dem Körper der komplexen Zahlen  $\mathbb{C}$ , dargestellt. Bei diesem handelt es sich um eine Menge von Vektoren, auf der bestimmte Rechenoperationen und Strukturen definiert sind. Die Elemente des Hilbert-Raumes, sprich die Vektoren  $\psi \in \mathcal{H}$ , beschreiben die *Zustände* dieses Quantensystems. Unter der Bezeichnung Vektoren sind allerdings keine vektoriellen Größen zu verstehen, die durch Betrag und Richtung charakterisiert werden, wie es für einen Physiker zunächst intuitiv denkbar wäre, sondern ganz allgemein die Elemente eines Vektorraumes und damit insbesondere auch eines Hilbert-Raumes. Handelt es sich hierbei aber beispielsweise um den  $\mathbb{R}^2$  oder den  $\mathbb{R}^3$ , so kann durchaus zur Veranschaulichung auf die Pfeildarstellung zurückgegriffen werden. In dem für die Quantenphysik wichtigen Hilbert-Raum  $\mathcal{L}_2$  sind die Elemente, sprich die Zustandsvektoren, dagegen Funktionen bzw. Funktionenklassen, bei denen eine solche Darstellung nicht möglich ist. Dieser Raum wird später detaillierter betrachtet werden.

Zur Darstellung einer *Observable* dient ein selbstadjungierter Operator  $\hat{A}$ , der auf dem Hilbert-Raum definiert ist. Bei einem solchen Operator handelt es sich um eine lineare Abbildung von  $\mathcal{H}$  in  $\mathcal{H}$ , welche einen Vektor aus diesem Raum auf einen anderen Vektor hieraus abbildet und nur reelle Eigenwerte besitzt.<sup>10</sup> Zur Beschreibung des quantenmechanischen Messprozesses muss die Eigenwertgleichung des entsprechenden Operators gelöst werden. Die zugehörigen Eigenwerte bilden dann die möglichen Messwerte für die Observable. Soll also beispielsweise die Energie eines Zustands bestimmt werden, so muss die Eigenwertgleichung des Energieoperators gelöst werden. Die so bestimmten Eigenwerte stellen die möglichen Energiewerte des Systems dar.

In übersichtlicher Weise sieht die Zuordnung der physikalischen Konstrukte zu den mathematischen Beschreibungen demnach wie folgt aus:

---

<sup>10</sup> vgl. Hans Jürgen Korsch. Mathematik der Quantenmechanik. Hannover 2013, S. 13.

<b>Physikalisches Konstrukt</b>		<b>Mathematische Beschreibung</b>
System	$\Leftrightarrow$	Hilbert-Raum $\mathcal{H}$ über $\mathbb{C}$
Zustand	$\Leftrightarrow$	Vektor $\psi \in \mathcal{H}$
Observable	$\Leftrightarrow$	selbstadjungierter Operator $\hat{A}$ auf $\mathcal{H}$
Messprozess	$\Leftrightarrow$	Eigenwertproblem <sup>11</sup>

Wie diese Zusammenstellung bereits deutlich macht, bildet der Hilbert-Raum die grundlegende Struktur, die für die mathematische Beschreibung der Quantenmechanik notwendig ist. In ihm leben die Zustände des Systems und die Operatoren bilden lineare Abbildungen vom Hilbert-Raum in ihn selber. Dieser ist wie folgt charakterisiert:

Ein Hilbert-Raum ist

- 1) ein **Vektorraum** über dem Körper der komplexen Zahlen  $\mathbb{C}$
- 2) auf welchem ein **Skalarprodukt** definiert ist
- 3) und welcher **vollständig** ist.

Diese drei Eigenschaften sollen im Folgenden schrittweise erläutert und anhand von Beispielen plausibel gemacht werden.

## 2.1 Vektorraum über einem Zahlenkörper

Bei einem Vektorraum handelt es sich um eine Menge von Elementen, die nach ganz bestimmten Regeln miteinander verknüpft werden können. Hierzu zählen die Addition zweier Vektoren sowie die Multiplikation eines Vektors mit einer Zahl, die sogenannte skalare Multiplikation. Diese Zahl stammt allerdings nicht aus der Menge der Vektoren, sondern aus dem zugrundeliegenden Körper, beispielsweise den komplexen Zahlen. Um den Vektorraum mathematisch in seiner Gesamtheit definieren zu können, werden zunächst die Strukturen Gruppe und Körper betrachtet und anschließend zu dem größeren Gebilde Vektorraum zusammengesetzt.

---

<sup>11</sup> vgl. Hans Jürgen Korsch. Mathematik der Quantenmechanik, S. 13.

### 2.1.1 Gruppe

Eine Gruppe  $(G, \circ)$  ist eine Menge von Elementen  $G = \{g, h, k \dots\}$  versehen mit einer Verknüpfung

$$\circ: G \times G \rightarrow G, \quad (g, h) \mapsto g \circ h,$$

sodass folgende Eigenschaften erfüllt sind:

- Es gibt ein neutrales Element, also ein Element  $e \in G$  mit der Eigenschaft  $e \circ g = g$  und  $g \circ e = g$  für alle  $g \in G$ .
- Für jedes  $g \in G$  gibt es ein inverses Element  $h \in G$  mit  $g \circ h = e$  und  $h \circ g = e$ .
- Für alle  $g, h, k \in G$  gilt das Assoziativgesetz  $(g \circ h) \circ k = g \circ (h \circ k)$

Ist zusätzlich die Reihenfolge bei der Verknüpfung der Elemente vertauschbar, also stimmen  $h \circ g$  und  $g \circ h$  für alle  $g, h \in G$  überein, so wird  $G$  als abelsche (kommutative) Gruppe bezeichnet.

---

Beispiel für eine Gruppe: Die ganzen Zahlen  $\mathbb{Z}$

---

Ein Beispiel für eine abelsche Gruppe sind die ganzen Zahlen mit der Addition als Verknüpfung. In verkürzter Schreibweise sagt man:  $(\mathbb{Z}, +)$  bildet eine Gruppe.

- ⇒ Neutrales Element ist die 0, denn für alle  $x \in \mathbb{Z}$  gilt:  $x + 0 = x$  und  $0 + x = x$ .
- ⇒ Das Inverse zu einem Element  $x$  wird durch dieselbe Zahl mit umgedrehtem Vorzeichen dargestellt:  $-x$ . Es gilt  $x + (-x) = 0$  und  $(-x) + x = 0$ .
- ⇒ Das Assoziativgesetz ist für alle  $g, h, k \in \mathbb{Z}$  erfüllt.

$$\text{Beispiel: } 2 + (3 + (-4)) = 1 = (2 + 3) + (-4)$$

---

Weitere Beispiele für Gruppen bilden die reellen Zahlen mit der Addition  $(\mathbb{R}, +)$  oder die reellen Zahlen ohne Null mit der Multiplikation  $(\mathbb{R} \setminus \{0\}, \cdot)$ . Bei letzterem Beispiel ist die eins das neutrale Element und die reelle Zahl  $x$  besitzt das Inverse  $\frac{1}{x}$ . Die gesamte Menge der reellen Zahlen einschließlich der Null bilden aber bezüglich der Multiplikation keine Gruppe, da die Null kein multiplikatives Inverses besitzt. Diese Erkenntnis spielt im Folgenden bei der Körperkonstruktion eine wichtige Rolle.

### 2.1.2 Körper

Jeder Vektorraum benötigt einen Körper, über dem er definiert werden kann und mit dessen Elementen die skalare Multiplikation ausgeführt wird. Anders als bei einer Gruppe werden bei einem Körper **zwei** Verknüpfungen auf einer Grundmenge definiert, welche ebenfalls besondere Eigenschaften erfüllen müssen.

Die Menge  $K$ , wobei hier  $K = \{a, b, c, \dots\}$  gelten soll, heißt Körper, wenn auf ihr die beiden Verknüpfungen Addition und Multiplikation definiert sind und diese folgende Bedingungen erfüllen:

Die Menge  $K$  ist bezüglich der Addition

$$+: \quad K \times K \rightarrow K, \quad (a, b) \mapsto a + b$$

eine abelsche (kommutative) Gruppe.

Die Menge  $K^* = K \setminus \{0\}$  muss bezüglich der Multiplikation

$$\cdot: \quad K^* \times K^* \rightarrow K^*, \quad (a, b) \mapsto a \cdot b$$

eine abelsche Gruppe bilden.

Zudem muss für alle  $a, b, c \in K$  das Distributivgesetz erfüllt werden:

$$a \cdot (b + c) = a \cdot b + a \cdot c \quad \text{und} \quad (a + b) \cdot c = a \cdot c + b \cdot c$$

Dieses Rechengesetz schreibt die Verknüpfung der zuvor getrennt behandelten Addition und Multiplikation vor.

Für einen Körper muss die Grundmenge ohne Null bezüglich der Multiplikation eine Gruppe bilden. Dies ist, wie oben untersucht, bei den reellen Zahlen der Fall. Da diese auch die übrigen Bedingungen erfüllen, bilden sie einen Körper. Weitere bekannte Vertreter sind die rationalen Zahlen  $(\mathbb{Q}, +, \cdot)$  und die komplexen Zahlen  $(\mathbb{C}, +, \cdot)$ . Die Menge der ganzen Zahlen  $\mathbb{Z}$  bildet keinen Körper, da diese bezüglich der Multiplikation keine Inversen besitzen.

Wie in der Zusammenstellung unter Kapitel 2 bereits angedeutet, genügt es für die Quantenmechanik nicht, den Körper der reellen Zahlen als Grundlage für den Vektorraum zu verwenden. Stattdessen muss auf den Körper der komplexen Zahlen zurückgegriffen werden, welcher im Folgenden genauer behandelt werden soll.

---

## Beispiel für einen Körper: Die komplexen Zahlen $\mathbb{C}$

---

Die komplexen Zahlen, abgekürzt durch das Symbol  $\mathbb{C}$ , bilden eine Erweiterung der reellen Zahlen. Ursache dafür, den Körper der reellen Zahlen vergrößern zu müssen, ist die folgende Gleichung, welche in  $\mathbb{R}$  nicht gelöst werden kann, da es hier nicht möglich ist, aus negativen Zahlen die Quadratwurzel zu ziehen:

$$z^2 + 1 = 0 \quad (\text{Gleichung 2.1})$$

Ziel ist es, den Körper der reellen Zahlen so zu einem größeren Körper  $\mathbb{C}$  zu erweitern, dass die Lösung von Gleichung 2.1 und ganz  $\mathbb{R}$  enthalten sind. Dieser wird Körper der komplexen Zahlen genannt. Da  $\mathbb{C}$  einen Körper bilden soll, müssen hier die Verknüpfungen Addition und Multiplikation definiert sein. Wie diese genau aussehen wird deutlich, wenn man die Darstellung der komplexen Zahlen untersucht.

Jede komplexe Zahl kann als Paar zweier reeller Zahlen geschrieben werden. Für  $z \in \mathbb{C}$  mit  $z = (x, y)$  beschreibt  $x \in \mathbb{R}$  den Realteil und  $y \in \mathbb{R}$  den Imaginärteil von  $z$ . Eine weitere Schreibweise ist durch  $z = x + iy$  gegeben. Hierbei bezeichnet der Buchstabe  $i$  die imaginäre Einheit, welche zum einen den Imaginärteil einer komplexen Zahl kennzeichnet und zum anderen Gleichung 2.1 löst:

$$i^2 = -1$$

Die zuletzt präsentierte Darstellung legt die Berechnung von Summe und Produkt zweier komplexer Zahlen nahe. Für  $z_1, z_2 \in \mathbb{C}$  mit  $z_1 = x_1 + iy_1$  und  $z_2 = x_2 + iy_2$ , wobei  $x_1, x_2, y_1, y_2 \in \mathbb{R}$ , seien diese Rechenoperationen wie folgt definiert:

**Summe:** Bei der Addition werden die Realteile und die Imaginärteile der komplexen Zahlen jeweils addiert:

$$z_1 + z_2 = (x_1 + iy_1) + (x_2 + iy_2) = (x_1 + x_2) + i(y_1 + y_2)$$

Die imaginäre Einheit  $i$  kann dabei wie eine Variable gehandelt werden. Diese Regelung kommt auch bei der Multiplikation zweier komplexer Zahlen zur Anwendung.

**Produkt:** Dies funktioniert wie das übliche Ausmultiplizieren von Klammern. Einziger Unterschied ist, dass die Potenz  $i^2$  durch die Zahl  $-1$  ersetzt wird:

$$\begin{aligned} z_1 \cdot z_2 &= (x_1 + iy_1) \cdot (x_2 + iy_2) = x_1x_2 + ix_1y_2 + iy_1x_2 + i^2y_1y_2 \\ &= (x_1x_2 - y_1y_2) + i(x_1y_2 + x_2y_1) \end{aligned}$$

Zu jeder komplexen Zahl  $z = x + iy$  kann durch  $\bar{z} = x - iy$  die komplex konjugierte Zahl angegeben werden. Diese kommt also dadurch zustande, dass das Vorzeichen des Imaginärteils umgekehrt wird.

Eine reelle Zahl kann als Punkt auf der Zahlengerade dargestellt werden, wie beispielsweise hier die Zahl 3 markiert ist.

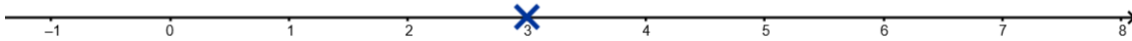


Abb. 4: Zahlenstrahl zur Illustration der reellen Zahlen<sup>12</sup>

Anders sieht die graphische Darstellung der komplexen Zahlen aus. Wie die Schreibweise einer solchen als Paar zweier reeller Zahlen  $z = (x, y)$  bereits nahelegt, ist hierfür eine zweidimensionale Ebene notwendig. Diese wird als komplexe Zahlenebene bezeichnet. Der Realteil von  $z$  legt die Koordinate in Richtung der reellen Achse (Abszisse) und der Imaginärteil von  $z$  die Koordinate in Richtung der imaginären Achse (Ordinate) fest. Die komplexen Zahlen  $z_1 = 4 + i$  und  $z_2 = 2 + 3i$  können demnach wie folgt dargestellt werden:

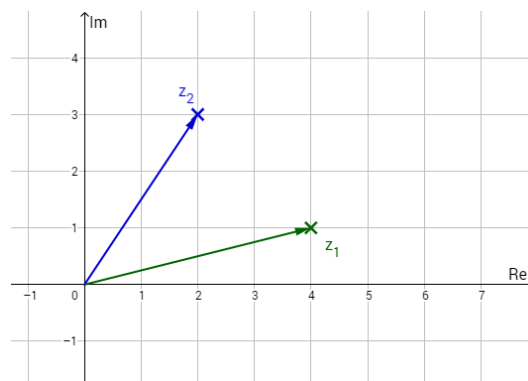


Abb. 5: Darstellung zweier komplexer Zahlen in der komplexen Zahlenebene<sup>13</sup>

Ein beliebiger Punkt  $z$  besitzt dementsprechend den Abstand

$$r = |z| = \sqrt{x^2 + y^2} = \sqrt{z\bar{z}}$$

vom Ursprung des Koordinatensystems. Dies entspricht der Berechnung mit Hilfe des Satzes von Pythagoras, wobei das betrachtete Dreieck durch den Verbindungsvektor von

<sup>12</sup> selbst erstellt.

<sup>13</sup> selbst erstellt.



$z$  zum Ursprung sowie durch die Achsenabschnitte erzeugt wird. Mathematisch wird hierdurch der Betrag der komplexen Zahl  $z$  berechnet, der mit der Länge des Pfeils übereinstimmt.

Die Addition von komplexen Zahlen entspricht der Vektoraddition in der reellen Zahlenebene:

Für  $z_1 = (4, 1) = 4 + i$  und  $z_2 = (2, 3) = 2 + 3i$  lässt sich dies exemplarisch wie folgt darstellen:

$$z_3 = z_1 + z_2 = (4, 1) + (2, 3) = (4 + 2, 1 + 3) = (6, 4) \hat{=} 6 + 4i$$

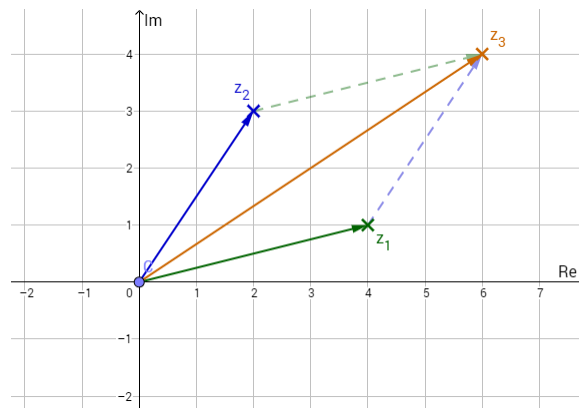


Abb. 6: Addition zweier komplexer Zahlen in der komplexen Zahlenebene<sup>14</sup>

Die zu  $z = x + iy$  komplex konjugierte Zahl  $\bar{z} = x - iy$  kann ebenfalls graphisch interpretiert werden. Sie entspricht dem an der y-Achse gespiegelten Punkt in der komplexen Zahlenebene:

$$\bar{z}_1 = (4, -1) = 4 - i$$

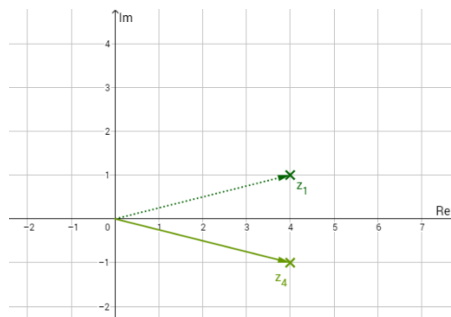


Abb. 7: Komplexe Konjugation in der komplexen Zahlenebene<sup>15</sup>

<sup>14</sup> selbst erstellt.

<sup>15</sup> selbst erstellt.

### 2.1.3 Vektorraum

Mit der Gruppe und dem Körper sind nun die grundlegenden Strukturen beschrieben, sodass hieraus der Vektorraum zusammengebaut werden kann. Dieser besteht aus einer Menge  $V$  von Vektoren und den zwei Verknüpfungen Vektoraddition und skalare Multiplikation, welche bestimmte Axiome erfüllen müssen. Die Vektoraddition legt fest, wie die Elemente aus  $V$  untereinander addiert werden können. Die skalare Multiplikation beschreibt die Multiplikation eines Vektors mit einem Skalar, wodurch der Vektor anschaulich gesehen entsprechend gestreckt oder gestaucht wird. Das skalare Element stammt dabei aus dem vorher festgelegten Körper, über dem der Vektorraum definiert worden ist. Ein Vektorraum kann demnach nicht ohne einen Körper angegeben werden. Aufgrund der Notwendigkeit für viele physikalische Anwendungen soll in dieser Arbeit der Vektorraum immer über dem Körper der komplexen Zahlen definiert sein.

In Vorausschau auf die Verwendung von griechischen Buchstaben wie  $\psi$  (Psi),  $\varphi$  (kleines Phi) oder  $\Phi$  (großes Phi) für die Beschreibung der Zustände des quantenmechanischen Systems als Elemente des Hilbert-Raumes, werden diese bereits hier als Vektorraumelemente benutzt.

Die formale Definition des Vektorraumes lautet schließlich wie folgt:

Eine Menge  $V = \{\psi_1, \psi_2, \psi_3, \dots\}$  von Vektoren heißt Vektorraum bezüglich eines Körpers  $(K, +, \cdot)$ , wenn die beiden Verknüpfungen Vektoraddition und skalare Multiplikation wie folgt definiert sind:

Bezüglich der Vektoraddition

$$\oplus : V \times V \rightarrow V, \quad (\psi_1, \psi_2) \mapsto \psi_1 \oplus \psi_2$$

muss die Menge  $V$  eine abelsche Gruppe bilden.

Für die skalare Multiplikation

$$K \times V \rightarrow V, \quad (\lambda, \psi_1) \mapsto \lambda \odot \psi_1$$

müssen für alle  $\psi_1, \psi_2, \psi_3 \in V$  und  $\lambda, \mu \in K$  folgende Bedingungen erfüllt sein:

- Abgeschlossenheit in  $V$ :  $\lambda \odot \psi_1 \in V$
- Die skalare Multiplikation ist distributiv bezüglich der Vektoraddition:

$$\lambda \odot (\psi_1 \oplus \psi_2) = (\lambda \odot \psi_1) \oplus (\lambda \odot \psi_2)$$

- Die skalare Multiplikation ist distributiv bezüglich der skalaren Addition:  

$$(\lambda + \mu) \odot \psi_1 = (\lambda \odot \psi_1) \oplus (\mu \odot \psi_1)$$
- Es gilt das Assoziativgesetz:  $\lambda \cdot (\mu \odot \psi_1) = (\lambda \cdot \mu) \odot \psi_1$

Aus den Axiomen ergeben sich unmittelbar diese Folgerungen:

$$0 \odot \psi_1 = \vec{0} \qquad 1 \odot \psi_1 = \psi_1 \qquad -1 \odot \psi_1 = -\psi_1 \qquad \lambda \odot \vec{0} = \vec{0}$$

Um in den folgenden Kapiteln das Lesen zu vereinfachen, wird für die Vektoraddition analog zur Addition in einer Gruppe oder einem Körper das Symbol  $+$  und für die skalare Multiplikation ebenfalls wie für die Multiplikation im Körper das Symbol  $\cdot$  verwendet. Die intendierte Verknüpfung ergibt sich eindeutig aus dem Kontext, sodass keine Verwechslungsgefahr mit der skalaren Addition und der Multiplikation besteht.

#### Beispiel 1 für einen Vektorraum: Die euklidische Ebene $\mathbb{R}^2$

Das erste Beispiel, das einem bei dem Begriff Vektorraum in den Sinn kommt, ist der reelle Koordinatenraum  $\mathbb{R}^n$ , welchen Euklid in seinem Werk *Stoicheia* (Die Elemente) als 'Raum unserer Anschauung' bezeichnete. Dieser Raum ist sehr anschaulich und auch die in den nächsten Kapiteln behandelten Begriffe Norm und Metrik sind hier intuitiv verständlich. Beim  $\mathbb{R}^n$  handelt es sich per Definition automatisch um einen Vektorraum über dem Körper der reellen Zahlen, weshalb der zugrundeliegende Körper hier nicht extra benannt werden muss. Für  $n = 2$  wird der Vektorraum  $\mathbb{R}^2$  als euklidische Ebene bezeichnet. Seine Vektoren sind die 2-Tupel mit Elementen aus dem Körper der reellen Zahlen. Die Vektoraddition und die skalare Multiplikation sind komponentenweise definiert:

Seien  $v = \begin{pmatrix} v_1 \\ v_2 \end{pmatrix}, u = \begin{pmatrix} u_1 \\ u_2 \end{pmatrix} \in \mathbb{R}^2$  mit  $v_1, v_2, u_1, u_2 \in \mathbb{R}$  und sei  $\lambda \in \mathbb{R}$ .

Dann gelten für die Vektoraddition und die skalare Multiplikation:

$$v + u = \begin{pmatrix} v_1 + u_1 \\ v_2 + u_2 \end{pmatrix}$$

$$\lambda \cdot v = \begin{pmatrix} \lambda \cdot v_1 \\ \lambda \cdot v_2 \end{pmatrix}$$

Entsprechend diesen Definitionen werden in jeder Komponente Verknüpfungen nur zwischen Körperelementen gebildet, sodass alle Vektorraumaxiome erfüllt werden. Bei  $\mathbb{R}^2$  handelt es sich also um einen Vektorraum. Eine analoge Argumentation ist allgemein für den reellen Koordinatenraum  $\mathbb{R}^n$  gültig, denn auch hier werden die Vektoraddition und die skalare Multiplikation koordinatenweise durchgeführt.

---

---

### Beispiel 2 für einen Vektorraum: $C[a, b]$

---

Durch  $C[a, b]$  wird die Menge der komplexwertigen stetigen Funktionen über dem endlichen Intervall  $[a, b]$  definiert. Komplexwertig bedeutet, dass die Funktionen in den Körper der komplexen Zahlen abbilden. Dieser Vektorraum beinhaltet dementsprechend alle stetigen Funktionen, welche die Elemente aus dem Intervall  $[a, b]$  auf eine komplexe Zahl abbilden.

Der Vektorraum  $C[a, b]$  ist über den komplexen Zahlen definiert und erklärt die Vektoraddition und die skalare Multiplikation für  $f(x), g(x) \in C[a, b]$  und  $\alpha \in \mathbb{C}$  wie folgt:

$$\text{Addition:} \quad (f + g)(x) := f(x) + g(x) \in C[a, b]$$

$$\text{Skalare Multiplikation:} \quad (\alpha f)(x) := \alpha f(x) \in C[a, b]$$

Dieser Raum wird später noch einmal aufgegriffen und auf die übrigen Eigenschaften des Hilbert-Raumes hin untersucht.

---

Die Vektoraddition und die skalare Multiplikation ermöglichen es also, Elemente des Raumes zu addieren, sie zu strecken und zu stauchen. Sie erlauben eine lineare Überlagerung der Vektoren. Genau diese mathematischen Möglichkeiten sind notwendig, um die quantenmechanischen Zustände gänzlich und den experimentellen Befunden entsprechend beschreiben zu können. Wie in der Einleitung kurz angesprochen wurde, beschreibt die Schrödingergleichung die zeitliche Entwicklung der möglichen Zustände, die diese Gleichung lösen. Betrachtet man ihre Struktur genauer, wird deutlich, dass es sich um eine lineare Differentialgleichung handelt. Im Ortsraum ist sie wie folgt definiert:

$$i\hbar \frac{\partial \psi(\vec{x}, t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta^2 \psi(\vec{x}, t) + U(\vec{x}, t)\psi(\vec{x}, t)$$

Die Eigenschaft der Linearität hat wichtige Konsequenzen. Angenommen die Zustandsvektoren  $\psi_1(\vec{x}, t)$  und  $\psi_2(\vec{x}, t)$  sind für ein bestimmtes quantenmechanisches System mit dem Potential  $U(\vec{x}, t)$  Lösungen der Schrödingergleichung, dann ist auch eine Linearkombination  $\psi_1(\vec{x}, t)$  und  $\psi_2(\vec{x}, t)$  der Form

$$\psi(\vec{x}, t) = \lambda_1\psi_1(\vec{x}, t) + \lambda_2\psi_2(\vec{x}, t) \quad (\text{Gleichung 2.2})$$

mit komplexen Zahlen  $\lambda_1$  und  $\lambda_2$  eine Lösung.

Dies wird beispielsweise bei der Untersuchung des Interferenzversuchs von Elektronen am Doppelspalt deutlich, welcher eine Überlagerung der Materiewellen demonstriert. Ist nur der linke bzw. nur der rechte Spalt geöffnet, so werden die Elektronen alleine durch die Wellenfunktion  $\psi_1$  bzw.  $\psi_2$  beschrieben. Bei der Öffnung beider Spalte ergibt sich eine Überlagerung dieser beiden Wellenfunktionen gemäß Gleichung 2.2. Erst hier kommt es zu einer Interferenz der Elementarwellen, welche die in Abbildung 2 gezeichnete Intensitätsverteilung erzeugen.<sup>16</sup>

## 2.2 Das Skalarprodukt

Mit dem vorherigen Kapitel wurde die Grundstruktur des Hilbert-Raumes als Vektorraum über den komplexen Zahlen behandelt. Nun ist es laut Punkt 2 der Definition des Hilbert-Raumes notwendig, den Vektorraum neben der Vektoraddition und der skalaren Multiplikation mit einer weiteren Rechenoperation zu versehen. Dem Skalarprodukt. Dieses wird auch als inneres Produkt bezeichnet und legt fest, wie zwei Vektoren, miteinander multipliziert werden können. Als Ergebnis entsteht beim Skalarprodukt allerdings kein Vektor, sondern ein Element aus dem zugrundeliegenden Körper, also ein Skalar, woher auch die Bezeichnung Skalarprodukt stammt. Dieses Produkt ermöglicht es, die Länge eines Vektors sowie Abstände und Winkel zwischen zwei Vektoren formal zu beschreiben.<sup>17</sup> Ein Vektorraum über dem Körper der komplexen Zahlen, versehen mit einem Skalarprodukt, wird als unitärer Raum bezeichnet.<sup>18</sup>

---

<sup>16</sup> vgl. Wolfgang Kinzel. Skript Theoretische Physik 1, S. 79.

<sup>17</sup> vgl. Siegfried Großmann. Funktionalanalysis im Hinblick auf Anwendungen in der Physik. Wiesbaden 2014, S. 31.

<sup>18</sup> vgl. Jens Jordan, Skript: Lineare Algebra, S. 44.

Eine Abbildung

$$\langle \cdot, \cdot \rangle : V \times V \rightarrow \mathbb{C}, \quad (\psi, \varphi) \mapsto \langle \psi, \varphi \rangle$$

heißt Skalarprodukt (oder inneres Produkt), wenn für alle  $\psi, \psi_1, \psi_2, \varphi, \varphi_1, \varphi_2 \in V$  und  $\alpha \in \mathbb{C}$  folgende Eigenschaften erfüllt sind:

- Hermitizität:  $\langle \psi, \varphi \rangle = \overline{\langle \varphi, \psi \rangle}$   
Diese Eigenschaft legt fest, dass das Skalarprodukt zweier Vektoren nur genau dann kommutativ ist, wenn das Ergebnis eine rein reelle Zahl ist, denn nur hier stimmen die ursprüngliche Zahl und ihre komplex konjugierte überein
- Linearität im zweiten Argument:  $\langle \psi, \alpha \cdot \varphi \rangle = \alpha \langle \psi, \varphi \rangle,$   
 $\langle \psi, \varphi_1 + \varphi_2 \rangle = \langle \psi, \varphi_1 \rangle + \langle \psi, \varphi_2 \rangle$
- Positive Definitheit:  $\langle \psi, \psi \rangle \geq 0$  und  $\langle \psi, \psi \rangle = 0 \Leftrightarrow \psi = 0$

Aus den Axiomen folgen für alle  $\psi, \psi_1, \psi_2, \varphi \in V$  und  $\forall \alpha \in \mathbb{C}$  diese Eigenschaften:

$$\Rightarrow \langle \alpha \cdot \psi, \varphi \rangle = \bar{\alpha} \cdot \langle \psi, \varphi \rangle, \text{ denn } \langle \alpha \cdot \psi, \varphi \rangle = \overline{\langle \varphi, \alpha \cdot \psi \rangle} = \overline{\alpha \langle \varphi, \psi \rangle} = \bar{\alpha} \cdot \langle \psi, \varphi \rangle$$

$$\Rightarrow \langle \psi_1 + \psi_2, \varphi \rangle = \langle \psi_1, \varphi \rangle + \langle \psi_2, \varphi \rangle, \text{ denn } \langle \psi_1 + \psi_2, \varphi \rangle = \overline{\langle \varphi, \psi_1 + \psi_2 \rangle} =$$

$$\overline{\langle \varphi, \psi_1 \rangle} + \overline{\langle \varphi, \psi_2 \rangle} = \langle \psi_1, \varphi \rangle + \langle \psi_2, \varphi \rangle$$

$\Rightarrow \langle \psi, \psi \rangle$  ist sicherlich reell, denn es muss gelten:  $\langle \psi, \psi \rangle = \overline{\langle \psi, \psi \rangle} \Leftrightarrow \psi \in \mathbb{R}$ . Eine komplexe Zahl stimmt nämlich nur dann mit ihrer komplex konjugierten überein, wenn ihr Imaginärteil null und die Zahl damit rein reell ist.

$\Rightarrow$  Die Cauchy-Schwarzsche Ungleichung ist erfüllt:  $|\langle \psi, \varphi \rangle| \leq \|\psi\| \cdot \|\varphi\|$

---

Beispiel für einen unitären Raum: Der reelle Koordinatenraum  $\mathbb{R}^n$

---

Im reellen Koordinatenraum ist das Skalarprodukt zweier Vektoren

$$v = \begin{pmatrix} v_1 \\ \vdots \\ v_n \end{pmatrix}, u = \begin{pmatrix} u_1 \\ \vdots \\ u_n \end{pmatrix} \in \mathbb{R}^n, \text{ mit } v_1, \dots, v_n, u_1, \dots, u_n \in \mathbb{R}$$

komponentenweise definiert:

$$v \cdot u = \begin{pmatrix} v_1 \\ \vdots \\ v_n \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} u_1 \\ \vdots \\ u_n \end{pmatrix} = v_1 \cdot u_1 + \dots + v_n \cdot u_n$$

In einem unitären Raum  $V$  gibt es verschiedene Ursachen dafür, dass das Skalarprodukt zweier Vektoren null ist. Es ist zwangsläufig dann null, wenn einer der Faktoren null ist:

$$\text{Aus } \psi = 0 \text{ oder } \varphi = 0 \text{ folgt } \langle \psi, \varphi \rangle = 0$$

Die umgekehrte Folgerung gilt im Allgemeinen aber nicht. Der Fall

$$\begin{aligned} \psi &= (1,0) \in \mathbb{R}^2, & \varphi &= (0,1) \in \mathbb{R}^2 \\ \langle \psi, \varphi \rangle &= (1 \cdot 0, 0 \cdot 1) = (0, 0) \end{aligned}$$

zeigt ein Gegenbeispiel. Hier ist das innere Produkt der Elemente  $\psi$  und  $\varphi$  eines unitären Raums null, ohne dass einer der Vektoren null ist. Diese Gleichung liefert eine wichtige Information über die Konstellation der Vektoren  $\psi$  und  $\varphi$ .

Zwei Vektoren  $\psi, \varphi \in V$  eines unitären Raumes werden als orthogonal oder senkrecht zueinander bezeichnet, wenn deren Skalarprodukt null ergibt:

$$\langle \psi, \varphi \rangle = 0.$$

In diesem Fall wird die Schreibweise  $\psi \perp \varphi$  verwendet.

Hier ist nicht gefordert, dass beide Vektoren ungleich null sein müssen. Dies bedeutet der Nullvektor steht auf allen anderen Vektoren aus dem unitären Raum senkrecht.<sup>19</sup>

Diese Eigenschaft wird für die Konstruktion des vollständigen Orthonormalsystems noch eine wichtige Rolle spielen. Hierbei handelt es sich um eine Teilmenge des Hilbert-Raumes, wobei mit deren Elementen jeder beliebige Vektor des Hilbert-Raumes durch eine Linearkombination dargestellt werden kann. Es wird sich herausstellen, dass jeder quantenmechanische Zustand eine Überlagerung aus sogenannten Eigenvektoren darstellt, die gemeinsam ein vollständiges orthonormales System bilden.

Das Skalarprodukt leistet sogar noch mehr als die Multiplikation zweier Vektoren und die Überprüfung von deren Orthogonalität. Es ermöglicht jedem Element aus dem Vektorraum anschaulich gesehen eine Art Länge zuzuordnen, eine sogenannte Norm. Symbolisch durch doppelte Betragsstriche dargestellt, wird sie durch das Skalarprodukt wie folgt definiert:

$$\|\psi\| := \sqrt{\langle \psi, \psi \rangle}$$

---

<sup>19</sup> vgl. Siegfried Großmann. Funktionalanalysis im Hinblick auf Anwendungen in der Physik, S. 43.

Mit Hilfe der Norm lässt sich unmittelbar auch eine Metrik  $d$ , also eine Abstandsfunktion zwischen zwei Elementen  $\psi, \varphi$  aus dem Vektorraum definieren als

$$d(\psi, \varphi) := \|\psi - \varphi\|.$$

Diese Vorschriften erfüllen die Axiome einer Norm bzw. einer Metrik, welche in den folgenden Unterkapiteln beschrieben werden sollen.<sup>20</sup>

### 2.2.1 Normierter Raum

Bei einer Norm handelt es sich um eine Abbildung  $\|\cdot\|$  von einem Vektorraum  $V$  über einem Körper  $K$  in die Menge der nichtnegativen reellen Zahlen  $\mathbb{R}_0^+$ ,

$$\|\cdot\|: V \rightarrow \mathbb{R}_0^+, \quad \psi \mapsto \|\psi\|$$

welche für alle  $\psi \in V$  und  $\alpha \in K$  folgenden Eigenschaften erfüllt:<sup>21</sup>

- Positive Definitheit:  $\|\psi\| \geq 0$ , wobei gilt:  $\|\psi\| = 0 \Leftrightarrow \psi = 0$
- Homogenität:  $\|\alpha \cdot \psi\| = |\alpha| \cdot \|\psi\|$
- Dreiecksungleichung:  $\|\psi + v\| \leq \|\psi\| + \|v\|$

Ein Vektor  $\psi \in V$  heißt normiert oder Einheitsvektor, wenn seine Norm eins beträgt.

$$\|\psi\| = 1$$

---

### Beispiele für Normen in der euklidische Ebene $\mathbb{R}^2$

---

Für einen Vektorraum gibt es aber nicht nur die eine Norm, sondern meist existieren mehrere Möglichkeiten eine solche zu definieren. Um dies plausibel zu machen, soll unsere Zeichenebene, der Vektorraum  $\mathbb{R}^2$ , betrachtet werden.

---

<sup>20</sup> vgl. Siegfried Großmann. Funktionalanalysis im Hinblick auf Anwendungen in der Physik, S. 27 f.

<sup>21</sup> vgl. Siegfried Großmann. Funktionalanalysis im Hinblick auf Anwendungen in der Physik, S. 27.



- Hier kann beispielsweise die euklidische Norm eines Vektors  $v \in \mathbb{R}^2$  durch die Vorschrift

$$\|v\|_e := \sqrt{v_1^2 + v_2^2}$$

definiert werden. Diese beschreibt anschaulich die Länge des Vektors und entspricht deren Berechnung mit dem Satz des Pythagoras.

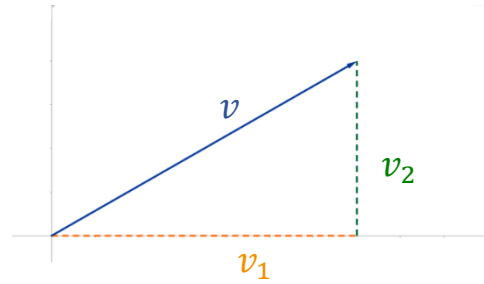


Abb. 8: Illustration der euklidischen Norm<sup>22</sup>

- Auch durch die Vorschrift

$$\|v\|_1 = |v_1| + |v_2|$$

wird auf der euklidischen Ebene eine Norm definiert, die sogenannte 1-Norm. Umgangssprachlich wird sie auch als Manhattan-Norm bezeichnet. Da es in diesem Stadtteil New Yorks nur Straßen von Nord nach Süd und von West nach Ost gibt, beschreibt diese Norm anschaulich die Länge der Strecke, die man von einem definierten Nullpunkt aus zu einem bestimmten Haus zurücklegen muss.

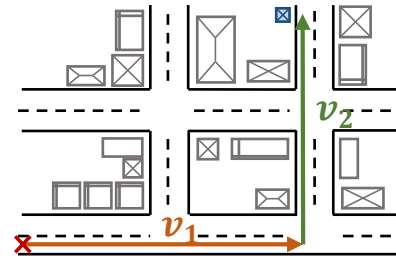


Abb. 9: Illustration der 1-Norm<sup>23</sup>

Wie diese Beispiele zeigen, ist es nicht der Normalfall die Norm durch ein Skalarprodukt zu definieren. Aber gerade dies ist die wichtige Voraussetzung für den Hilbert-Raum. In diesem Raum wird genau die Norm verwendet, welche vom Skalarprodukt erzeugt wird. Oben wurde die vom Skalarprodukt induzierte Norm wie folgt definiert:

$$\|\psi\| := \sqrt{\langle \psi, \psi \rangle}$$

Diese Vorschrift beschreibt tatsächlich eine Norm, wie folgende Überprüfung der einzelnen Axiome beweist:

<sup>22</sup> selbst erstellt.

<sup>23</sup> selbst erstellt.

- Die positive Definitheit ist erfüllt, da das Skalarprodukt selbst die positive Definitheit erfüllen muss. Die Wurzel ändert daran nichts.
- homogen, denn:  $\|\alpha \cdot \psi\| := \sqrt{\langle \alpha \cdot \psi, \alpha \cdot \psi \rangle} = \sqrt{\bar{\alpha}\alpha \langle \psi, \psi \rangle} = |\alpha| \cdot \|\psi\|$
- Mit der Cauchy-Schwarzschen Ungleichung gilt:

$$\begin{aligned} \|\psi + \varphi\|^2 &= \langle \psi + \varphi, \psi + \varphi \rangle = \langle \psi + \varphi, \psi \rangle + \langle \psi + \varphi, \varphi \rangle \\ &\leq \|\psi + \varphi\| \|\psi\| + \|\psi + \varphi\| \|\varphi\| \end{aligned}$$

Wenn  $\|\psi + \varphi\| = 0$ , so ist die Dreiecksungleichung definitiv erfüllt.

Für  $\|\psi + \varphi\| \neq 0$  kann die Norm  $\|\psi + \varphi\|$  auf beiden Seiten gekürzt werden und die Dreiecksungleichung ist ebenfalls bewiesen.<sup>24</sup>

### 2.2.2 Metrischer Raum

Über die Norm wird anschaulich die Länge eines Vektors, also der Abstand vom Ursprung zu einem Punkt, definiert. Durch die Metrik kann dies verallgemeinert und auch der Abstand zwischen zwei beliebigen Elementen des Vektorraums berechnet werden. Sowohl bei der Norm, als auch bei der Metrik müssen die Bezeichnungen Länge und Abstand vorsichtig behandelt werden, denn bei weniger anschaulichen Räumen als im  $\mathbb{R}^n$ , wie beispielsweise in einem Funktionenraum, ist diese Interpretation nur noch im übertragenen Sinne möglich. Um von der bildlichen Vorstellung etwas Abstand zu gewinnen, wird für die Metrik häufig auch die Bezeichnung Unterschied verwendet. Mathematisch gesehen handelt es sich bei dem Strukturelement Metrik um eine Abbildung, welche je zwei Elementen aus dem Vektorraum eine nicht negative reelle Zahl zuordnet.

Für den Vektorraum  $V$  heißt die Abbildung

$$d : V \times V \rightarrow \mathbb{R}_0^+, \quad (\psi, \varphi) \mapsto d(\psi, \varphi)$$

Metrik auf  $V$ , wenn für alle  $\psi, \varphi, \phi \in V$  folgende Bedingungen erfüllt sind:

- Positive Definitheit:  $d(\psi, \varphi) \geq 0$ , wobei gilt  $d(\psi, \varphi) = 0 \Leftrightarrow \psi = \varphi$
- Symmetrie:  $d(\psi, \varphi) = d(\varphi, \psi)$
- Dreiecksungleichung:  $d(\psi, \varphi) \leq d(\psi, \phi) + d(\phi, \varphi)$

Das Paar  $(V, d)$  wird dann als metrischer Raum bezeichnet.<sup>25</sup>

<sup>24</sup> vgl. Siegfried Großmann. Funktionalanalysis im Hinblick auf Anwendungen in der Physik, S. 33.

<sup>25</sup> vgl. Siegfried Großmann. Funktionalanalysis im Hinblick auf Anwendungen in der Physik, S. 24.

Der Abstand zwischen zwei Elementen  $u, v$  aus der euklidischen Ebene kann mit Hilfe des Satzes von Pythagoras berechnet werden:

$$d(u, v) = \sqrt{(u_1 - v_1)^2 + (u_2 - v_2)^2}$$

Der Abstand dieser beiden Vektoren  $u, v$  kann auch als die Länge des Verbindungsvektors  $u - v$  interpretiert werden.

---

Wie dieses Kapitel zeigt, ist das Skalarprodukt ein wichtiges Strukturelement für Vektorräume. Dementsprechend groß ist seine Bedeutung für die Physik und spielt auch in der Quantenmechanik eine wichtige Rolle. Um dies zu demonstrieren, soll der Interferenzversuch von Elektronen an einem Doppelspalt erneut aufgegriffen werden. Hierbei werden Elektronen, mathematisch durch die Zustandsfunktion  $\psi$  beschrieben, von einer Quelle ausgehend auf einen Doppelspalt geschossen und dahinter auf einem Schirm detektiert. Je höher die Intensität an einem Punkt ist, desto mehr Elektronen sind an dieser Stelle auf den Schirm getroffen. Es besteht ein proportionaler Zusammenhang zwischen der Intensitätsverteilung  $I(x)$  und der Auftreffwahrscheinlichkeit  $P(x)$  eines Elektrons auf dem Schirm in einem bestimmten Bereich um den Punkt  $x$  dividiert durch die Ausdehnung  $\Delta x$  dieses Bereichs. Der Quotient  $P(x)/\Delta x$  gibt die Wahrscheinlichkeitsdichte an und wird mathematisch durch das Betragsquadrat der Wellenfunktion berechnet, welches wiederum durch das Skalarprodukt bestimmt werden kann:

$$I \sim \|\psi\|^2$$

Die Aufenthaltswahrscheinlichkeit des Elektrons in einem bestimmten Raumvolumen lässt sich durch die Summe über die Wahrscheinlichkeitsdichten in allen Punkten bestimmen. Da der Raum allerdings kontinuierlich ist und unendlich viele Punkte besitzt, muss das Integral verwendet werden. Der Ausdruck  $\int_V |\psi|^2 dx$  gibt die Wahrscheinlichkeit dafür an, das Teilchen im Volumen  $V$  zu messen.

Wird davon ausgegangen, dass das behandelte Teilchen wirklich existiert, so ist es sicher, dass es sich irgendwo im Raum aufhalten muss. Das Integral der Wahrscheinlichkeitsdichte über den gesamten Raum muss also eins ergeben.

$$\int |\psi(\vec{x}, t)|^2 d^3x = 1$$

Hierbei handelt es sich allerdings um eine Darstellung im Ortsraum. Ziel dieser Arbeit ist jedoch eine darstellungsunabhängige Formulierung zu finden, was ja gerade durch den Hilbert-Raum möglich wird. Hierin lässt sich die Aufenthaltswahrscheinlichkeit durch das Skalarprodukt beschreiben:

$$\langle \psi, \psi \rangle = \int |\psi(\vec{x}, t)|^2 d^3x = 1$$

Dementsprechend ist auch die Norm für die Quantenzustände höchst bedeutsam. Da diese direkt durch das Skalarprodukt induziert wird und sie sich durch die Wurzel des Skalarproduktes berechnet, muss auch sie für die hier behandelten Zustände eins ergeben:

$$\|\psi\| = \sqrt{\langle \psi, \psi \rangle} = \sqrt{\int |\psi(\vec{x}, t)|^2 d^3x} = 1^{26}$$

### 2.3 Vollständiger Raum

Ein wichtiger Inhalt im mathematischen Teilgebiet der Analysis ist die Untersuchung von Folgen, also von Auflistungen endlich oder unendlich vieler fortlaufend nummerierter Elemente. Die Aufzählung

*(Newton, Maxwell, Einstein, Schrödinger, Heisenberg, Feynman, Heisenberg, Hawking)*

stellt eine endliche Folge dar, welche die Nachnamen bedeutender Physiker, geordnet nach dem Geburtsdatum, aufzählt. Dabei ist die Reihenfolge der Namen entscheidend und Elemente dürfen doppelt enthalten sein. Also darf insbesondere Jochen Heisenberg also Sohn von Werner Heisenberg extra aufgeführt werden, obwohl deren Nachnamen übereinstimmen.

Auch in der theoretischen Physik spielen Folgen eine wichtige Rolle. Im Raum der Zustände eines quantenmechanischen Systems muss nämlich gelten, dass jede Cauchy-Folge gegen einen Grenzwert konvergiert. Dieses Kriterium entspricht der dritten Eigenschaft eines Hilbert-Raumes: der Vollständigkeit.

---

<sup>26</sup> Wolfgang Kinzel. Skript Theoretische Physik 1, S. 117.

„Ein metrischer Raum heißt vollständig, wenn jede Cauchy-Folge ein Limeselement im Raum besitzt“<sup>27</sup>. Dies bedeutet die Folgenglieder  $\psi_n$  einer bestimmten Art von Folge, der Cauchy-Folge, müssen sich mit wachsendem  $n$  immer mehr einem Grenzwert  $\psi$ , der im Vektorraum liegen muss, annähern. Diese Definition impliziert bereits, welche Rolle die Metrik für die Konvergenz spielt, und warum ein Vektorraum alleine hierbei als Grundstruktur nicht ausreichend ist. Nur wenn erklärt ist, was der Unterschied zwischen zwei Elementen in dem betrachteten Raum ist, kann in diesem die Konvergenz einer Folge überprüft werden. In einem unitären Raum ermöglicht es die Metrik diesen Unterschied zu beschreiben, sodass es hier gelingt, Untersuchungen auf Vollständigkeit anzustellen.<sup>28</sup>

Ausgangssituation für die Konvergenz ist diese: Es wird eine bestimmte Folge  $(\psi_n)_{n \in \mathbb{N}}$  mit Elementen aus einem metrischen Raum betrachtet, also eine Auflistung von Vektoren  $(\psi_1, \psi_2, \psi_3, \dots)$ . Wie oben gezeigt wurde, bilden die reellen Zahlen  $\mathbb{R}$  einen Vektorraum. Daher kann als Beispiel die Folge  $\left(\frac{1}{n}\right)_{n \in \mathbb{N}}$  hergenommen werden, wobei die einzelnen Folgenglieder  $\frac{1}{n}$  für  $n \in \mathbb{N}$  in  $\mathbb{R}$  liegen. Deren erste Folgenglieder lassen sich durch Einsetzen von  $n = 1, 2, 3, 4, 5, \dots$  zu  $(1, \frac{1}{2}, \frac{1}{3}, \frac{1}{4}, \frac{1}{5}, \dots)$  berechnen. Eine Folge auf Konvergenz zu untersuchen bedeutet nun zu überprüfen, ob sich die Folgenglieder fortlaufend einem Element aus dem Vektorraum immer weiter annähern, dieses aber nie erreichen. Diese Konvergenz wird mathematisch mit Hilfe der Metrik überprüft. Hierzu wird für wachsende  $n$  der Unterschied  $d(\psi, \psi_n)$  zwischen dem jeweiligen Folgeglied  $\psi_n$  und einem Grenzwert bestimmt, der immer kleiner, ja sogar beliebig klein werden soll. Nach diesem Kriterium lässt sich schon anhand der ersten Elemente der Beispielfolge  $\left(\frac{1}{n}\right)_{n \in \mathbb{N}}$  als solcher Grenzwert die Zahl  $0 \in \mathbb{R}$  vermuten. Im Anschluss an die formale Definition des Konvergenzkriteriums kann diese Vermutung auch mathematisch korrekt bewiesen werden.

Es sei  $(\psi_n)_{n \in \mathbb{N}}$  eine Folge von Elementen  $\psi_n \in V$  eines metrischen Raumes  $V$ . Diese heißt konvergent, falls es ein  $\psi \in V$  gibt, sodass zu jeder Zahl  $\varepsilon > 0$  ein  $N_\varepsilon \in \mathbb{N}$  existiert mit  $d(\psi, \psi_n) < \varepsilon$  für alle  $n \geq N_\varepsilon$ .

Das Element  $\psi$  heißt Grenzwert oder Limes der Folge und wird geschrieben als

$$\psi = \lim_{n \rightarrow \infty} \psi_n \quad \text{oder} \quad \psi_n \xrightarrow{n \rightarrow \infty} \psi$$

<sup>27</sup> Siegfried Großmann. Funktionalanalysis im Hinblick auf Anwendungen in der Physik, S. 45.

<sup>28</sup> vgl. Siegfried Großmann. Funktionalanalysis im Hinblick auf Anwendungen in der Physik, S. 44.

---

Beispiel für eine Konvergente Folge:  $\psi_n = \frac{1}{n}$

---

Die Folge  $(\psi_n)_{n \in \mathbb{N}}$ , wobei  $\psi_n = \frac{1}{n}$  mit  $n \in \mathbb{N}$ , ist eine unendliche Folge mit Elementen aus dem Körper der reellen Zahlen.

Formal kann die obige Behauptung der Konvergenz dieser Folge gegen die Null wie folgt bewiesen werden:

*Beweis:* Sei  $\varepsilon > 0$  beliebig klein. Nun kann durch die Ungleichung  $N_\varepsilon > \frac{1}{\varepsilon}$  zu jedem solchem  $\varepsilon$  eine natürliche Zahl  $N_\varepsilon \in \mathbb{N}$  gefunden werden, welche die obige Bedingung erfüllt.

Sei nämlich  $n \geq N_\varepsilon$  beliebig. Es ist

$$\left| \frac{1}{n} - 0 \right| = \left| \frac{1}{n} \right| = \frac{1}{n} \leq \frac{1}{N_\varepsilon} < \varepsilon.^{29}$$

Dies zeigt, die Folge  $(\psi_n)_{n \in \mathbb{N}}$  konvergiert gegen Null. Es gilt also

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \psi_n = 0.$$

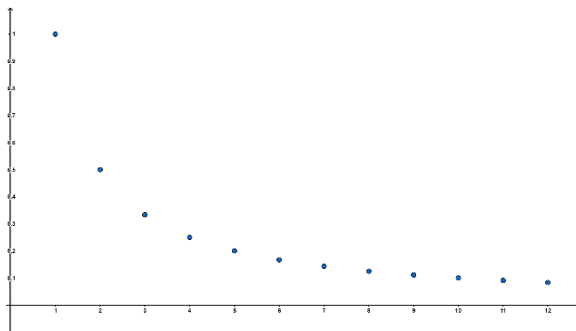


Abb. 10: Graphische Darstellung der Folge  $(\psi_n)_{n \in \mathbb{N}} = \frac{1}{n}$ <sup>30</sup>

---

Das eben vorgestellte Konvergenzkriterium hat allerdings einen Nachteil. Um eine Aussage über die Konvergenz der betrachteten Folge treffen zu können, ist es notwendig, den potentiellen Grenzwert  $\psi$  zu kennen. Daher kann es nützlich sein ein Kriterium für die Konvergenz zu verwenden, das unabhängig von einem Grenzwert argumentiert und stattdessen den Unterschied der Folgenglieder untereinander untersucht. Die Idee dahinter lautet wie folgt: Nähert sich eine Folge mit wachsendem  $n$  einem Grenzwert immer weiter an, so müssen auch die Abstände zwischen den einzelnen Folgegliedern immer geringer werden. Eine in sich konvergente Folgen, deren Folgeglieder sich zunehmend angleichen, wird auch als Cauchy-Folge bezeichnet:

---

<sup>29</sup> vgl. Christiane Tretter. Analysis I. Basel 2013, S. 25.

<sup>30</sup> selbst erstellt.

Eine Folge  $(\psi_n)_{n \in \mathbb{N}}$  heißt Cauchy-Folge oder in sich konvergente Folge falls zu jedem  $\varepsilon > 0$  ein  $N_\varepsilon \in \mathbb{N}$  existiert, sodass folgende Ungleichung erfüllt ist.

$$d(\psi_i, \psi_j) < \varepsilon \quad \forall i, j > N_\varepsilon^{31}$$

Durch diese Definition wird bereits ein charakteristischer Unterschied in der Definition von Konvergenz und Cauchy-Folge deutlich. Dieser besteht darin, dass bei der Cauchy-Folge nicht der Abstand  $d(\psi, \psi_n)$  zwischen dem Grenzwert  $\psi$  und den Folgengliedern  $\psi_n$  untersucht wird, sondern der Abstand  $d(\psi_i, \psi_j)$  zwischen zwei beliebigen Folgengliedern.<sup>32</sup>

In einem metrischen Raum ist jede Folge, die konvergiert, automatisch schon eine Cauchy-Folge.<sup>33</sup> Die Umkehrung gilt allerdings nicht in jedem beliebigen metrischen Raum. Dies zeigt auch das folgende Gegenbeispiel.

---

#### Beispiel einer nicht konvergenten Cauchy-Folge

---

Die Folge  $(\psi_n)_{n \in \mathbb{N}}$  mit  $\psi_n = \left(1 + \frac{1}{n}\right)^n$  soll im Raum  $\mathbb{Q}$  der rationalen Zahlen definiert sein. Um eine bessere Vorstellung von dieser Folge zu erhalten, werden die ersten Folgenglieder notiert: (2; 2,25; 2,37; 2,44; ...)

Mit Hilfe des Cauchy Kriteriums lässt sich beweisen, dass es sich bei dieser tatsächlich um eine Cauchy-Folge handelt.

Der Grenzwert dieser Folge  $\lim_{n \rightarrow \infty} \left(1 + \frac{1}{n}\right)^n = e$  ist jedoch die eulersche Zahl  $e \approx 2,72$ , welche irrational ist und damit nicht in den rationalen Zahlen liegt. Damit konvergiert die Folge  $(\psi_n)_{n \in \mathbb{N}}$  nicht in  $\mathbb{Q}$ .

Dieses Beispiel beweist die Existenz einer Folge rationaler Zahlen, die in sich konvergent, also eine Cauchy-Folge, ist, deren Grenzwert allerdings nicht in  $\mathbb{Q}$  liegt. Daher ist  $\mathbb{Q}$  nicht vollständig.

---

<sup>31</sup> vgl. Siegfried Großmann. Funktionalanalysis im Hinblick auf Anwendungen in der Physik, S. 45.

<sup>32</sup> vgl. Jürgen Grahl. Analysis 1/2. Version 12. Januar 2016, S. 79.

<sup>33</sup> vgl. Jürgen Grahl. Analysis 1/2. Version 12. Januar 2016, S. 79.

Es gibt aber auch Räume, in denen diese Umkehrung gültig ist, in denen also jede Cauchy-Folge konvergiert. Diese Räume heißen vollständig.<sup>34</sup>

Genau diese Eigenschaft ist für den Hilbert-Raum verlangt. Dieser ist per Definition ein vollständiger Raum. Hierin muss somit jede Cauchy-Folge konvergieren.

---

Beispiel für eine Cauchy-Folge in den reellen Zahlen:  $(\psi_n)_{n \in \mathbb{N}} = \frac{1}{n}$

---

Wie zuvor gezeigt ist die Folge  $(\psi_n)_{n \in \mathbb{N}}$  mit  $\psi_n = \frac{1}{n}$  über den reellen Zahlen konvergent und damit automatisch auch eine Cauchy-Folge.

Da diese Folge in dem vollständigen Raum  $\mathbb{R}$  definiert ist, gilt auch die Umkehrung. Daher könnte anstelle der Konvergenz auch bewiesen werden, dass es sich bei  $\psi_n$  um eine Cauchy-Folge handelt und hieraus direkt auf die Konvergenz der Folge geschlossen werden. Mit dem Cauchy-Kriterium kann dies wie folgt bewiesen werden:

*Beweis:* Sei  $\varepsilon > 0$  beliebig und  $N \in \mathbb{N}$ , sodass  $N > \frac{1}{\varepsilon}$ . Sind nun  $i \geq j > N$  beliebig gewählt, dann gilt:

$$|a_i - a_j| = \left| \frac{1}{i} - \frac{1}{j} \right| = \left| \frac{i-j}{ji} \right| \leq \frac{i}{ij} = \frac{1}{j} < \frac{1}{N} < \varepsilon$$

Dieses konkrete Beispiel beweist selbstverständlich nicht die Vollständigkeit der Reellen Zahlen. Diese müsste auf andere Weise nachgewiesen werden.

---

Mit dem Vektorraum, dem Skalarprodukt und der Vollständigkeit wurden alle drei Puzzlestücke des Hilbert-Raumes zusammengetragen und dieser vollständig definiert. Nun ist es an der Zeit Beispiele für Hilbert-Räume zu betrachten.

Bei den reellen und komplexen Koordinatenräumen  $\mathbb{R}^n$  bzw.  $\mathbb{C}^n$  handelt es sich mit der vom Skalarprodukt induzierten Norm um Hilbert-Räume.

---

<sup>34</sup> vgl. Siegfried Großmann. Funktionalanalysis im Hinblick auf Anwendungen in der Physik, S. 45.



## 2.4 Der Äquivalenzklassenraum $\mathcal{L}_2$ als Beispiel für einen Hilbert-Raum

Ziel dieses Beispiels ist es, schrittweise einen Hilbert-Raum zu konstruieren, der dafür geeignet ist, ein quantenmechanisches System zu beschreiben. Als Elemente soll er komplexwertige Funktionen bzw. Funktionenklassen beinhalten, welche die Zustände des betrachteten Systems darstellen können.

### 2.4.1 Die Unvollständigkeit des Raumes $C[a, b]$

Zur Definition des  $\mathcal{L}_2$  soll zunächst der unter 2.1.3 bereits behandelte Vektorraum  $C[a, b]$  der komplexwertigen stetigen Funktionen über dem endlichen Intervall  $[a, b]$  aufgegriffen werden, welcher bereits mit der Vektoraddition und dem Skalarprodukt versehen wurde. Hierauf wird nun, mit Hilfe des Riemann-Integrals, die Abbildung

$$\langle \cdot, \cdot \rangle : C[a, b] \times C[a, b] \rightarrow \mathbb{R}_0^+$$
$$(f, g) \mapsto \langle f, g \rangle := \int_a^b \bar{f}(x)g(x) dx$$

definiert, welche den Skalarprodukt-Axiomen genügt und  $C[a, b]$  damit zu einem unitären Raum macht. Das Skalarprodukt induziert dann folgende Norm:

$$\|f\| := \left( \int_a^b |f(x)|^2 dx \right)^{\frac{1}{2}}$$

Allerdings ist der so entstandene Raum nicht vollständig bezüglich obiger Norm und kann daher keinen Hilbert-Raum bilden.<sup>35</sup>

---

<sup>35</sup> vgl. Georg Reents. Einführung in die Funktionalanalysis, S. 4.

---

Gegenbeispiel zur Widerlegung der Vollständigkeit von  $C[a, b]$

---

Die Intervallgrenzen werden wie folgt gewählt:  $a = -1$  und  $b = 1$ . Die folgende Vorschrift definiert eine Funktionenfolge auf dem Intervall  $[-1, 1]$ :

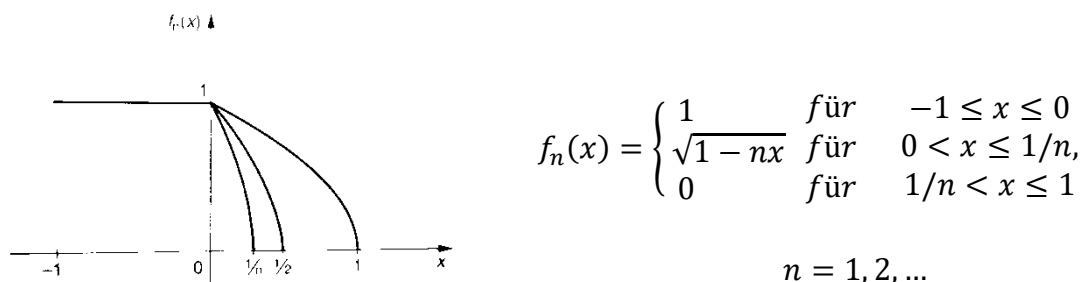


Abb. 11: Graphische Darstellung der Folge  $f_n(x)$ <sup>36</sup>

Diese Folge ist in sich konvergent, also eine Cauchy-Folge, denn

$$\|f_n - f_m\|^2 = \int_0^1 |f_n - f_m|^2 dx \leq \int_0^1 2(|f_n|^2 + |f_m|^2) dx = \frac{1}{n} + \frac{1}{m} \xrightarrow{n, m \rightarrow \infty} 0$$

Ihre Grenzfunktion ist durch

$$f_{\text{grenz}}(x) = \begin{cases} 1 & \text{für } -1 \leq x \leq 0 \\ 0 & \text{für } 0 < x \leq 1 \end{cases}$$

definiert und damit nicht stetig, also kein Element der Menge  $C[-1, 1]$ . Dies bedeutet, die Folge  $f_n$  konvergiert nicht in  $C[-1, 1]$  und damit ist dieser Raum nicht vollständig.

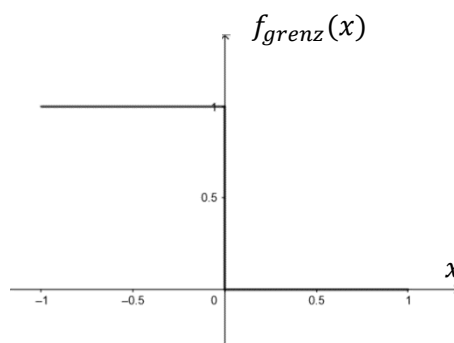


Abb. 12: Grenzfunktion der Folge  $f_n(x)$ <sup>37</sup>

---

Das entscheidende Problem für die Vollständigkeit von  $C[a, b]$  ist also die geforderte Stetigkeit der Funktionen. Obwohl ein Gegenbeispiel genügt um die Vollständigkeit eines unitären Raums zu widerlegen, ließe sich sogar zeigen, dass es „keine stetige Funktion  $f(x) \in C[a, b]$  gibt, sodass die Konvergenzbedingung  $\int_a^b |f(x) - f_n(x)|^2 dx \rightarrow 0$  mit  $n \rightarrow \infty$  erfüllt ist“<sup>38</sup>. Damit ist für jede beliebige Cauchy-Folge die Grenzfunktion nicht

---

<sup>36</sup> Siegfried Großmann. Funktionalanalysis im Hinblick auf Anwendungen in der Physik, S. 47.

<sup>37</sup> selbst erstellt.

<sup>38</sup> Georg Reents. Einführung in die Funktionalanalysis, S.4.

stetig und der unitäre Raum  $C[a, b]$  nicht vollständig.<sup>39</sup> Der Vektorraum  $C[a, b]$  kann also keinen Hilbert-Raum bilden und ist daher nicht in der Lage ein quantenmechanisches System zu beschreiben.

#### 2.4.2 Der Vektorraum $\tilde{\mathcal{L}}_2(E, \mathcal{F}, \mu)$ der messbaren Funktionen

Könnte allerdings auf die Stetigkeit der Funktionen verzichtet werden, so ließe sich die Vollständigkeit des Vektorraums konstruieren. Dies gelingt mit dem Raum  $\tilde{\mathcal{L}}_2$ , der als Elemente quadratsummable Funktionen enthält. Er ist wie folgt definiert:

$$\tilde{\mathcal{L}}_2(E, \mathcal{F}, \mu) = \left\{ f(x) \mid \begin{array}{l} f(x) \text{ komplexwertige,} \\ \text{messbare Funktion über einem Maßraum } (E, \mathcal{F}, \mu), \\ \int |f|^2 d\mu < \infty \end{array} \right\}$$

Hier taucht, im Gegensatz zum Vektorraum  $C[a, b]$ , nicht mehr die Stetigkeit als Bedingung auf. Stattdessen wird die Messbarkeit der Funktionen über einem Maßraum verlangt. Was dieser Begriff genau bedeutet, soll nun untersucht werden:

Ein Maßraum  $(E, \mathcal{F}, \mu)$  setzt sich aus drei Bestandteilen zusammen. Dem Grundraum  $E$ , dem Sigmakörper  $\mathcal{F}$  sowie dem Maß  $\mu$ .

Das erste Element, die Menge  $E$ , gibt den Grundraum an. Diese Bezeichnung ist hier etwas irreführend, da es sich mathematisch nicht um einen Vektorraum handeln muss. Eindeutiger wäre stattdessen die Bezeichnung Grundmenge. Diese legt den Definitionsbereich für die Funktionen  $f(x)$  fest, wobei hier typischerweise die Mengen  $\mathbb{R}, \mathbb{R}^n, [a, \infty)$  oder  $[a, b]$  gewählt werden.

Als zweites enthält der Maßraum den Sigmakörper  $\mathcal{F}$  über dem Grundraum  $E$ . Dieser ist mathematisch tatsächlich ein Körper und enthält als Elemente Teilmengen des Grundraumes. Die trivialen Beispielergebnisse dieses Körpers sind die leere Menge  $\emptyset$  sowie der gesamte Grundraum  $E$ . Die Elemente dieses Mengensystems  $\mathcal{F} = \{F \mid F \subseteq E\}$  werden als messbare Mengen bezeichnet. Da  $\mathcal{F}$  die Körperaxiome erfüllt, ist er abgeschlossen bezüglich Komplement-, Durchschnitts- und Vereinigungsbildung.

---

<sup>39</sup> vgl. Georg Reents. Einführung in die Funktionalanalysis, S.4.

Das  $\mu$  im Maßraum  $(E, \mathcal{F}, \mu)$  wird als Maß bezeichnet und ist eine reellwertige, positiv-definite Mengenfunktion  $\mu(F)$ , welche den messbaren Mengen  $F \in \mathcal{F}$  reelle Zahlen zuordnet und dabei folgende beiden Eigenschaften erfüllt:

$$\mu(\emptyset) = 0$$

$$\mu(\cup_i F_i) = \sum_i \mu(F_i), \text{ wenn die } F_i \text{ paarweise disjunkt sind.}$$

Durch dieses Maß wird den messbaren Mengen gewissermaßen ihre Größe zugeordnet. Ein Element  $F$  aus dem Sigmakörper, eine messbare Menge, besitzt demnach beispielsweise das Maß Null, wenn gilt:  $\mu(F) = 0$ .

Sei  $F$  eine beliebige messbare Menge vom Maß null aus dem Sigmakörper  $\mathcal{F}$ . Diese Menge kann selber in Teilmengen  $T_i$  zerlegt werden. Liegen alle diese Teilmengen  $T_i$  wiederum in  $\mathcal{F}$ , also sind diese Mengen selber messbar, so wird der Maßraum als vollständig bezeichnet.<sup>40</sup> Diese Bedingung muss nur für die messbaren Mengen vom Maß null gelten. Es ist möglich jeden nicht vollständigen Maßraum zu vervollständigen, weshalb ab sofort jeder Maßraum als vollständig betrachtet werden kann.

Über dem Maßraum  $(E, \mathcal{F}, \mu)$  kann nun die Eigenschaft der messbaren Funktion erläutert werden. Hierfür soll zunächst eine komplexwertige Funktion

$$f(x): \mathcal{F} \rightarrow \mathbb{C}$$

definiert werden, wobei der Körper  $\mathbb{C}$  hier ebenfalls als Maßraum aufgefasst werden soll. Diese Funktion wird als messbar bezeichnet, wenn das Urbild jeder messbaren Menge  $C \in \mathbb{C}$  unter der Funktion  $f$  ein Element aus  $\mathcal{F}$ , also eine messbare Menge in  $(E, \mathcal{F}, \mu)$  ist:

$$f^{-1}(C) \in \mathcal{F} \quad \text{für alle } C \in \mathbb{C}.$$

Eine komplexwertige Funktion  $f(x)$  ist messbar, wenn sowohl der Realteil als auch der Imaginärteil messbar sind.<sup>41</sup> Nur solche Funktionen sind in der Menge  $\tilde{\mathcal{L}}_2$  enthalten. Beispiele für messbare Funktionen bilden die Stufenfunktionen, stetige Funktionen und die Limites von diesen.<sup>42</sup>

---

<sup>40</sup> vgl. Siegfried Großmann. Funktionalanalysis im Hinblick auf Anwendungen in der Physik, S. 38.

<sup>41</sup> vgl. Siegfried Großmann. Funktionalanalysis im Hinblick auf Anwendungen in der Physik, S. 39.

<sup>42</sup> vgl. Siegfried Großmann. Funktionalanalysis im Hinblick auf Anwendungen in der Physik, S. 39.

Zum vollständigen Verständnis des Raumes  $\tilde{\mathcal{L}}_2(E, \mathcal{F}, \mu)$  muss nun das Integral  $\int |f|^2 d\mu < \infty$  analysiert werden, das als zweite Eigenschaft verlangt wird. Diese Bedingung muss gefordert werden, damit auf die Stetigkeit der Funktionen  $f(x)$  verzichtet werden kann. Sie schränkt die enthaltenen Funktionen auf diejenigen ein, deren Integral im Sinne der 2-Norm konvergiert, also einen endlichen Wert annimmt. Erfüllt eine Funktion  $f(x)$  diese Eigenschaft, so wird sie als quadratsummabel bezeichnet. Das zuvor verwendete Riemann-Integral ist allerdings nur auf stetige Funktionen anwendbar, sodass hier, für die nicht zwangsweise stetigen Funktionen, ein allgemeinerer Integralbegriff eingeführt werden muss: Das Lebesgue-Integral. Dieses wird anschaulich gesehen nicht durch die Einteilung der Abszisse, sondern durch die Zerlegung der Ordinate in Teilintervall angenähert. Die genauen Details dieses Integralbegriffs sollen hier jedoch nicht betrachtet werden. Für die Physik ist vor allem folgender Zusammenhang interessant: Handelt es sich bei  $f(x)$  um eine beschränkte Funktion, welche über einem endlichen Intervall  $E \subset \mathbb{R}^n$  Riemann-integrierbar ist, dann ist  $f(x)$  Lebesgue-summabel über  $E$  und beide Integrale haben den gleichen Wert. Der Buchstabe  $\mathcal{L}$  in der Notation geht auf den französischen Mathematiker Henri Léon Lebesgue zurück, der maßgeblich bei der Entwicklung des Lebesgue-Integrals beteiligt war. Der Index 2 bei  $\tilde{\mathcal{L}}_2$  stimmt mit der Potenz im Integral überein und wird in der Bezeichnung quadratsummabel aufgegriffen. Nun, da die Definition des  $\tilde{\mathcal{L}}_2(E, \mathcal{F}, \mu)$  ausführlich untersucht wurde, kann überprüft werden, ob es sich hierbei um einen Hilbert-Raum handelt.

Seien die Funktionen  $f(x), g(x) \in \tilde{\mathcal{L}}_2(E, \mathcal{F}, \mu)$  und  $\alpha, \beta \in \mathbb{C}$  gegeben, die also insbesondere messbar und quadratsummabel sind. Dann ist auch  $\alpha f(x) + \beta g(x)$  messbar und wegen

$$|f + g|^2 \leq 2(|f|^2 + |g|^2)$$

auch quadratsummabel.

Durch die bereits definierten Verknüpfungen  $(f + g)(x) := f(x) + g(x)$  und  $(\alpha f)(x) := \alpha f(x)$  wird  $\tilde{\mathcal{L}}_2(E, \mathcal{F}, \mu)$  zu einem Vektorraum. Durch das mit dem Lebesgue-Integral definierten Produkt

$$\langle f, g \rangle = \int_E \bar{f} g d\mu$$

wird hieraus allerdings kein unitärer Vektorraum, denn diese Abbildung besitzt nicht alle an das Skalarprodukt geforderten Eigenschaften. Insbesondere müsste gelten

$$\langle f, f \rangle = 0 \quad \Leftrightarrow \quad f = 0 \quad \text{(Gleichung 2.3)}$$

Im  $\tilde{\mathcal{L}}_2(E, \mathcal{F}, \mu)$  gibt es allerdings Funktionen, die nicht konstant null sind, deren Produkt mit sich selbst allerdings dennoch null ergibt. Wenn also das Integral über eine positiv-definite Funktion null ist, so kann nicht geschlossen werden, dass die Funktion überall, sondern nur, dass sie fast überall (f.ü.) null ist:

$$\int |f|^2 d\mu = 0 \quad \Leftrightarrow \quad |f| = 0 \quad \text{f.ü.}$$

Diejenige Punktmenge, für welche die Funktion andere Werte als die null annimmt, besitzt dann das Maß null. Beispielsweise erfüllt eine Funktion, die auf allen rationalen Punkten null ist  $f(x) = y_i \neq 0$  diese Bedingung. Dies hat die Konsequenz, dass  $\tilde{\mathcal{L}}_2(E, \mathcal{F}, \mu)$  kein unitärer Raum und damit auch kein Hilbert-Raum ist.

Um dieses Problem zu beheben, kann ein mathematischer Trick angewendet werden, der dafür sorgt, dass alle Funktionen  $f(x), g(x), h(x)$ , usw. aus  $\tilde{\mathcal{L}}_2(E, \mathcal{F}, \mu)$ , welche für fast alle  $x \in E$  übereinstimmen, zu einem Element zusammengefasst werden. Für diese verschiedenen Elemente ist dann insbesondere auch Gleichung 2.3, welche zuvor Probleme gemacht hat, erfüllt. Mathematisch gesehen sind diese neuen Elemente sogenannte Äquivalenzklassen, welche mit Hilfe einer passend definierten Äquivalenzrelation gebildet werden können. Ehe auf dem Funktionenraum  $\tilde{\mathcal{L}}_2(E, \mathcal{F}, \mu)$  die geeignete Äquivalenzrelation definiert werden kann, soll zunächst allgemein erklärt werden, worum es sich bei einer Relation handelt und welche Eigenschaften eine solche erfüllen muss, damit sie eine Äquivalenzrelation darstellt.

### 2.4.3 Die Äquivalenzrelation

Bei einer Relation auf einer Menge  $M$  handelt es sich um eine Teilmenge  $R \subset M \times M$  des kartesischen Produkts. Die Elemente dieser Teilmenge sind also Paare  $(x, y)$  von Elementen  $x, y$  aus  $M$ . Ein Element  $x \in M$  steht in Relation zu einem Element  $y \in M$ , wenn das Tupel  $(x, y)$  in der Teilmenge  $R$  enthalten ist. Abkürzend wird dafür folgende Notation verwendet:

$$x \sim y \quad \text{falls} \quad (x, y) \in R$$

Eine Relation auf  $M$  heißt

- a) reflexiv, falls für jedes  $x \in M$  gilt:  $x \sim x$
- b) symmetrisch, falls  $x \sim y$  auch  $y \sim x$  impliziert
- c) transitiv, falls  $x \sim y$  und  $y \sim z$  auch  $x \sim z$  impliziert

Eine Relation, die alle diese drei Eigenschaften erfüllt, wird als Äquivalenzrelation bezeichnet.

Ist  $M$  eine Menge, auf der eine Äquivalenzrelation definiert ist. Dann heißt die zu  $x \in M$  definierte Menge

$$[x] := \{y \in M \mid x \sim y\}$$

die Äquivalenzklasse von  $x$ .<sup>43</sup>

Dank der drei charakterisierenden Eigenschaften einer Äquivalenzrelation kann bewiesen werden, dass zwei Äquivalenzklassen  $[x]$  und  $[y]$  zu verschiedenen Elementen  $x$  bzw.  $y$  entweder vollständig übereinstimmen oder kein gemeinsames Element haben. Die Äquivalenzklassen zerlegen die Menge vollständig in disjunkte Teilmengen.

Diese sehr abstrakten Definitionen sollen nun anhand eines anschaulichen Beispiels plausibel gemacht werden. Die folgende Menge  $M$  enthält die wohlbekanntesten berühmten Physiker aus dem Beispiel für eine Folge.

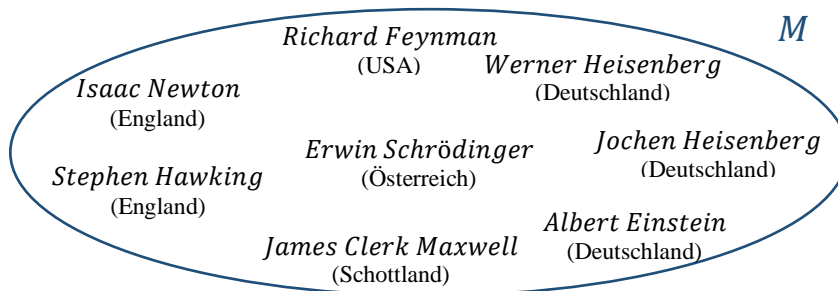


Abb. 13: Mengendarstellung berühmter Physiker mit Geburtsland<sup>44</sup>

Nun ist allerdings nicht das Geburtsjahr von Interesse, weshalb die Reihenfolge irrelevant ist, sondern das in Klammern notierte Geburtsland soll als charakterisierendes Merkmal betrachtet werden.

Auf dieser Menge kann wie folgt eine Relation definiert werden:

<sup>43</sup> vgl. Jens Jordan. Skript Lineare Algebra, S. 8.

<sup>44</sup> selbst erstellt.

Physiker1 steht in Relation zu Physiker2, falls das Geburtsland der beiden übereinstimmt. Oder formal ausgedrückt soll für zwei Elemente  $P_1, P_2 \in M$  die Bedingung

$$P_1 \sim P_2 \quad \Leftrightarrow \quad \text{Geburtsland}(P_1) = \text{Geburtsland}(P_2)$$

gelten. Dementsprechend würde beispielsweise Werner Heisenberg in Relation zu Albert Einstein stehen, da beide in Deutschland geboren wurden.

Nun kann bewiesen werden, dass es sich hierbei sogar um eine Äquivalenzrelation handelt:

- a) Sie ist reflexiv, da jeder Physiker selbstverständlich im selben Land geboren wurde wie er selbst.
- b) Wurde Physiker1 im selben Land geboren wie Physiker2, so wurde logischerweise auch Physiker2 im selben Land geboren wie Physiker1, weshalb die Relation auch symmetrisch ist.
- c) Auch die Transitivität ist erfüllt. Denn wurde Physiker1 im selben Land geboren wie Physiker2 und wurde Physiker2 im selben Land geboren wie Physiker3 dann wurde auch Physiker1 im selben Land geboren wie Physiker3.

Nun kommt der wichtigste Teil der Definition. Die Äquivalenzklasse. Dafür soll zunächst ein beliebiger Physiker  $P$  aus der Menge  $M$  ausgewählt werden und dessen Äquivalenzklasse betrachtet werden:

$$[P] = \{P_i \mid \text{Geburtsland}(P) = \text{Geburtsland}(P_i)\}$$

Die Äquivalenzklasse eines Physikers ist demnach die Menge aller Physiker, die im selben Land geboren wurden wie er selbst. In dieser Menge muss natürlich Physiker  $P$  selber auch enthalten sein, schließlich steht er nach der Reflexivität zu sich selbst in Relation.

Beispielsweise sieht die Äquivalenzklassen von Albert Einstein wie folgt aus:

$$[\text{Albert Einstein}] = \{\text{Albert Einstein}, \text{Jochen Heisenberg}, \text{Werner Heisenberg}\}$$

Die Äquivalenzklassen von Jochen Heisenberg und Werner Heisenberg sehen selbstverständlich analog aus. Die Äquivalenzklasse von Richard Feynman dagegen enthält nur einen Physiker, nämlich ihn selber, da aus der betrachteten Menge  $M$  sonst niemand in den USA geboren wurde.

Wird nun die Menge  $M$  entsprechend ihrer Äquivalenzklassen eingeteilt, so fällt auf, dass diese tatsächlich in disjunkte Teilmengen gegliedert wird:



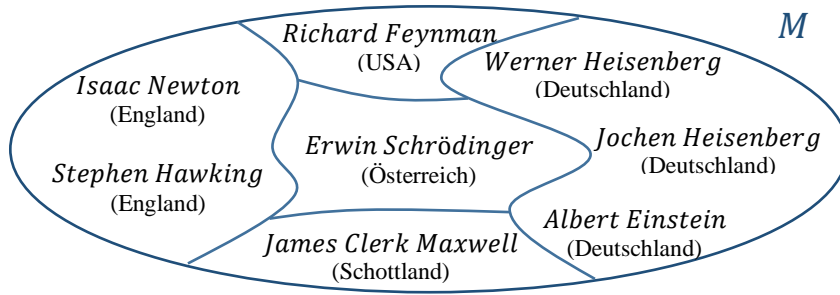


Abb. 14: Einteilung der Physiker in Äquivalenzklassen<sup>45</sup>

Nach diesem anschaulichen Beispiel soll nun zum Funktionenraum  $\tilde{\mathcal{L}}_2(E, \mathcal{F}, \mu)$  zurückgekehrt werden. Hierauf kann die folgende Relation für alle  $f, g \in \tilde{\mathcal{L}}_2(E, \mathcal{F}, \mu)$  definiert werden:

$$f \sim g \Leftrightarrow f - g = 0 \text{ f.ü.}$$

Diese Relation ist

- a) Reflexiv, denn  $f - f = 0$  f.ü.
- b) Symmetrisch, denn aus  $f - g = 0$  f.ü.  $\Rightarrow g - f = 0$  f.ü.
- c) Transitiv, denn aus  $f - g = 0$  f.ü. und  $g - h = 0$  f.ü.  $\Rightarrow f - h = 0$  f.ü.

Dies beweist, dass es sich hierbei um eine Äquivalenzrelation handelt. Diese Relation definiert also zwei Funktionen als äquivalent, wenn deren Differenz für fast alle Element  $x \in E$  aus dem Definitionsbereich verschwindet, also wenn die Funktionen für fast alle Elemente aus  $E$  übereinstimmen.

Auf dieser Äquivalenzrelation kann nun entsprechend obiger Definition die Äquivalenzklasse von einer Funktion  $f \in \tilde{\mathcal{L}}_2(E, \mathcal{F}, \mu)$  wie folgt angegeben werden:

$$[f] = \{g \in \tilde{\mathcal{L}}_2 \mid f \sim g\}$$

Diese Menge umfasst also alle Funktionen  $g \in \tilde{\mathcal{L}}_2(E, \mathcal{F}, \mu)$ , die mit  $f$  für fast alle Elemente aus  $E$  übereinstimmen. Damit ist die gewünschte Gruppierung der quadratintegrierbaren Funktionen gefunden, denn analog zum Beispiel der Physiker, wird auch die Menge  $\tilde{\mathcal{L}}_2(E, \mathcal{F}, \mu)$  durch die Äquivalenzklassen in Teilmengen unterteilt, die entweder vollständig übereinstimmen oder kein gemeinsames Element besitzen. Diese disjunkten Teilmengen bilden nun die Elemente eines neuen Vektorraumes, der wie folgt definiert ist:

<sup>45</sup> selbst erstellt.

$$\mathcal{L}_2(E) = \{f \mid f = (f(x)), \\ f(x) \text{ komplexwertig,} \\ \text{messbare Funktionen über dem Maßraum } (E, \mathcal{F}, \mu), \\ \int |f|^2 d\mu < \infty, \\ \text{gefasert nach Äquivalenzklassen } [f] \text{ f.ü. gleicher Funktionen}\}^{46}$$

Dieser unterscheidet sich vom Funktionenraum  $\tilde{\mathcal{L}}_2(E, \mathcal{F}, \mu)$  also maßgeblich dahingehend, dass er anstelle von Funktionen nun Funktionenklassen enthält. Die auf  $\tilde{\mathcal{L}}_2$  schon gültigen Vektorraumaxiome übertragen sich allerdings vollständig auf den neuen Raum.

Das Skalarprodukt  $\langle f, g \rangle = \int_E \bar{f}g \, d\mu$  ist unabhängig vom Vertreter und kann daher als Integral für die Äquivalenzklassen gelesen werden. Nun ist auch das zuvor problematische Axiom aus Gleichung 2.3 erfüllt.

Das im Raum  $C[a, b]$  festgestellte Problem der Vollständigkeit ist für diesen Raum ebenfalls behoben. Genau dies beweist ein wichtiger Satz der Funktionalanalysis, welcher 1907 von den Mathematikern F. Riesz und E. Fischer unabhängig voneinander bewiesen wurde. Dieser sagt aus, dass für eine Folge  $(f_n)$  im Vektorraum  $\mathcal{L}_2$  genau dann eine Limesfunktion  $f \in \mathcal{L}_2$  existiert, wenn die Folge  $f_n$  in sich konvergent ist, also

$$\int |f_n - f_m|^2 d\mu < \varepsilon, \quad n, m \geq N(\varepsilon)$$

Im Raum  $\mathcal{L}_2$  ist also jede konvergente Folge schon eine Cauchyfolge, was genau der Bedingung der Vollständigkeit entspricht. Diese wichtige Eigenschaft kann im Raum  $\mathcal{L}_2$  im Gegensatz zum  $C[a, b]$  erreicht werden, da hier die Stetigkeit der Funktionen nicht mehr gefordert wird.

Der so definierte Vektorraum ist also auch vollständig bezüglich der Norm  $\|f\| = \int |f|^2 d\mu$  und bildet damit den gewünschten Hilbert-Raum.

---

<sup>46</sup> Siegfried Großmann. Funktionalanalysis im Hinblick auf Anwendungen in der Physik, S. 43.

### 3 Vollständiges Orthonormalsystem

Mit den Verknüpfungen Addition, skalare Multiplikation und Skalarprodukt, sowie durch die dadurch induzierten Abbildungen Norm und Metrik wird dem Hilbert-Raum eine gewisse Struktur verliehen. Eine Struktur, welche die Grundmenge überhaupt zu einem Hilbert-Raum werden lässt. Sie erlaubt es, Vektoren aus dem Raum miteinander zu verknüpfen und sie auf Länge, Abstand und Winkel zueinander zu untersuchen. Trotz dieser Verknüpfungen und Abbildungen muss bisher jedes Element des Hilbert-Raumes einzeln für sich beschrieben werden, was bei einer unendlich großen Menge sehr schwierig werden könnte. Daher ist es das Ziel dieses Kapitels dem Hilbert-Raum noch mehr Ordnung zu verleihen und mit dem vollständigen Orthonormalsystem eine Teilmenge zu definieren, die den gesamte Raum beschreiben kann. Als gleichwertige Alternativbezeichnung wird hierfür auch der Begriff Orthonormalbasis verwendet.

Der erste Bestandteil des Wortes Orthonormalsystem umfasst die beiden Eigenschaften orthogonal und normiert, welche diese Teilmenge bereits wesentlich charakterisieren. In den Räumen  $\mathbb{R}^2$  oder  $\mathbb{R}^3$  ist es anschaulich klar was es bedeutet, wenn zwei Vektoren orthogonal sind. Sie stehen senkrecht aufeinander, schließen also einen  $90^\circ$  Winkel ein. Auf diese Anschauung kann in abstrakten Räumen, wie beispielsweise in einem Funktionenraum, nicht zurückgegriffen werden. Im Kapitel über das Skalarprodukt wurden zwei Vektoren eines Vektorraumes ganz allgemein als orthogonal zueinander definiert, wenn deren Skalarprodukt null ergibt. Ein Vektor wird als normiert bezeichnet, wenn seine Norm, in diesem Fall die durch das Skalarprodukt induzierte Norm, den Wert eins besitzt. Dies entspricht der Tatsache, dass das Skalarprodukt des Vektors mit sich selbst den Wert eins ergibt.

Ein Orthonormalsystem ist also eine Menge von Vektoren  $\{\psi_i\} \subset \mathcal{H}$ , welche die folgende Beziehung erfüllt.

$$\langle \psi_i, \psi_j \rangle = \delta_{ij} = \begin{cases} 1 & \text{für } i = j & \text{(Normiertheit)} \\ 0 & \text{für } i \neq j & \text{(Orthogonalität)} \end{cases}$$

In diesem Hilbert-Raum soll nun untersucht werden, ob die Menge

$$M = \left\{ m_1 = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, m_2 = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} \right\}$$

ein Orthonormalsystem bildet.

Dafür wird das Skalarprodukt zwischen den Vektoren und jedes einzelnen Vektors mit sich selbst untersucht:

$$\left\langle \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} \right\rangle = 1 \cdot 0 + 0 \cdot 1 + 0 \cdot 0 = 0 \quad \Rightarrow m_1 \text{ und } m_2 \text{ sind orthogonal zueinander}$$

$$\left\langle \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \right\rangle = 1 \cdot 1 + 0 \cdot 0 + 0 \cdot 0 = 1 \quad \Rightarrow m_1 \text{ ist normiert}$$

$$\left\langle \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} \right\rangle = 0 \cdot 0 + 1 \cdot 1 + 0 \cdot 0 = 1 \quad \Rightarrow m_2 \text{ ist normiert}$$

Demnach sind alle Voraussetzungen des Orthonormalsystems erfüllt.

Nun lässt sich mit  $\begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} \notin M$  aber noch ein weiterer Vektor finden, der normiert ist und zu den beiden anderen Vektoren aus der Menge  $M$  orthogonal ist. Dies kann analog mit dem Skalarprodukt überprüft werden. Außerdem ist es nicht möglich mit den Vektoren aus dem gefundenen Orthonormalsystem  $M$  jeden Vektor des Hilbert-Raumes  $\mathbb{R}^3$  als Linearkombination darzustellen. Mit  $m_1$  und  $m_2$  können nur die Vektoren gebildet werden, die in der x-y-Ebene liegen. Um das oben gesteckte Ziel zu erreichen und eine Teilmenge zu finden, mit welcher der gesamte Vektorraum beschrieben werden kann, ist das Orthonormalsystem  $M$  somit nicht ausreichend. Es muss noch durch den Vektor  $\begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}$  vervollständigt werden.

---

Eine Teilmenge  $\{\psi_i\}$  des Hilbert-Raumes  $\mathcal{H}$  wird als vollständiges Orthonormalsystem oder auch als Orthonormalbasis bezeichnet, wenn in  $\mathcal{H} \setminus \{\psi_i\}$  kein Vektor  $\varphi \neq 0$  existiert, der zu allen Vektoren des Orthonormalsystems senkrecht steht.<sup>47</sup> Dementsprechend kann eine solche Basis nicht vergrößert werden. Sie enthält eine maximale Anzahl von Vektoren, die alle orthogonal zueinander stehen. Ist ein Orthonormalsystem  $\{\psi_i\} \subset \mathcal{H}$  nicht vollständig, so kann, wie im obigen Beispiel, ein Vektor in  $\mathcal{H} \setminus \{\psi_i\}$  gefunden werden, der auf eins normiert ist und zu allen Vektoren des Orthonormalsystems senkrecht steht. Werden der Reihe nach alle solche Vektoren der Menge  $\{\psi_i\}$  hinzugefügt, so kann dieses zu einer Orthonormalbasis vervollständigt werden.

---

#### Beispiel für ein vollständiges Orthonormalsystem im $\mathbb{R}^3$

---

Für den euklidischen Raum wurde oben bereits eine Orthonormalbasis

$$B = \left\{ \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} \right\}$$

gefunden. Aufgrund ihrer einfachen Struktur und der entsprechend häufigen Anwendung, wird sie als Standardbasis des  $\mathbb{R}^3$  bezeichnet. Wie oben teilweise gezeigt wurde, sind alle drei Vektoren orthogonal zueinander und jeder besitzt bezüglich der euklidischen Norm die Länge eins.

Des Weiteren können aus den drei Vektoren alle anderen Elemente des  $\mathbb{R}^3$  gebildet werden, denn für alle  $\begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} \in \mathbb{R}^3$  mit  $x, y, z \in \mathbb{R}$  gilt:

$$\begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} = x \cdot \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} + y \cdot \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} + z \cdot \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

Die Entwicklungskoeffizienten  $x$ ,  $y$  und  $z$  können hierfür mit dem Skalarprodukt wie folgt berechnet werden:

$$\left\langle \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} \right\rangle = 1 \cdot x + 0 \cdot y + 0 \cdot z = x \quad \text{analog für die Koeffizienten } y \text{ und } z.$$

---

<sup>47</sup> Eckhard Rebban. Theoretische Physik: Quantenmechanik, S. 252.

Die Menge  $B$  erfüllt somit alle notwendigen Kriterien eines vollständigen Normalsystems für den Hilbert-Raum  $\mathbb{R}^3$ .

Im Folgenden wird sich zeigen, dass die eben vorgestellte Entwicklung der Koeffizienten nicht nur für dieses konkrete Beispiel möglich ist, sondern prinzipiell in allen anderen Hilbert-Räume angewendet werden kann.

---

Mit der Orthonormalbasis wurde bereits eine vielversprechende Teilmenge gefunden, um den gesamten Hilbert-Raum zu beschreiben. Die nächsten Schritte bestehen nun darin diese Vermutung zu bestätigen und zu beweisen, dass mit den Elementen aus einem vollständigen Orthonormalsystem tatsächlich jeder Vektor aus dem Hilbertraum dargestellt werden kann.

Damit dies grundsätzlich möglich ist und für alle beliebigen Hilbert-Räume verallgemeinert werden kann, muss zunächst sichergestellt werden, dass jeder Hilbert-Raum eine Orthonormalbasis besitzt. Diese Existenzfrage lässt sich ganz grundlegend bejahen und soll nun bewiesen werden.

*Aussage:* Jeder Hilbert-Raum besitzt ein vollständiges Orthonormalsystem

*Beweis:* Wähle ein beliebiges Element  $\tilde{\varphi} \in \mathcal{H}$  aus dem Hilbert-Raum. Dieses kann nun durch Multiplikation mit dem Inversen seiner Norm auf eins normiert werden. Definiere also:

$$\varphi := \frac{\tilde{\varphi}}{\|\tilde{\varphi}\|}.$$

Damit bildet die durch dieses Element entstandene Menge  $\{\varphi\}$  bereits ein Orthonormalsystem.

Nun soll die Menge aller Orthonormalsysteme  $\mathcal{S} = \{S_1, S_2, \dots, S_a, \dots\}$  von  $\mathcal{H}$  mit  $a \in I$  untersucht werden, wobei  $I$  eine beliebige Indexmenge ist. Da mit der Menge  $\{\varphi\}$  bereits ein solches System gefunden wurde, ist  $\mathcal{S}$  nicht leer.

Definiere die Relation  $<$  auf der Menge  $\mathcal{S}$  wie folgt:

$$S < S' \quad \Leftrightarrow \quad (\varphi \in S \Rightarrow \varphi \in S')$$

Diese Relation ist

- Reflexiv, denn  $S < S$
- Antisymmetrisch, denn aus  $S < S'$  und  $S' < S$  folgt automatisch  $S = S'$
- Transitiv, denn aus  $S < S'$  und  $S' < S''$  folgt automatisch  $S < S''$

für alle  $S, S', S'' \in \mathcal{S}$

Mit dieser reflexiven, antisymmetrischen und transitiven Relation wird  $\mathcal{S}$  zu einer teilgeordneten Menge. Angenommen  $\tilde{\mathcal{S}}$  ist eine linear geordnete Teilmenge von  $\mathcal{S}$ , dann ist die Vereinigung aller  $S_\alpha \in \tilde{\mathcal{S}}$  sicher wieder ein Orthonormalsystem und bildet eine obere Grenze von  $\tilde{\mathcal{S}}$  in  $\mathcal{S}$ .

Nun kann das zornsche Lemma angewendet werden, welches folgende Aussage macht: „Hat jede linear geordnete Teilmenge einer teilgeordneten Menge  $X$  eine obere Grenze in  $X$ , so enthält  $X$  (mindestens) ein maximales Element.“<sup>48</sup>

Da die obige Teilmenge  $\tilde{\mathcal{S}}$  beliebig gewählt war, ist die Bedingung dieses Lemmas erfüllt. Die Menge  $\mathcal{S}$  besitzt also ein maximales Element  $S_{\max}$  bei dem es sich um ein Orthonormalsystem handelt. Dieses muss sogar vollständig sein, denn andernfalls könnte ein weiteres Element  $\psi$  hinzugefügt werden, das zu allen Elementen aus  $S_{\max}$  senkrecht steht.

Damit folgt die Behauptung.<sup>49</sup> ■

Was diese Teilmenge genau leisten kann, soll nun untersucht und ebenfalls anschließend bewiesen werden.

*Aussage:* Für einen beliebigen Hilbert-Raum  $\mathcal{H}$  sei die Menge  $\{\psi_n\}_{n \in I}$  eine Orthonormalbasis. Dann kann jedes Element  $\varphi \in \mathcal{H}$  wie folgt als Linearkombination nach dieser Basis entwickelt werden:

$$\varphi = \sum_{n \in I} \langle \psi_n, \varphi \rangle \psi_n$$

Die Koeffizienten  $\langle \psi_n, \varphi \rangle$ , mit denen die Basisvektoren  $\psi_n$  bei der Entwicklung des Vektors  $\varphi$  multipliziert werden, heißen Entwicklungskoeffizienten von  $\varphi$  bezüglich der Basis  $\{\psi_n\}$ . Die Indexmenge  $I$  kann dabei beliebig groß sein.<sup>50</sup>

---

<sup>48</sup> Siegfried Großmann. Funktionalanalysis im Hinblick auf Anwendungen in der Physik, S. 63.

<sup>49</sup> vgl. Siegfried Großmann. Funktionalanalysis im Hinblick auf Anwendungen in der Physik, S. 63.

<sup>50</sup> vgl. Georg Reents. Einführung in die Funktionalanalysis, S. 6.

*Beweis:* Sei  $\{\psi_n\}_{n \in I}$  ein vollständiges Orthonormalsystem und  $\varphi$  ein beliebiger Vektor im Hilbert-Raum. Definiere einen Vektor  $\pi$  auf folgende Weise:

$$\pi := \varphi - \sum_{n \in I} \psi_n \langle \psi_n, \varphi \rangle,$$

wobei  $I$  eine beliebige Indexmenge ist. Dieser Vektor liegt ebenfalls im Hilbert-Raum, da er aus Summen und Produkten zwischen Vektoren aus  $\mathcal{H}$  konstruiert ist. Dieser Vektor soll nun von links mit  $\psi_m \in \mathcal{H}$  multipliziert werden.

Dann gilt für alle  $m \in I$ :  $\langle \psi_m, \pi \rangle = \langle \psi_m, \varphi \rangle - \sum_{n \in I} \langle \psi_m, \psi_n \rangle \langle \psi_n, \varphi \rangle$

Da die Elemente des vollständigen Orthonormalsystems alle senkrecht aufeinander stehen und normiert sind, ist das Skalarprodukt  $\langle \psi_m, \psi_n \rangle$  entweder gleich null, im Falle  $m$  und  $n$  verschieden, oder gleich eins, wenn  $m = n$  gilt. Damit bleibt in der Summe nur der Summand übrig, für den  $n = m$  erfüllt ist.

Hieraus folgt also:

$$\langle \psi_m, \pi \rangle = \langle \psi_m, \varphi \rangle - 1 \cdot \langle \psi_m, \varphi \rangle = 0.$$

Dies bedeutet, der konstruierte Vektor  $\pi$  steht auf allen Elementen aus  $\{\psi_n\}_{n \in I}$  senkrecht. Wegen der Vollständigkeit des Orthonormalsystems, darf es jedoch außer dem Nullvektor keinen Vektor mit dieser Eigenschaft geben, d.h. es gilt  $\pi = 0$  und damit lässt sich die anfangs aufgestellte Gleichung wie folgt umformen:

$$0 = \varphi - \sum_{n \in I} \psi_n \langle \psi_n, \varphi \rangle,$$

$$\Leftrightarrow \varphi = \sum_{n \in I} \psi_n \langle \psi_n, \varphi \rangle,$$

Damit ist die Behauptung erfüllt.<sup>51</sup> ■

Ebenso wie bei der Norm, kann auch hier nicht pauschal von der einen Orthonormalbasis des Hilbert-Raumes gesprochen werden. In vielen Räumen gibt es mehrere Möglichkeiten eine solche Basis anzugeben. Besitzt ein Hilbert-Raum mehrere Basen, so enthalten diese jedoch alle dieselbe Anzahl von Elementen. Diese Aussage soll nun nicht bewiesen werden, liefert aber ein wichtiges Charakteristikum des Raumes: Die Mächtigkeit aller

---

<sup>51</sup> vgl. Eckhard Rebhan. Theoretische Physik: Quantenmechanik, S. 252.



vollständigen Orthonormalsysteme eines Hilbert-Raumes ist gleich und wird als die Dimension des Hilbert-Raumes bezeichnet.<sup>52</sup>

Die Räume  $\mathbb{R}^2$ ,  $\mathbb{R}^3$ , bzw. ganz allgemein  $\mathbb{R}^n$  besitzen eine endliche Orthonormalbasis mit zwei, drei bzw.  $n$  Elementen. Da diese Mächtigkeit mit der Dimension des Hilbert-Raumes übereinstimmt, handelt es sich in diesen Beispielen also um zwei-, drei- bzw.  $n$ -dimensionale Hilbert-Räume. Die endliche Mächtigkeit der Basis impliziert allerdings nicht, dass im Hilbert-Raum selbst nur endlich viele Elemente liegen können, sondern beschreibt lediglich die maximale Zahl linear unabhängiger Vektoren in diesem Raum.<sup>53</sup> Dies zeigt auch der euklidische Raum  $\mathbb{R}^3$  beispielhaft. Er besitzt die Dimension drei. Jede seiner möglichen Orthonormalbasen besteht also aus drei Elementen, während er selber aber unendliche viele Elemente enthält.

Die Untersuchung des endlich dimensionalen Falls ist für die Physik jedoch nicht ausreichend. Ein Beispiel hierfür ist das Wasserstoffatom. In diesem lassen sich unendlich viele Eigenwerte beobachten, was eine Beschreibung mit einem endlich dimensional Hilbert-Raum unmöglich macht. Daher müssen auch unendlich-dimensionale Räume untersucht werden.<sup>54</sup>

Unendlich ist aber nicht gleich unendlich, zumindest in der Mathematik. Hier muss zwischen den Fällen abzählbar-unendlich und überabzählbar unterschieden werden. Eine Menge wird als abzählbar-unendlich bezeichnet, wenn sie gleiche Mächtigkeit hat wie die Menge der natürlichen Zahlen und jedes Element der Menge dementsprechend durchnummeriert werden kann. Sie wird als überabzählbar bezeichnet, wenn sie nicht endlich und nicht abzählbar-unendlich ist.<sup>55</sup> Zwei Beispiele sollen diese Definitionen erläutern.

---

#### Beispiel für eine abzählbar-unendliche Menge: Die Primzahlen

---

Eine Primzahl ist bekanntermaßen eine natürliche Zahl, die nur durch eins und sich selbst teilbar ist. Der griechische Mathematiker Euklid zeigte bereits im Jahr 300 v.Chr., dass es unendlich viele solcher Zahlen gibt. Da die Primzahlen eine Teilmenge der natürlichen

---

<sup>52</sup> vgl. Siegfried Großmann. Funktionalanalysis im Hinblick auf Anwendungen in der Physik, S. 64.

<sup>53</sup> vgl. Siegfried Großmann. Funktionalanalysis im Hinblick auf Anwendungen in der Physik, S. 58.

<sup>54</sup> vgl. Siegfried Großmann. Funktionalanalysis im Hinblick auf Anwendungen in der Physik, S. 58.

<sup>55</sup> vgl. Christiane Tretter. Analysis I, S. 56.

Zahlen bilden, welche per Definition abzählbar sind, ist diese Menge abzählbar-unendlich. Wie folgender Ansatz zeigt, können sie der Größe aufsteigend der Reihe nach nummeriert werden:

1. Primzahl: 2
2. Primzahl: 3
3. Primzahl: 5
- ...

Jeder Primzahl kann auf diese Weise einer natürlichen Zahl zugeordnet werden. Dementsprechend sind diese beiden Mengen gleichmächtig.

---

---

#### Beispiel für eine überabzählbare Menge: Die Reellen Zahlen

---

---

Versucht man eine Liste aller reellen Zahlen zwischen null und eins zu erstellen, so kann diese niemals vollständig sein. Egal wie viele Zahlen aufgeschrieben werden, es kann immer eine gefunden werden, die noch in der Liste fehlt.

Der Versuch einer Auflistung könnte wie folgt beginnen:

1. Zahl: 0, **3**4567 ...
2. Zahl: 0,3**4**568 ...
3. Zahl: 0,34**5**69 ...
4. Zahl: 0,345**7**0 ...
- ...

Egal, wie weit diese Liste fortgesetzt wird, es lässt sich mit folgender Strategie immer eine noch nicht notierte reelle Zahl ergänzen. So wird für diese neue Zahl als erste Nachkommastelle eine Ziffer gewählt, die mit der ersten Nachkommastelle von Zahl 1 nicht übereinstimmt. Die zweite Nachkommastelle der neuen Zahl darf nicht mit der zweiten Nachkommastelle von Zahl 2 aus der Liste übereinstimmen usw. Eine mögliche neue Zahl nach diesem Verfahren wäre dann folgende:

Neue Zahl: 0, **4568** ...

Dieses von Georg Cantor entwickelte Diagonalverfahren beweist, dass die Menge der reellen Zahlen überabzählbar ist.<sup>56</sup>

Die reellen Zahlen können also nicht bijektiv auf die natürlichen Zahlen abgebildet werden, da deren Mächtigkeit größer ist als die Mächtigkeit der natürlichen Zahlen. Sie sind überabzählbar.

---

Diese Arbeit beschränkt sich im Folgenden auf diejenigen Hilbert-Räume, deren vollständiges Orthonormalsystem höchstens abzählbar-unendlich viele Elemente enthält. Diese Räume werden als separabel bezeichnet. Diejenigen mit überabzählbarer Dimension, die nicht separablen Hilbert-Räume, sollen nicht weiter untersucht werden. Unter der getroffenen Voraussetzung nur abzählbare Basen zu betrachten enthält die Entwicklung eines Vektors nach dieser Basis automatisch nur abzählbar viele Summanden. Es kann sogar bewiesen werden, dass auch bei einer Orthonormalbasis mit überabzählbar vielen Vektoren die Entwicklung nur aus abzählbar vielen Summanden besteht.

Nun wurde mit dem vollständigen Orthonormalsystem eine Teilmenge des Hilbert-Raumes gefunden, die es erlaubt den gesamten Raum darzustellen. Das Ziel, im Hilbert-Raum mehr Struktur zu schaffen, ist gelungen.

#### 4 Der Messprozess in der Quantenmechanik

Der Messvorgang eines quantenmechanischen Systems ist von dem eines makroskopischen Systems grundlegend zu unterscheiden. Eine erste Divergenz ist in der Vorhersagbarkeit des Ergebnisses festzustellen. Während die klassische Mechanik vollständig deterministisch ist und unter Berücksichtigung aller Parameter der genaue Bewegungsablauf berechnet werden kann, ist es in der Quantenmechanik nur möglich Wahrscheinlichkeitsaussagen über den Ausgang eines Experiments anzustellen. Soll beispielsweise die Bewegungskurve eines Balles beim Kugelstoßen bestimmt werden, so ist es möglich Ort, Impuls und Drehimpuls des Balles unmittelbar nach dem Abwurf, bis auf kleine Fehler durch die Messapparatur, gleichzeitig korrekt zu bestimmen und unter Berücksichtigung

---

<sup>56</sup> vgl. Walter Purkert. Georg Cantor. Leipzig 1985, S. 30.

aller einfließenden Parameter, wie beispielsweise der Erdbeschleunigung und dem Luftwiderstand, die Flugkurve zu berechnen. Könnte der exakt gleiche Wurf unter denselben Bedingungen ein weiteres Mal durchgeführt werden, so würde sich theoretisch wieder dieselbe Flugkurve wie zuvor ergeben. Wird dagegen ein Doppelspalt mit Elektronen oder Photonen befeuert, so kann nicht vorhergesagt werden, auf welchem Punkt am Detektor das Objekt auftreffen wird. Es ist lediglich bekannt, dass, je nach Wellenlänge und Spaltabmessungen, bestimmte Bereiche auf dem Schirm mit einer größeren Wahrscheinlichkeit als andere Gebiete getroffen werden. Auch bei einer wiederholten Durchführung des Experiments unter denselben Bedingungen würden nicht dasselbe Ergebnis wie zuvor eintreten. Stattdessen könnte wie zuvor nur eine Wahrscheinlichkeitsaussage über den Auftreffort gemacht werden. Bei dieser Gegenüberstellung und der Betonung des Determinismus in der klassischen Mechanik könnte einem, mit Blick auf das mathematische Teilgebiet der Stochastik, ein scheinbarer Widerspruch auffallen. Götz Kersting und Anton Wakolbinger definieren in ihrem Lehrbuch 'Elementare Stochastik' diese als "die mathematische Lehre von Zufall"<sup>57</sup>. Stochastische Zufallsexperimente, wie das Werfen eines Würfels oder einer Münze, sind jedoch eindeutig klassische Phänomene. Widerspricht dies nicht dem klassischen Determinismus? Nein. Hierbei handelt es sich nämlich nur um einen scheinbaren Zufall. Beim Werfen eines Würfels scheint es vom Glück abzuhängen, welche Zahl geworfen wird. Jede Zahl wird im Schnitt schließlich gleich häufig, also in einem Sechstel aller Fälle, geworfen. Tatsächlich ist das Ergebnis aber ein Resultat einer Vielzahl aus deterministischen Bewegungen, welches aus sämtlichen physikalischen Parametern von Würfel, Tisch und Luft berechnet werden könnte. Da bei jedem Würfelwurf allerdings unterschiedliche Bedingungen herrschen und diese Details mit bloßem Auge nicht wahrgenommen werden können, erscheint das Ergebnis nur zufällig.<sup>58</sup> In der Quantenmechanik dagegen ist der Zufall nach heutigem Wissensstand nicht durch unbestimmte Parameter bedingt, sondern eine Grundeigenschaft des Systems. Wie in der Stochastik ist es durch die Angabe von Wahrscheinlichkeitsverteilungen, Erwartungswert und Standardabweichung allerdings dennoch möglich, das System näher zu beschreiben.

Ein zweiter wesentlicher Unterschied zwischen Messvorgängen in der makroskopischen und mikroskopischen Welt besteht in der Möglichkeit zwei Größen eines Systems, beispielsweise den Ort und den Impuls eines Teilchens, gleichzeitig genau bestimmen zu

---

<sup>57</sup> Götz Kersting, Anton Wakolbinger. Elementare Stochastik. Basel 2010, S. 1.

<sup>58</sup> vgl. Jan-Markus Schwindt. Tutorium der Quantenmechanik. Heidelberg 2016, S. 135.

können. Dies ist in der klassischen Mechanik bis auf kleinere Messfehler durch die Messapparatur problemlos möglich. Mit geeigneten Messverfahren gelingt es alle Parameter eines bewegten Objekts gleichzeitig genau zu messen. So kann bei der gestoßenen Kugel sowohl der Ort, als auch der jeweilige Impuls und Drehimpuls bestimmt werden ohne, dass die Messung der einen Größe die Genauigkeit der anderen beeinflusst. In der Quantenwelt ist die Sachlage anders. Hier ist es nicht möglich den Ort und den Impuls eines Quantenteilchens, wie beispielsweise eines Elektrons, gleichzeitig genau zu bestimmen, was auch in der Unschärferelation nach Werner Heisenberg Berücksichtigung findet. Je genauer der Ort eines Objekts angegeben werden kann, desto größer wird der Fehler bei der Impulsbestimmung und umgekehrt. Das Produkt aus beiden Fehlern kann einen bestimmten Wert nicht unterschreiten. Bei Ort und Impuls handelt es sich um eines von vielen Paaren abhängiger Größen, die der Heisenbergschen Unschärferelation gehorchen. Ob zwei quantenmechanische Größen voneinander abhängen oder ob sie gleichzeitig scharf messbar sind, kann mathematisch mit Hilfe des Kommutator-Operators bestimmt werden. Wie dies funktioniert, wird in den folgenden Kapiteln näher untersucht.

Nachdem nun bereits zwei wesentliche Unterschiede zwischen dem Messprozess der klassischen Mechanik und der Quantenmechanik untersucht wurden, ist es an der Zeit den quantenmechanischen Messprozess in seiner Gesamtheit genauer nachzuvollziehen. Dafür sollen die Prinzipien und mathematischen Werkzeuge zunächst allgemein untersucht und anschließend jeweils auf den quantenmechanischen harmonischen Oszillator angewendet werden.

Grundlage bildet zunächst ganz allgemein ein quantenmechanisches System, das abstrakt durch den Hilbert-Raum  $\mathcal{H}$  beschrieben wird. Dieser enthält als Elemente alle möglichen Zustände  $|\psi_i\rangle$ , die das System annehmen kann. Vor dem Messvorgang befinde sich das System in einem uns unbekanntem Zustand, der durch den Zustandsvektor  $|\psi\rangle$  repräsentiert werden soll. Alle Vielfachen dieses Elements, also alle Vektoren der Form  $c|\psi\rangle$  mit  $c \in \mathbb{C} \setminus \{0\}$ , beschreiben denselben quantenmechanischen Zustand. Da diese alle die gleichen Eigenschaften charakterisieren, kann ein Beliebiger dieser Vektoren als Repräsentant ausgewählt werden.<sup>59</sup> Um das Rechnen so einfach wie möglich zu gestalten, wird daher schlicht der vorteilhafteste, also der auf eins normierte, Zustandsvektor aus der Schar aller möglicher Vektoren ausgewählt.

---

<sup>59</sup> vgl. Matthias Bartelmann u.a. Theoretische Physik 3 – Quantenmechanik. Berlin 2018, S. 94.

An diesem System soll nun eine Messung durchgeführt werden. Mathematisch wird der Messprozess, beispielsweise eine Energiebestimmung, durch den zugehörigen Operator, in diesem Beispiel den Energieoperator, auch Hamiltonoperator genannt, dargestellt. Bei einem Operator handelt es sich um eine lineare Abbildung, welche den Zustandsvektor aus dem Hilbert-Raum auf ein anderes Element aus dem Hilbert-Raum abbildet. Seine Eigenwerte bestimmen die für das System möglichen Messwerte der betrachteten Observablen. Im Allgemeinen sind die Eigenwerte genau die komplexen Zahlen  $\lambda \in \mathbb{C}$ , welche die Eigenwertgleichung

$$\hat{A} |\psi_\lambda\rangle = \lambda |\psi_\lambda\rangle$$

erfüllen. In dieser Gleichung beschreibt  $\hat{A}$  den zur zu messenden Observable gehörenden Operator,  $\lambda$  einen Eigenwert und  $|\psi_\lambda\rangle$  einen Eigenvektor von  $\hat{A}$ . Auf diese Weise gibt der Operator die möglichen Messwerte der Observablen an. Da als physikalisch sinnvolle Werte allerdings nur reelle Zahlen in Frage kommen, werden spezielle Operatoren benötigt, die ausschließlich reelle Eigenwerte besitzen, die selbstadjungierten Operatoren.

Der Zustand  $|\psi\rangle$ , in dem sich das System vor der Messung befand, entscheidet darüber, wie groß die Wahrscheinlichkeiten für die einzelnen möglichen Messwerte sind. Diese kann mit dem Skalarprodukt wie folgt bestimmt werden.

$$P(\lambda) = |\langle\psi|\psi_\lambda\rangle|^2$$

Durch den Messvorgang wird der Zustand  $|\psi\rangle$  auf den zum Eigenwert  $\lambda$  gehörenden Eigenraum  $\mathcal{H}_\lambda$  projiziert, sodass er sich nach der Messung in dem Eigenzustand befindet, dessen Eigenwert gemessen wurde. Dieser kann als  $|\psi_\lambda\rangle$  bezeichnet werden. Der Zustand des Systems wird also durch den Messprozess verändert. Das genaue Prinzip, das dem Kollaps der Wellenfunktion zu Grunde liegt und das die Messung eines konkreten Wertes an Stelle von Wahrscheinlichkeitsaussage zulässt, ist noch nicht geklärt. Dieses Rätsel gilt es noch zu lösen. Eine Änderung des Zustandes tritt nur dann nicht ein, wenn sich das System vor der Messung bereits in dem Eigenzustand  $|\psi_\lambda\rangle$  befand. Dann lässt sich auch das Resultat der Messung zu hundert Prozent auf den Wert  $\lambda$  vorhersagen.

---

## Beispiel: quantenmechanischer linearer harmonischer Oszillator

---

In diesem Beispiel soll eine Energiemessung am harmonischen Oszillator schematisch beschrieben werden. Dieses System wird nach der mathematischen Beschreibung der Operatoralgebra erneut aufgegriffen und anhand dieser Lösungsmethode untersucht. Hier geht es zunächst nur darum grob das analytische Lösungsprinzip zu beschreiben und die Ergebnisse anzugeben.

Nach obiger Zusammenstellung muss dafür zunächst der Energieoperator, bei dem es sich um den Hamiltonoperator handelt, aufgestellt werden. Dieser setzt sich aus einem Teil für die kinetische Energie und dem Beitrag der potentiellen Energie zusammen. Letztere ist durch das charakteristische quadratische Potential  $V(x) = \frac{1}{2}m\omega^2x^2$  gegeben. Damit hat der Hamiltonoperator folgende Gestalt:

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + \frac{m\omega^2}{2} x^2$$

Um nun die möglichen Energiewerte des harmonischen Oszillators bestimmen zu können, muss die zugehörige Eigenwertgleichung (stationäre Schrödingergleichung) gelöst werden. Diese lautet wie folgt:

$$\hat{H}|\psi\rangle = E_n|\psi\rangle$$

Mit obigem Hamiltonoperator kann direkt folgende Differentialgleichung im Ortsraum aufgestellt werden:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \psi(x) + \frac{m\omega^2}{2} x^2 \psi(x) = E_n \psi(x)$$

Als Lösungen dieser Differentialgleichung lassen sich folgende Eigenwerte

$$E_n = \hbar\omega \left( n + \frac{1}{2} \right) \quad \text{mit } n \in \mathbb{N}_0$$

als mögliche Messwerte für die Energie berechnen. Der Quantenoszillator kann demnach nur diskrete Energiewerte annehmen. Mit dieser Formel lässt sich beispielsweise die Nullpunktsenergie für  $n = 0$  zu  $E_0 = \frac{1}{2} \hbar\omega$  berechnen, die, wie oben angedeutet, von null verschieden ist. Direkt nach dem Messprozess befindet sich das System in dem Eigenzustand, dessen Eigenwert gemessen wurde.<sup>60</sup> Dies lässt sich durch die Schreibweise  $|n\rangle$

---

<sup>60</sup> vgl. Hans Jürgen Korsch. Mathematik der Quantenmechanik, S. 103.

ausdrücken. Wurde also beispielsweise die Nullpunktsenergie  $E_0$  gemessen, so nimmt das System den Zustand  $|0\rangle$  ein. „Falls sich das System bereits vor der Messung in einem Eigenzustand der zu messenden Observablen befand, dann misst man diesen Eigenwert mit Sicherheit, also mit Wahrscheinlichkeit eins.“<sup>61</sup>

---

Zusammenfassend werden für die quantenmechanische Messung folgende mathematische Bestandteile benötigt:

- Operator
- Eigenwert und Eigenvektor
- Projektor

In dieser kurzen Ausführung wurden die Begriffe Operator, Eigenwert und Eigenvektor bereits wie selbstverständlich verwendet. Auch wurde für einen Zustandsvektor anstelle der üblichen Schreibweise  $\psi$  eine andere Notation  $|\psi\rangle$  benutzt. Worum es sich bei diesen mathematischen Objekten genau handelt, soll auf den folgenden Seiten erklärt werden.

#### 4.1 Operatoren

Bei einem Operator  $\hat{A}$  auf einem Hilbert-Raum  $\mathcal{H}$  handelt es sich um eine Abbildung, die jedem Element  $\psi$  aus einem linearen Teilraum  $D_{\hat{A}} \subseteq \mathcal{H}$  ein Element aus dem Hilbertraum  $\mathcal{H}$  zuordnet:

$$\hat{A}: D_{\hat{A}} \rightarrow \mathcal{H}, \quad \psi \mapsto \hat{A}\psi$$

Die Menge  $D_{\hat{A}}$  der Elemente  $\psi$ , auf die der Operator  $\hat{A}$  angewendet werden darf, wird als Definitionsbereich bezeichnet, die Menge aller Bildvektoren  $\hat{A}(D_{\hat{A}}) = W_{\hat{A}}$  als Wertebereich.<sup>62</sup>

---

<sup>61</sup> Hans Jürgen Korsch. Mathematik der Quantenmechanik, S. 103.

<sup>62</sup> vgl. Georg Reents. Einführung in die Funktionalanalysis, S. 8.



Der Ortsoperator beschreibt die Ortsmessung eines Teilchens und bewirkt bei Anwendung auf die Funktion  $\psi$  eine Multiplikation mit dem Ortsvektor  $\vec{x}$ :

$$\hat{x}\psi = \vec{x}\psi^{63}$$

Mit dem Impulsoperator kann der Impuls eines Teilchens gemessen werden. Dieser beschreibt als Abbildung die Differentiation nach  $\vec{x}$  in Form des Gradienten:

$$\hat{p}\psi = \frac{\hbar}{i}\nabla\psi = \frac{\hbar}{i}\begin{pmatrix} \frac{\partial\psi}{\partial x} \\ \frac{\partial\psi}{\partial y} \\ \frac{\partial\psi}{\partial z} \end{pmatrix}$$

Wie oben beim harmonischen Oszillator durchgeführt, lassen sich die Energiewerte eines Systems mit Hilfe des Hamiltonoperators bestimmen. Dieser lautet wie folgt:

$$\hat{H}\psi = \left( \frac{\hat{p}^2}{2m} + V(\hat{x}) \right)\psi$$

Hierbei sind  $\hat{p}$  und  $\hat{x}$  die eben definierten Impuls- und Ortsoperatoren. Die Operatorfunktion  $V(\hat{x})$  beschreibt das Potential des jeweils behandelten Systems. Für den harmonischen Oszillator wurde an dieser Stelle das quadratische Potential  $V(\hat{x}) = \frac{1}{2}k\hat{x}^2$  eingesetzt.

---

Wie im Hilbert-Raum die quantenmechanischen Zustände, können auch Operatoren miteinander addiert und mit einem Skalar multipliziert werden. Diese Rechenoperationen sind auf der Menge der Operatoren für  $\lambda \in \mathbb{C}$ ,  $\psi \in \mathcal{H}$  wie folgt definiert:

Bei der skalaren Multiplikation wird der Operator  $\hat{A}$  mit einem Element aus dem Körper  $K$ , über dem der Hilbert-Raum definiert ist, multipliziert. In diesem Zusammenhang also mit einer komplexen Zahl  $\lambda \in \mathbb{C}$ . Hierdurch entsteht ein neuer Operator  $\lambda\hat{A}$ , der im Falle der Linearität von  $\hat{A}$  ebenfalls linear ist. Dieser angewendet auf einen Vektor  $\psi$  entspricht

---

<sup>63</sup> vgl. Hans Jürgen Korsch. Mathematik der Quantenmechanik, S. 103, S. 80.

der Operation von  $\hat{A}$  auf  $\psi$  und der anschließenden Multiplikation der entstandenen Bildpunkte mit dem Skalar  $\lambda$ :

$$(\lambda\hat{A})(\psi) = \lambda(\hat{A}\psi)^{64}$$

Auch die Summe zweier Operatoren  $\hat{A}$  und  $\hat{B}$  mit den jeweiligen Definitionsbereichen  $D_{\hat{A}}$  bzw.  $D_{\hat{B}}$  kann gebildet werden. Anwendbar ist der so entstandene Operator  $\hat{A} + \hat{B}$  allerdings nur auf die Vektoren, die sowohl im Definitionsbereich von  $\hat{A}$  als auch im Definitionsbereich von  $\hat{B}$  liegen. Es gilt dann:

$$(\hat{A} + \hat{B})\psi = \hat{A}\psi + \hat{B}\psi \quad \text{für alle} \quad \psi \in D_{\hat{A}} \cap D_{\hat{B}} := D_{\hat{A}+\hat{B}}$$

Die eben definierten Verknüpfungen Addition und skalare Multiplikation erfüllen alle unter Kapitel 2.1.3 vorgestellten Vektorraum-Axiome, sodass die Menge der Operatoren auf dem Hilbert-Raum  $\mathcal{H}$  einen Vektorraum über den komplexen Zahlen bildet.

Durch die im Folgenden definierte Multiplikation wird diese Struktur zu einem Vektorraum mit Skalarprodukt erweitert:

Das Produkt zweier Operatoren wird formal durch die Hintereinanderausführung der einzelnen Abbildungen beschrieben. Dafür sollen die Operatoren

$$\hat{A}: D_{\hat{A}} \rightarrow W_{\hat{A}} \quad \text{und} \quad \hat{B}: D_{\hat{B}} \rightarrow W_{\hat{B}}, \quad \text{wobei} \quad D_{\hat{A}}, D_{\hat{B}}, W_{\hat{A}}, W_{\hat{B}} \subseteq \mathcal{H}.$$

behandelt werden. Deren Produkt ist ebenfalls ein Operator auf dem Hilbertraum  $\mathcal{H}$  und wie folgt definiert:

$$\hat{B}\hat{A}: D_{\hat{A}} \rightarrow W_{\hat{A}} \rightarrow W_{\hat{B}} \quad \text{mit} \quad (\hat{B}\hat{A})(\psi) = \hat{B}(\hat{A}\psi)$$

Damit dieses Produkt gebildet werden kann, muss eventuell der Operator  $\hat{A}$  so eingeschränkt werden, dass sein Wertebereich  $W_{\hat{A}}$  im Definitionsbereich  $D_{\hat{B}}$  des Operators  $\hat{B}$  liegt. Würde bei der Anwendung des Operators  $\hat{A}$  auf den Vektor  $\psi$  ein neuer Vektor  $\tilde{\psi} \in \mathcal{H}$  herauskommen, der nicht im Definitionsbereich des Operators  $\hat{B}$  liegt, so könnte  $\hat{B}$  nicht auf  $\tilde{\psi}$  angewendet und die Hinereinanderausführung von  $\hat{A}$  und  $\hat{B}$  nicht vollständig ausgeführt werden. Das Produkt  $\hat{B}\hat{A}$  zweier Operatoren  $\hat{A}$  und  $\hat{B}$  kann also nur dann definiert werden, wenn gilt:  $W_{\hat{A}} \subseteq D_{\hat{B}}$

---

<sup>64</sup> Hans Jürgen Korsch. Mathematik der Quantenmechanik. Hannover 2013, S. 50.

Die Operatormultiplikation ist im Allgemeinen nicht kommutativ. Eine Anwendung der Operatoren  $\hat{A}$  und  $\hat{B}$  in umgekehrter Reihenfolge auf  $\psi$  ergibt in der Regel einen anderen Vektor aus dem Hilbertraum:

$$(\hat{B}\hat{A})(\psi) \text{ stimmt meist nicht mit } (\hat{A}\hat{B})(\psi) \text{ überein.}$$

Dies kann an folgendem anschaulichen Beispiel plausibel gemacht werden.

---

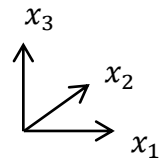
### Beispiel 1 für nicht kommutative Operatoren

---

Über dem Hilbert-Raum  $\mathcal{H} = \mathbb{R}^3$  können die Drehungen eines Quaders um die beiden Achsen  $x_1$  und  $x_3$  als Operationen nach obiger Definition beschrieben werden. Diese seien wie folgt definiert:

$\hat{A} = \text{Drehung um Achse } x_3 \text{ um } 90^\circ$

$\hat{B} = \text{Drehung um Achse } x_1 \text{ um } 90^\circ$



Nun werden diese beiden Operatoren in unterschiedlicher Reihenfolge hintereinander auf einen Quader angewendet und die Resultate miteinander verglichen:

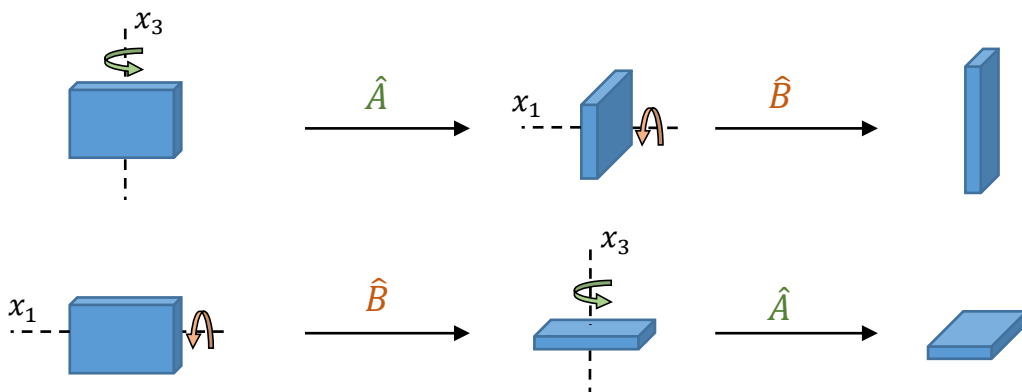


Abb. 15: Veranschaulichung der Rotation eines Quaders<sup>65</sup>

Je nach Reihenfolge der Abbildungen entstehen zwei verschiedene Orientierungen des Quaders im Raum.

---

<sup>65</sup> selbst erstellt.

Das Paradebeispiel nicht kommutativer Abbildungen in der Quantenmechanik stellen der Orts- und der Impulsoperator dar. Werden diese in vertauschter Reihenfolge auf einen Zustand  $\psi$  angewendet, ergeben sich verschiedene Ergebnisse:

- $\hat{p}(\hat{x}(\psi(x))) = \hat{p}(x\psi(x)) = \frac{\hbar}{i} \frac{d}{dx}(x\psi(x)) = \frac{\hbar}{i} \left( \psi(x) + x \frac{d}{dx} \psi(x) \right)$
- $\hat{x}(\hat{p}(\psi)) = \hat{x} \left( \frac{\hbar}{i} \frac{d}{dx} \psi(x) \right) = x \frac{\hbar}{i} \frac{d}{dx} \psi(x)$

Hierbei wurden beide Operatoren im Ortsraum dargestellt.

---

#### 4.1.1 Der Kommutator

Die Rotation des Quaders zeigt, dass die Reihenfolge, in der zwei Abbildungen hintereinander ausgeführt werden, entscheidend für das Resultat sein kann. In der Quantenmechanik liefern der Orts- und der Impulsoperator ein wichtiges Beispiel für nicht vertauschbare Operatoren. Ein Mittel, um zwei Abbildungen  $\hat{A}$  und  $\hat{B}$  auf Kommutativität zu prüfen, bildet der Kommutator, der wie folgt definiert ist:

$$[\hat{A}, \hat{B}] = \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}$$

Dieser ist selbst wieder ein Operator und besitzt folgende Eigenschaften.

$$\hat{A}, \hat{B} \text{ sind kommutativ} \Leftrightarrow [\hat{A}, \hat{B}] = 0$$

$$\text{antisymmetrisch: } [\hat{A}, \hat{B}] = -[\hat{B}, \hat{A}]$$

$$\text{bilinear: } [\hat{A}, \hat{B} + \hat{C}] = [\hat{A}, \hat{B}] + [\hat{A}, \hat{C}]$$

$$[\hat{A}, \lambda\hat{B}] = \lambda[\hat{A}, \hat{B}]$$

$$\text{Jacobi-Identität: } [\hat{A}, [\hat{B}, \hat{C}]] + [\hat{B}, [\hat{C}, \hat{A}]] + [\hat{C}, [\hat{A}, \hat{B}]] = 0$$

$$\text{Produktregel: } [\hat{A}, \hat{B}\hat{C}] = \hat{B}[\hat{A}, \hat{C}] + [\hat{A}, \hat{B}]\hat{C}$$

Einige dieser Rechenregeln werden beispielsweise benötigt, um die Eigenwerte des Drehimpulsoperators zu bestimmen. Dieses Beispiel wird in Kapitel 5 behandelt.

---

### Beispiel für den Kommutator: Orts- und Impulsoperator im Ortsraum

---

Der Kommutator liefert eine einfache Methode, zwei Operatoren auf Kommutativität zu überprüfen. Für den Orts- und den Impulsoperator berechnet er sich wie folgt:

$$[\hat{x}, \hat{p}] = \hat{x}\hat{p} - \hat{p}\hat{x} = x \frac{\hbar}{i} \frac{d}{dx} - \frac{\hbar}{i} \frac{d}{dx} x = -\frac{\hbar}{i} = i\hbar$$

Nach dem gleichen Prinzip kann der Kommutator für sämtliche Kombinationen der Komponenten in drei Dimensionen gestimmt werden:

$$[\hat{x}_j, \hat{p}_k] = i\hbar\delta_{jk}$$

Für gleiche Komponenten ist der Kommutator also von Null verschieden, was die oben nachgewiesene Nichtvertauschbarkeit bestätigt. Verschiedene Komponenten vertauschen allerdings.

---

Die Vertauschbarkeit zweier quantenmechanischer Operatoren und damit auch der Kommutator haben eine wichtige Bedeutung für die Messung der zugehörigen Observablen. Sie entscheiden darüber, ob die zugehörigen Messgrößen gleichzeitig genau gemessen werden können oder nicht. Wie die Unschärferelation von Heisenberg beschreibt, können beispielsweise der Ort und der Impuls eines Quantenobjekts nicht gleichzeitig ohne einen Mindestfehler angegeben werden. Wie oben gezeigt wurde, ist der Kommutator dieser Operatoren nicht null, die Abbildungen also nicht vertauschbar. Der Zusammenhang zwischen Kommutativität und Unschärferelation ist nicht nur für dieses konkrete Beispiel gültig, sondern lässt sich als Gesetzmäßigkeit auf alle Operatoren übertragen. Demnach sind zwei Observablen genau dann gleichzeitig scharf messbar, wenn der Kommutator der zugehörigen Operatoren verschwindet. Woran dies im Genaueren liegt, wird in Kapitel 4.7 näher untersucht. Um diesen Beweis allerdings bewerkstelligen zu können, müssen zunächst weitere mathematische Werkzeuge gesammelt werden. Darunter insbesondere das Konzept von Eigenvektoren und Eigenwerten.

### 4.1.2 Lineare Operatoren

Bei Operatoren auf Hilbert-Räumen handelt es sich jeweils um Abbildungen von einem Hilbert-Raum in sich selbst. Sie sind also insbesondere Abbildungen zwischen Vektorräumen und können daher auf Linearität untersucht werden. Bei einer linearen Abbildung ist es egal, ob der Operator zunächst auf jeden Vektor einzeln angewendet und anschließend die Bildvektoren miteinander addiert werden, oder ob die Addition der Vektoren bereits vor der Abbildung ausgeführt wird. Der entstandene Bildvektor ist bei beiden Verfahren der gleiche. Dasselbe Prinzip gilt auch für die skalare Multiplikation. Die Eigenschaft der Linearität können allerdings nur Abbildungen zwischen zwei Vektorräumen besitzen, die über demselben Körper definiert sind. Diese Voraussetzung ist bei den Operatoren im Hilbert-Raum selbstverständlich gewährleistet.

Ein linearer Operator  $\hat{A}$  auf dem Hilbertraum  $\mathcal{H}$  ist eine Abbildung von dem Definitionsbereich  $D_{\hat{A}} \subseteq \mathcal{H}$  in den Hilbertraum, für welche der Definitionsbereich  $D_{\hat{A}}$  ein linearer Teilraum ist und bei der für alle  $\psi_1, \psi_2, \psi \in D_{\hat{A}}$ ,  $\lambda_1, \lambda_2, \lambda \in \mathbb{C}$  folgende Bedingungen erfüllt sind:

$$\text{Additiv:} \quad \hat{A}(\psi_1 + \psi_2) = \hat{A}\psi_1 + \hat{A}\psi_2$$

$$\text{Homogen:} \quad \hat{A}(\lambda\psi) = \lambda\hat{A}\psi.$$

In der Standard-Quantenmechanik treten nur lineare Operatoren auf, sodass im Folgenden auch nur solche betrachtet werden sollen.

Insbesondere sind auch der Orts-, Impuls- und Hamiltonoperator linear.

### 4.1.3 Überall definite Operatoren

Wie der Name schon andeutet, sind überall definite Operatoren auf dem gesamten Hilbert-Raum definiert. Es gilt also

$$D_{\hat{A}} = \mathcal{H}$$

Somit kann der Operator  $\hat{A}$  auf jedes Element  $\psi$  aus  $\mathcal{H}$  angewendet werden. Diese Eigenschaft wird im Folgenden noch eine wichtige Bedeutung für den quantenmechanischen Messprozess haben. Sie stellt neben anderen Voraussetzungen sicher, dass zu einem Operator auf jeden Fall ein adjungierter Operator existiert und er damit auch selbstadjungiert

sein kann. Und nur genau die selbstadjungierten Operatoren können, dank ihrer besonderen Merkmale, die Beschreibung quantenmechanischer Messprozesse leisten. Es wird sich zeigen, dass auch nicht überall definite Operatoren unter bestimmten Voraussetzungen selbstadjungiert sind und damit ebenfalls Messprozesse darstellen können.

Ob der Ortsoperator überall definit ist, hängt davon ab, auf welchem Hilbert-Raum er definiert ist.

#### 4.1.4 Gleichheit von Operatoren

Zwei Operatoren  $\hat{A}$  und  $\hat{B}$  werden als gleich bezeichnet, wenn deren Definitionsbereiche  $D_{\hat{A}}$  und  $D_{\hat{B}}$  identisch sind, also  $D_{\hat{A}} = D_{\hat{B}} = D$  gilt, und für alle  $\psi \in D$  die Bildvektoren übereinstimmen:

$$\hat{A}\psi = \hat{B}\psi^{66}$$

Sind zwei Operatoren  $\hat{A}$  und  $\hat{B}$  linear, so gilt deren Gleichheit zudem genau dann, wenn sie in allen Erwartungswerten  $\langle \psi | \hat{A}\psi \rangle = \langle \psi | \hat{B}\psi \rangle$  identisch sind.

#### 4.1.5 Beschränktheit von Operatoren

Wird ein Operator  $\hat{A}$  auf ein Element  $\psi$  aus seinem Definitionsbereich  $D_{\hat{A}}$  angewendet, so erzeugt dies einen Vektor  $\hat{A}\psi$  aus dem Hilbert-Raum, also einen Zustand, dessen Norm definiert ist. Daher kann sowohl von  $\psi$ , als auch von  $\hat{A}\psi$  die Norm gebildet und diese miteinander verglichen werden. Ist nun die Norm des Wertebereichs  $\hat{A}$  nach oben beschränkt, also gibt es eine Zahl  $C$ , sodass

$$\|\hat{A}\psi\| \leq C\|\psi\| \quad \text{für alle } \psi \in D_{\hat{A}}$$

erfüllt ist, wird  $\hat{A}$  als beschränkter Operator bezeichnet.<sup>67</sup> In endlich dimensionalen Hilbert-Räumen sind alle linearen Operatoren beschränkt.<sup>68</sup>

<sup>66</sup> vgl. Eckhard Rebhan. Theoretische Physik: Quantenmechanik, S. 256.

<sup>67</sup> vgl. Siegfried Großmann. Funktionalanalysis im Hinblick auf Anwendungen in der Physik, S.110.

<sup>68</sup> vgl. Hans Jürgen Korsch. Mathematik der Quantenmechanik, S. 9.

#### 4.1.6 Stetigkeit von Operatoren

Es sei  $\hat{A}$  ein Operator, der auf dem Definitionsbereich  $D_{\hat{A}}$  definiert ist. Dieser ist an der Stelle  $\varphi \in D_{\hat{A}}$  stetig, wenn für jede Cauchyfolge  $\varphi_n \in D_{\hat{A}}$ , die gegen  $\varphi$  konvergiert folgende Bedingung erfüllt ist:

$$\hat{A}\varphi_n = \hat{A}\varphi$$

Der Operator angewendet auf die Cauchyfolge muss also dasselbe Ergebnis liefern, wie die Anwendung des Operators auf deren Grenzwert. Gilt diese Bedingung für alle Elemente aus dem Definitionsbereich, sprich ist  $\hat{A}$  an jeder Stelle  $\varphi \in D_{\hat{A}}$  stetig, so wird er als stetiger Operator bezeichnet.<sup>69</sup> Bei linearen Operatoren sind die Begriffe Beschränktheit und Stetigkeit gleichwertig. So kann von der Stetigkeit eines linearen Operators unmittelbar auf dessen Beschränktheit geschlossen werden und umgekehrt.

Aus den bisher definierten Eigenschaften kann nun der linear-beschränkte Operator definiert werden. Dieser vereint folgende drei Merkmale in sich:

Der linear-beschränkte Operator ist

- linear
- beschränkt (und damit automatisch stetig)
- überall definit

Er bildet die Grundlage für den Darstellungssatz von Riesz, welcher für einen gegebenen Operator die Existenz eines adjungierten Operators sicherstellt.

#### 4.1.7 Der inverse Operator

Dieser Operator ermöglicht es, eine Abbildung umzukehren und aus dem Bild  $\phi = \hat{A}\varphi$  einer Operationsvorschrift  $\hat{A}$  auf  $D_{\hat{A}}$  das Urbild  $\varphi$  zu erzeugen. Dies ist allerdings nur dann möglich, wenn es genau ein  $\varphi$  gibt, das durch  $\hat{A}$  auf  $\phi$  abgebildet wird. Der inverse Operator  $\hat{A}^{-1}$  bildet dann den Vektor  $\phi$  auf das ursprüngliche Urbild  $\varphi$  ab:

---

<sup>69</sup> vgl. Siegfried Großmann. Funktionalanalysis im Hinblick auf Anwendungen in der Physik, S.111.



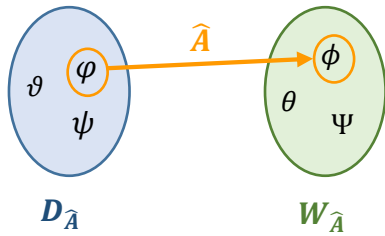


Abb. 16: Ursprünglicher Operator<sup>70</sup>

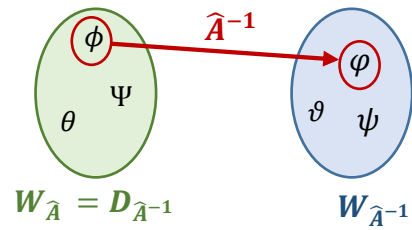


Abb. 17: Inverser Operator<sup>71</sup>

Gibt es allerdings mehrere Elemente  $\varphi_1, \varphi_2$  in  $D_{\hat{A}}$ , die auf das Element  $\phi$  abgebildet werden, dann kann die Umkehrabbildung dem Element  $\phi$  nicht ein eindeutiges Bild zuzuordnen. Die Umkehrabbildung ist dann nicht definiert.

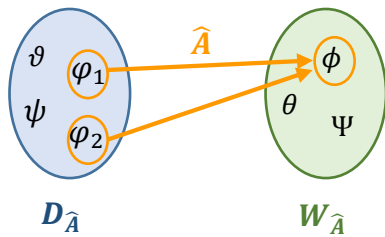


Abb. 18: Ursprünglicher Operator<sup>72</sup>

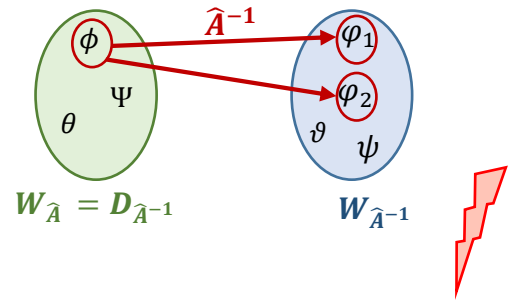


Abb. 19: Inverser Operator existiert nicht<sup>73</sup>

Der Operator  $\hat{A}^{-1}$  ist genau dann der zu  $\hat{A}$  inverse Operator, wenn die Bedingungen

- $D_{\hat{A}^{-1}} := W_{\hat{A}}$  und
- $\hat{A}^{-1}(\hat{A}\varphi) = \varphi$  für alle  $\hat{A}\varphi \in W_{\hat{A}}$

erfüllt sind.<sup>74</sup>

---

### Beispiel: Inverser Operator in der Elektrostatik

---

Das Prinzip der inversen Operation findet auch außerhalb der Quantenmechanik eine häufige Anwendung in der Physik. Dafür soll ein materiefreier Raum betrachtet werden, der von einem sich räumlich verändernden elektrisches Feld  $E(r)$ , erzeugt durch die ruhende

<sup>70</sup> selbst erstellt.

<sup>71</sup> selbst erstellt.

<sup>72</sup> selbst erstellt.

<sup>73</sup> selbst erstellt.

<sup>74</sup> vgl. Siegfried Großmann. Funktionalanalysis im Hinblick auf Anwendungen in der Physik, S.108.

Ladungsverteilung  $\rho(\vec{r})$ , durchsetzt wird. Mit Hilfe der Maxwellgleichungen kann zwischen der Ladung  $\rho(\vec{r})$  und dem Potential  $\varphi(\vec{r})$  folgende Operationsvorschrift aufgestellt werden:

$$\Delta\varphi(\vec{r}) = \sum_{k=1}^n \frac{\partial\varphi(\vec{r})}{\partial r_k} = -4\pi\rho(\vec{r})$$

$$\hat{A}\varphi(\vec{r}) = \rho(\vec{r})$$

Diese ermöglicht es, aus dem gegebenen Potentialverlauf  $\varphi(\vec{r})$  die Ladungsverteilung  $\rho(\vec{r})$  zu bestimmen. Ist man jedoch an der umgekehrten Fragestellung interessiert und möchte aus einer bekannten Ladungsverteilung  $\rho(\vec{r})$  das Feld  $\varphi(\vec{r})$  bestimmen, so ist der zu  $\hat{A}$  inverse Operator von Nöten:

$$\varphi(\vec{r}) = \hat{A}^{-1}\rho$$

In diesem konkreten Beispiel handelt es sich bei dieser inversen Operation um ein geeignetes Integral.<sup>75</sup>

---

#### 4.1.8 Eigenvektor und Eigenwert

Mit diesem Unterkapitel ist einer der Kernpunkte des quantenmechanischen Messprozesses erreicht. Am Beispiel des harmonischen Oszillators wurden die Messwerte der Energie als Eigenwerte des Hamiltonoperators zu den zugehörigen Eigenfunktionen bestimmt. Nun ist es an der Zeit zu untersuchen, worum es sich hierbei mathematisch genau handelt.

Wird ein Operator auf ein Element aus dem Hilbert-Raum angewendet, so bildet er dieses auf einen anderen Vektor aus dem Hilbert-Raum ab, der meist weder in seiner Richtung, noch in seiner Länge mit dem ursprünglichen Vektor übereinstimmt. Nun existieren für einen linearen Operator aber auch ganz besondere Hilbert-Raum-Vektoren, die durch eine Abbildung nicht ihre Richtung, sondern höchstens ihre Länge verändern. Der Operator beschreibt in diesen Fällen also eine einfache Streckung oder Stauchung des Vektors um einen bestimmten Faktor. Vektoren, die diese besondere Eigenschaft erfüllen, werden als Eigenvektoren und die zugehörigen Faktoren als Eigenwerte des Operators bezeichnet.

---

<sup>75</sup> vgl. Siegfried Großmann. Funktionalanalysis im Hinblick auf Anwendungen in der Physik, S.10.

Dementsprechend gibt es auch für die quantenmechanischen Operatoren bestimmte Zustände, welche auf ein  $\lambda$ -faches von sich selbst abgebildet werden. Genau diese möglichen Zahlen, diese  $\lambda$ , sind dann die Eigenwerte, also die möglichen Messwerte des Systems.

Betrachte den linearen Operator  $\hat{A}$  auf dem Hilbert-Raum  $\mathcal{H}$ . Wenn es einen Vektor  $\psi \in \mathcal{H} \setminus \{0\}$  gibt, sodass für ein  $\lambda \in \mathbb{C}$  die Eigenwertgleichung

$$\hat{A}\psi = \lambda\psi$$

erfüllt ist, so wird  $\psi$  als Eigenvektor von  $\hat{A}$  zum Eigenwert  $\lambda$  bezeichnet.

Der Nullvektor muss bei dieser Definition ausgeschlossen werden, da dieser für alle  $\lambda \in \mathbb{C}$  die notwendige Bedingung erfüllt.<sup>76</sup>

---

### Beispiel für Eigenvektoren und Eigenwerte

---

Betrachte die Matrix  $M = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix}$ . Diese beschreibt eine lineare Abbildung vom Vektorraum  $\mathbb{R}^2$  in den Vektorraum  $\mathbb{R}^2$  und besitzt die Eigenwerte  $\lambda_1 = i$  und  $\lambda_2 = -i$ .

Die zugehörigen Eigenvektoren lassen sich zu  $\psi_{\lambda_1} = \begin{pmatrix} 1 \\ i \end{pmatrix}$  und  $\psi_{\lambda_2} = \begin{pmatrix} 1 \\ -i \end{pmatrix}$  berechnen.

Dies kann mit folgender Rechnung nachgeprüft werden:

$$M \cdot \psi_{\lambda_1} = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ i \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} i \\ -1 \end{pmatrix} = i \begin{pmatrix} 1 \\ i \end{pmatrix} = \lambda_1 \cdot \psi_{\lambda_1}$$

$$M \cdot \psi_{\lambda_2} = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ -i \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -i \\ -1 \end{pmatrix} = -i \begin{pmatrix} 1 \\ -i \end{pmatrix} = \lambda_2 \cdot \psi_{\lambda_2}$$

Wird die Matrix  $M$  auf die Eigenvektoren  $\psi_{\lambda_1}$  und  $\psi_{\lambda_2}$  angewendet, so sorgt dies nur für eine Streckung um die Faktoren  $\lambda_1$  bzw.  $\lambda_2$  aber nicht für eine Richtungsänderung der Vektoren.

---

<sup>76</sup> vgl. Hans Jürgen Korsch. Mathematik der Quantenmechanik, S. 62.

Die Menge aller Eigenwerte eines Operators wird als Spektrum bezeichnet. Das Eigenwertspektrum eines quantenmechanischen Operators kann verschiedene Strukturen aufweisen. Es kann entweder diskret, kontinuierlich oder eine Kombination aus beidem sein. Im Folgenden sollen nur rein diskrete Spektren behandelt werden. Dies ist der Fall, wenn alle Eigenvektoren des Operators im Hilbert-Raum liegen. Andernfalls sind die Eigenvektoren keine Elemente des Hilbert-Raumes, da sie nicht quadratintegrabel sind.<sup>77</sup>

Angenommen  $\psi$  ist ein Eigenvektor von  $\hat{A}$  zum Eigenwert  $\lambda$ . Das bedeutet es gibt ein  $\lambda \in \mathbb{C}$  mit  $\hat{A}\psi = \lambda\psi$ . Nun soll untersucht werden, ob ein Vielfaches von  $\psi$ , sprich  $\mu\psi$  mit  $\mu \in \mathbb{C}$ , ebenfalls ein Eigenvektor ist. Mit der oben definierten skalaren Multiplikation für Operatoren lässt sich folgende Gleichung aufstellen:

$$\hat{A}(\mu\psi) = \mu(\hat{A}\psi) = \mu(\lambda\psi) = \lambda(\mu\psi)$$

Diese Rechnung zeigt, dass  $\mu\psi$  sogar zum selben Eigenwert  $\lambda$  ein Eigenvektor ist. Der Eigenwert legt also nicht die Länge des Eigenvektors fest. Da das Skalar  $\mu \in \mathbb{C}$  beliebig gewählt war, können folglich zu einem bestimmten Eigenwert unendlich viele Eigenvektoren gefunden werden. Die eben konstruierten Eigenvektoren der Form  $\mu\psi$  sind allerdings alle linear abhängig. Darüber hinaus ist es möglich, dass zu einem Eigenwert auch mehrere linear unabhängige Eigenvektoren existieren. In diesem Fall heißt der Eigenwert entartet.

Für die Eigenvektoren zu einem Eigenwert ist das Superpositionsprinzip gültig und jede mögliche Linearkombination aus Eigenvektoren bildet wieder einen solchen. Die Menge aller Eigenvektoren zu einem bestimmten Eigenwert plus dem Nullvektor bildet mit der Vektoraddition und der skalaren Multiplikation einen Vektorraum, welcher als Eigenraum bezeichnet wird. Der Eigenraum besteht demnach aus folgender Menge:

$$Eig(\hat{A}, \lambda) = \{\psi | \hat{A}\psi = \lambda\psi\}$$

Der Nullvektor ist selber kein Eigenvektor, allerdings muss er zwingend ein Element des Eigenraumes sein. Er bildet das notwendige neutrale Element bezüglich der Vektoraddition. In der Menge  $Eig(\hat{A}, \lambda)$  ist der Nullvektor per Definition enthalten. Es gilt nämlich:

$$\hat{A}\vec{0} = \vec{0} = \lambda\vec{0} \quad \text{für alle } \lambda \in \mathbb{C}$$

---

<sup>77</sup> vgl. Jan-Markus Schwindt. Tutorium Quantenmechanik, S. 117.

Der Eigenraum ist ein Teilraum des Hilbert-Raumes und wird von den linear unabhängigen Eigenvektoren aufgespannt. Deren Anzahl legt damit die Dimension des Eigenraumes fest und wird als Entartungsgrad bezeichnet. Der Eigenraum zu einem Eigenwert  $\lambda$  besitzt folglich genau dann die Dimension eins, wenn er nicht entartet ist.<sup>78</sup>

Eine Entartung im umgekehrten Sinne ist allerdings nicht möglich: Zu jedem Eigenvektor existiert nur genau ein Eigenwert.

In den letzten Kapiteln wurde erläutert, wann ein Operator linear, beschränkt und überall definit ist, wann zwei Operatoren als gleich bezeichnet werden und, dass es sich bei einem inversen Operator um die passende Umkehrabbildung handelt. Auch wurde behandelt, was die Eigenwerte und Eigenvektoren eines Operators darstellen. Für die mathematische Beschreibung von Messprozessen wird allerdings eine ganz besondere Art von Operatoren benötigt. Der selbstadjungierte Operator. Neben der Linearität spielen bei diesem vor allem die Eigenwerte eine entscheidende Rolle. Um den selbstadjungierten Operator allerdings vollständig klassifizieren zu können, ist es notwendig, etwas weiter auszuholen und einen neuen Raum einzuführen.

## 4.2 Der Dualraum

Eine besondere Art von Operatoren bilden die linearen Funktionale. Dies sind lineare Abbildungen, die einem Element aus einem Vektorraum, der in diesem Fall sogar ein Hilbert-Raum ist, ein Element aus dem zugrundeliegenden Körper, hier also eine komplexe Zahl, zuordnen. Von den bisher definierten Operatoren sind dies somit genau die linearen Abbildungen  $\hat{L}$  über dem Hilbert-Raum  $\mathcal{H}$ , deren Bildraum  $W_{\hat{L}} = \mathbb{C}$  ist. Formal lässt sich dies wie folgt ausdrücken:

$$\hat{L}: D_{\hat{L}} \rightarrow \mathbb{C} \quad \psi \mapsto \hat{L}(\psi)$$

Eine wichtige Unterklasse der linearen Funktionale beschreiben diejenigen, welche überall definit und stetig sind. Sie werden als linear-stetige Funktionale bezeichnet. Die drei hier vereinten Eigenschaften wurden bereits im vorherigen Abschnitt allgemein für Operatoren definiert und lassen sich daher eins zu eins auf Funktionale übertragen.

---

<sup>78</sup> vgl. Gerald Gravert. Quantenmechanik. Wiesbaden 1977, S. 125.

Über der Menge der linear-stetigen Funktionale über dem Hilbert-Raum  $\mathcal{H}$  kann nun ein Vektorraum gebildet werden. Wie im betreffenden Kapitel erläutert, müssen hierfür auf dieser Menge die Verknüpfungen Vektoraddition und skalare Multiplikation definiert werden. Diese wurden bereits für Operatoren allgemein und damit insbesondere auch für Funktionale als spezielle Operatoren wie folgt eingeführt:

$$\text{Skalare Multiplikation: } (\lambda \hat{L})(\psi) = \lambda(\hat{L}\psi)$$

$$\text{Vektoraddition: } (\hat{L}_1 + \hat{L}_2)\psi = \hat{L}_1\psi + \hat{L}_2\psi \text{ für alle } \psi \in D_{\hat{A}+\hat{B}}$$

Es lässt sich nachrechnen, dass mit diesen Verknüpfungen auf der Menge der linear-stetigen Funktionale die Vektorraumaxiome erfüllt werden. Mittels der Abbildungsvorschrift

$$\hat{L}_2\hat{L}_1: D_{\hat{L}_1} \rightarrow W_{\hat{L}_1} \rightarrow W_{\hat{L}_2} \quad \text{mit} \quad (\hat{L}_2\hat{L}_1)(\psi) = \hat{L}_2(\hat{L}_1\psi)$$

kann hierauf zusätzlich ein Skalarprodukt definiert werden. Entstanden ist aus der Menge der linear-stetigen Funktionale über  $\mathcal{H}$  ein Vektorraum mit Skalarprodukt, im Folgenden als  $\mathcal{H}'$  bezeichnet. Die Vorgehensweise erinnert sehr stark an die Definition des Hilbert-Raumes, bei dem es sich bekanntermaßen ebenfalls um einen Vektorraum mit Skalarprodukt handelt.

Ziel dieses Kapitels ist es, nachzuweisen, dass diese beiden Räume sogar isomorph zueinander sind. Zwei Räume werden als isomorph bezeichnet, wenn sie sich in ihrer Struktur absolut gleichen, mathematisch also identisch sind und lediglich die Elemente unterschiedlich benannt werden. Damit dies für diese zwei Räume möglich ist, müssen beide exakt gleich viele Elemente besitzen. Zu jedem Element aus dem Hilbert-Raum muss es also genau ein Element im Vektorraum der linear-stetigen Funktionale geben. Exakt diese Voraussetzung gewährleistet ein wichtiger Satz, der nach dem Mathematiker Friedrich Riesz benannt ist. Der Darstellungssatz von Riesz macht folgende Aussage:

*Aussage:* „Jedes linear-stetige Funktional  $\hat{L}$  über einem Hilbert-Raum  $\mathcal{H}$  ist darstellbar in der Form

$$\hat{L}(\psi) = \langle \varphi | \psi \rangle, \quad \text{für alle} \quad \psi \in \mathcal{H}$$

Dabei ist  $\varphi \in \mathcal{H}$  eindeutig durch das Funktional  $\hat{L}$  bestimmt und  $\|\hat{L}\| = \|\varphi\|$ .<sup>79</sup>

---

<sup>79</sup> Siegfried Großmann. Funktionalanalysis im Hinblick auf Anwendungen in der Physik, S. 140.

*Beweis:* Nach der Definition des Skalarproduktes ist klar, dass  $\langle \varphi | \psi \rangle$  ein überall definites, lineares und stetiges Funktional über  $\mathcal{H}$  ist. Nun soll für ein beliebiges lineares Funktional  $\hat{L}$  ein geeignetes  $\varphi \in \mathcal{H}$  konstruiert werden, sodass der Satz erfüllt ist.

Betrachte hierfür eine Teilmenge  $\mathfrak{S} := \{\phi | \phi \in \mathcal{H}, \hat{L}(\phi) = 0\}$  des Hilbert-Raumes, in der alle  $\phi$  enthalten sind, die  $\hat{L}(\phi) = 0$  erfüllen. Da das Funktional als linear und stetig vorausgesetzt war, muss  $\mathfrak{S}$  sogar einen Teilraum des Hilbert-Raums bilden.

Falls es sich hierbei bereits um den gesamten Raum handelt, also  $\mathfrak{S} = \mathcal{H}$  gilt, dann ist der Satz für  $\varphi = 0$  und  $\hat{L}(\psi) = \langle 0 | \psi \rangle$  erfüllt.

Ist  $\mathfrak{S} \subset \mathcal{H}$ , dann gibt es mindestens einen Vektor  $\alpha \neq 0$ , welcher auf allen Vektoren aus  $\mathfrak{S}$  senkrecht steht. Hierüber können nun Vektoren wie folgt definiert werden:

$$\beta = \hat{L}(\alpha)\psi - \hat{L}(\psi)\alpha \equiv \beta(\alpha, \psi).$$

Aus dieser Konstruktion folgt unmittelbar  $\hat{L}(\beta) = 0$ . Daher liegt  $\beta$  in dem Teilraum  $\mathfrak{S}$  woraus folgt, dass  $\beta \perp \alpha$  also  $\langle \alpha | \beta \rangle = 0 = \hat{L}(\alpha)\langle \alpha | \psi \rangle - \hat{L}(\psi)\langle \alpha | \alpha \rangle$ . Da  $\hat{L}(\alpha) \neq 0$ , kann das gewünschte  $\varphi$  wie folgt passend definiert werden:

$$\varphi := \frac{\overline{\hat{L}(\alpha)}}{\|\alpha\|^2} \alpha$$

Diese Darstellung ist durch ein inneres Produkt eindeutig definiert, denn angenommen es gilt  $\langle \varphi_1 | \psi \rangle = \langle \varphi_2 | \psi \rangle$  dann folgt für alle  $\psi$ :  $\langle \varphi_1 - \varphi_2 | \psi \rangle = 0$ . Also muss gelten  $\varphi_1 - \varphi_2 = 0$ .

Mit der Cauchy-Schwarzschen Ungleichung kann folgende Abschätzung für die Norm des Funktionals getroffen werden:

$$|\hat{L}(\psi)| = |\langle \varphi | \psi \rangle| \leq \|\varphi\| \|\psi\|$$

Es muss sogar  $\|\hat{L}\| = \|\psi\|$  gelten, da in der Cauchy-Schwarzschen Ungleichung das Gleichheitszeichen erreichbar ist. ■

Alle möglichen linear-stetigen Funktionale  $\hat{L}$  über einem Hilbert-Raum  $\mathcal{H}$  sind demnach durch das innere Produkt darstellbar, wodurch jedem Hilbert-Raum-Element eindeutig ein  $\hat{L}$  zugeordnet werden kann.<sup>80</sup> Damit ist die Existenz der Elemente sichergestellt.

Nun ist noch zu begründen, dass die beiden Räume dieselbe Struktur tragen. Das in  $\mathcal{H}$  existierende vollständige Orthonormalsystem  $\{\varphi_i\} \in \mathcal{H}$  erzeugt in  $\mathcal{H}'$  eine duale Basis, sodass die Struktur von  $\mathcal{H}$  eins zu eins auf  $\mathcal{H}'$  übertragen wird. Damit ist die Isomorphie vollständig begründet.

Die linear-stetigen Funktionale über  $\mathcal{H}$  bilden also selbst einen Hilbert-Raum, den zu  $\mathcal{H}$  isomorphen Raum  $\mathcal{H}'$ . Dieser Dualraum bildet die mathematische Grundlage für die Bra-Ket-Notation, eine Darstellungsweise der Quantenmechanik, die der britische Physiker Paul Dirac mit seinem Werk „The Principles of Quantum Mechanics“ aus dem Jahr 1930 verbreitete. Zu Ehren ihres Entwicklers wird sie auch als Dirac-Notation bezeichnet.

Ein Vektor  $\varphi \in \mathcal{H}$  wird bei dieser Schreibweise in der Form

$$|\varphi\rangle$$

dargestellt. Von links durch einen senkrechten Strich und von rechts durch eine spitze Klammer begrenzt, repräsentiert diese Darstellung ein Element aus dem Hilbert-Raum. Um einen konkreten physikalischen Zustand zu charakterisieren, beispielsweise das  $n$ -te Energieniveau des harmonischen Oszillators, wird an Stelle von  $|\varphi_n\rangle$  meist nur der für die Besetzungszahl bzw. das Energieniveau stehende Index in die Klammer geschrieben:  $|n\rangle$

Wie oben mit dem Rieszschen Darstellungssatz bewiesen wurde, existiert zu jedem Hilbert-Raum Element  $|\varphi\rangle$  genau ein linear-stetiges Funktional, also genau ein Vektor  $\langle\varphi| \in \mathcal{H}'$  im Dualraum. Dieses ist entsprechend zu obigem Satz durch folgende Abbildung definiert:

$$\langle\varphi|: \mathcal{H} \rightarrow \mathbb{C}, \quad |\varphi\rangle \mapsto \langle\varphi|\phi\rangle := \langle|\varphi\rangle, |\phi\rangle\rangle$$

---

<sup>80</sup> vgl. Siegfried Großmann. Funktionalanalysis im Hinblick auf Anwendungen in der Physik, S. 141.



Das zum Hilbert-Raum Vektor  $|\varphi\rangle$  zugehörige Dualraum Element  $\langle\varphi|$  wird als adjungierter Vektoren bezeichnet und umgekehrt. Die Notation erfolgt durch ein hochgestelltes Kreuz:

$$\langle\varphi| = |\varphi\rangle^\dagger \quad \Leftrightarrow \quad |\varphi\rangle = \langle\varphi|^\dagger$$

Die gespiegelte Klammer

$$\langle\varphi|$$

stellt also ein Element  $\varphi \in \mathcal{H}'$  aus dem zugehörigen Dualraum, also ein linear-stetiges Funktional, dar. Als Abbildung kann  $\langle\varphi|$  ebenso wie ein Operator  $\hat{A}$  von links auf den Vektor aus dem Hilbert-Raum  $|\phi\rangle$  angewendet werden. Hierdurch entsteht nach obiger Definition eine komplexe Zahl:

$$\langle\varphi||\phi\rangle \equiv \langle\varphi|\phi\rangle = z \in \mathbb{C}$$

Der Klammerschreibweise  $\langle\varphi|\psi\rangle$  für das Skalarprodukt verdankt die Dirac-Notation ihre alternative Bezeichnung „Bra-Ket-Schreibweise“, die in Anlehnung an das englische Wort bracket für ‚Klammer‘ entstanden ist. Die linearen Funktionale  $\langle\varphi|$  aus dem Dualraum werden daher auch als ‚bra‘-Vektoren und die Hilbert-Raum Elemente  $|\psi\rangle$  als ‚ket‘-Vektoren betitelt.

Bei der Notation muss eine wichtige Regel beachtet werden. Der zum Vektor  $|\varphi'\rangle = \lambda|\varphi\rangle$  mit  $\lambda \in \mathbb{C}$  duale Vektor  $\langle\varphi'|$  kann nicht durch  $\lambda\langle\varphi|$  dargestellt werden. Stattdessen muss der komplexe Vorfaktor komplex konjugiert werden:

$$\langle\varphi'| \equiv (\lambda|\varphi\rangle)^\dagger = \bar{\lambda}\langle\varphi|$$

Die folgenden Beispiele sollen dazu dienen, bereits behandelte Rechenregeln in der Dirac-Notation darzustellen und damit den Umgang mit der neuen Schreibweise zu trainieren.

Die Addition und die skalare Multiplikation lassen sich nun wie folgt notieren:

$$\begin{aligned} |\varphi_1\rangle + |\varphi_2\rangle &= |\varphi_1 + \varphi_2\rangle, & \lambda|\varphi\rangle &= |\lambda\varphi\rangle \\ \langle\varphi_1| + \langle\varphi_2| &= \langle\varphi_1 + \varphi_2|, & \bar{\lambda}\langle\varphi| &= \langle\lambda\varphi| \end{aligned}$$

In dieser neuen Notation kann auch die Anwendung eines Operators  $\hat{A}$  auf einen Hilbert-Raum-Vektor  $|\psi\rangle$  verkürzt geschrieben werden. An Stelle von

$$\hat{A}(|\psi\rangle) = |\psi'\rangle$$

wird diese Abbildung durch

$$\hat{A}|\psi\rangle = |\hat{A}\psi\rangle = |\psi'\rangle \in \mathcal{H}$$

dargestellt.

Die Bedingung der Orthonormiertheit, wie sie bei der Definition des vollständigen Orthonormalsystems aufgetaucht ist, kann demnach durch die Gleichung

$$\langle i, j \rangle = \delta_{ij}$$

beschrieben werden, die sowohl die Normierung auf die Länge eins, als auch die orthogonale Orientierung der Vektoren berücksichtigt.

### 4.3 Der adjungierte und der selbstadjungierte Operator

Bereits bei einem oberflächlichen Studium der Quantenmechanik tauchen viele Inhalte auf, die aus klassischer Sicht ungewohnt erscheinen und der eigenen Intuition widersprechen. Um die Bedeutung des adjungierten Operators für den Messprozess nachvollziehen zu können, ist es ausnahmsweise an der Zeit, der eigenen Intuition zu vertrauen und das Wissen aus der klassischen Mechanik anzuwenden.

Dem quantenmechanischen Atommodell zufolge haben die Elektronen keine festen Positionen und kreisen auch nicht auf Bahnen um den Atomkern, wie es Bohr einst postulierte. Stattdessen besitzen sie nach heutigem Kenntnisstand eine ortsabhängige Aufenthaltswahrscheinlichkeit, welche je nach Atomsorte eine andere Form aufweist. Anders als bei der Ortsmessung in der klassischen Mechanik kann hier kein sicherer Wert für den Aufenthaltsort angegeben werden, sondern nur einer von vielen möglichen Messwerten. Eine Gemeinsamkeit zur klassischen Mechanik ist aber dennoch vorhanden. Der Messwert des Ortes muss eine reelle Zahl sein. Diese intuitiv logische Tatsache ist nicht nur auf den Aufenthaltsort eines Elektrons in einem Atom zu beschränken, sondern auf alle messbaren quantenmechanischen Größen zu erweitern. Diese Eigenschaft steht in der klassischen Physik außer Frage. Hier in der Quantenmechanik, im Raum der komplexen

Zustandsvektoren, scheint dies allerdings nicht selbstverständlich. Wie die letzten Kapitel gezeigt haben, werden in der Quantenmechanik die physikalischen Messgrößen mathematisch durch die Eigenwerte der zugehörigen Operatoren beschrieben. Die Eigenwerte des Ortsoperators geben also den möglichen Ort des Teilchens und die Eigenwerte des Impulsoperators den möglichen Impuls des Teilchens wieder. Die Eigenwerte stellen also die möglichen Messwerte der messbaren Größen des Systems dar und müssen daher immer reell sein. Aber genau dies ist der entscheidende Punkt. Der Hilbert-Raum der quantenmechanischen Zustände ist über dem Körper der komplexen Zahlen definiert. Daher haben auch die meisten Operatoren keine reellen, sondern komplexe Eigenwerte, so wie im obigen Beispiel, bei welchem der Operator  $M = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix}$  die Eigenwerte  $i$  und  $-i$  besaß. Dieser Operator käme dementsprechend nicht in Frage, um eine physikalische Observable zu beschreiben. Es gibt allerdings eine bestimmte Art von komplexen Operatoren, die nur reelle Eigenwerte besitzen. Dies sind genau die selbstadjungierten Operatoren, zu denen auch der Orts- und der Impulsoperator zählen. Nur als solche besitzen sie ausschließlich reelle Eigenwerte und können den Ort bzw. den Impuls eines quantenmechanischen Objekts sinnvoll beschreiben.

Um das Geheimnis des selbstadjungierten Operators zu lüften und seine besonderen Merkmale bestimmen zu können, muss zunächst der sogenannte adjungierte Operator behandelt werden.

Bei diesem Operator wird das gleiche Prinzip wie bei der inversen Abbildung angewendet. Es muss bereits ein Operator  $\hat{A}$  gegeben sein, zu dem sein adjungierter Operator definiert werden kann. Und ähnlich wie bei der Inversenbildung existiert nicht zu jedem linearen Operator ein adjungierter, sondern nur zu denjenigen, deren Definitionsbereich bestimmte Anforderungen erfüllt. Der zuvor behandelte Rieszsche Darstellungssatz leistet allerdings schon eine wichtige Existenzaussage, die auch hier genutzt werden kann. Da dieser Satz jedoch nur für linear-beschränkte Operatoren gültig ist, sollen zunächst nur solche behandelt werden. Im Anschluss daran kann das Prinzip auf unbeschränkte und nicht überall definite lineare Operatoren verallgemeinert werden.

Daher sei  $\hat{A}$  zunächst ein linear-beschränkter Operator im Hilbert-Raum  $\mathcal{H}$ . Nun kann für ein festes  $\varphi \in \mathcal{H}$  ein lineares Funktional  $\hat{L}_{\varphi, A}$  wie folgt definiert werden:

$$\hat{L}_{\varphi, A}: \mathcal{H} \rightarrow \mathbb{C}, \quad \psi \mapsto \langle \varphi | \hat{A} \psi \rangle$$

Der Operator  $\hat{A}$  und das innere Produkt  $\langle \varphi | \cdot \rangle$  sind überall in  $\mathcal{H}$  definiert, linear und stetig, also linear-beschränkt. Damit hat auch das eben definierte lineare Funktional  $\hat{L}_{\varphi, A}$  diese Eigenschaften.<sup>81</sup> Der Rieszsche Darstellungssatz sagt nun, dass das linear-stetige Funktional  $\hat{L}_{\varphi, A}(\psi)$  als inneres Produkt dargestellt werden kann. Es existiert also ein eindeutiger Vektor  $\tilde{\varphi} = \tilde{\varphi} \langle \varphi | \hat{A} \rangle$ , welcher folgende Gleichung erfüllt:

$$\langle \varphi | \hat{A} \psi \rangle = \hat{L}_{\varphi, A}(\psi) = \langle \tilde{\varphi} | \psi \rangle \quad \text{für alle } \psi \in \mathcal{H}$$

Der Vektor  $\tilde{\varphi}$  ist für einen festen Operator  $\hat{A}$  eindeutig durch den Vektor  $\varphi$  bestimmt, sodass die Abbildung  $\varphi \rightarrow \tilde{\varphi}$  einen überall definierten Operator im Hilbertraum darstellt. Der so entstandene und von  $\hat{A}$  abhängige Operator wird der adjungierte Operator  $\hat{A}^\dagger$  genannt.<sup>82</sup>

Zusammenfassend lässt sich folgende Aussage treffen:

Ist ein Operator  $\hat{A}$  auf dem Hilbert-Raum  $\mathcal{H}$  linear beschränkt, dann kann ihm ein adjungierter Operator  $\hat{A}^\dagger$  eindeutig wie folgt zugeordnet werden:

$$\langle \varphi | \hat{A} \psi \rangle = \langle \hat{A}^\dagger \varphi | \psi \rangle \quad \text{für alle } \varphi, \psi \in \mathcal{H}^{83}$$

Der zu einem Operator  $\hat{A}$  Adjungierte  $\hat{A}^\dagger$  beschreibt die Operation im Dualraum, die derjenigen von  $\hat{A}$  in  $\mathcal{H}$  entspricht:

$$\hat{A}|\psi\rangle = |\psi'\rangle \Leftrightarrow \langle \psi | \hat{A}^\dagger = \langle \psi' |^{84}$$

Aus dieser Bedingung kann folgender Zusammenhang abgeleitet werden:

$$\langle \varphi | \hat{A}^\dagger | \psi \rangle = \langle \varphi | \hat{A}^\dagger | \psi \rangle = \langle \varphi' | \psi \rangle = \overline{\langle \psi | \varphi' \rangle} = \overline{\langle \psi | \hat{A} \varphi \rangle} = \overline{\langle \psi | \hat{A} | \varphi \rangle}$$

bzw. für den Spezialfall  $\langle \varphi | = |\psi\rangle$ :

$$\langle \psi | \hat{A}^\dagger | \psi \rangle = \overline{\langle \psi | \hat{A} | \psi \rangle}^{85} \quad \text{(Gleichung 4.1)}$$

Stimmt ein linear-beschränkter Operator mit seinem adjungierten Operator überein, so wird er als selbstadjungierter Operator bezeichnet:  $\hat{A}^\dagger = \hat{A}$

<sup>81</sup> vgl. Siegfried Großmann. Funktionalanalysis im Hinblick auf Anwendungen in der Physik, S. 199.

<sup>82</sup> vgl. Siegfried Großmann. Funktionalanalysis im Hinblick auf Anwendungen in der Physik, S. 199 f.

<sup>83</sup> vgl. Siegfried Großmann. Funktionalanalysis im Hinblick auf Anwendungen in der Physik, S. 200.

<sup>84</sup> vgl. Hans Jürgen Korsch. Mathematik der Quantenmechanik, S. 54.

<sup>85</sup> vgl. Hans Jürgen Korsch. Mathematik der Quantenmechanik, S. 54.

Da  $\hat{A}$  und damit auch  $\hat{A}^\dagger$  überall definit sind, stimmen die Definitionsbereiche beider Operatoren vollständig überein. Es gilt:  $D_{\hat{A}} = D_{\hat{A}^\dagger} = \mathcal{H}$ . Der so definierte selbstadjungiert-beschränkte Operator wird verkürzt auch als hermitescher Operator bezeichnet.

Der Rieszsche Darstellungssatz stellt also sicher, dass zu jedem linear-beschränkten Operator  $\hat{A}$  im Hilbert-Raum  $\mathcal{H}$  ein eindeutiger zu  $\hat{A}$  adjungierter Operator  $\hat{A}^\dagger$  existiert. Nun gibt es allerdings auch quantenmechanische Operatoren, die unbeschränkt und nicht überall definit sind. Darunter fällt beispielsweise der Impulsoperator. Auch für diesen kann ein adjungierter Operator gefunden werden, allerdings ist hierfür eine zusätzliche Einschränkung erforderlich.

Wie zuvor kann die Abbildung

$$\hat{L}_{\varphi, \hat{A}}: D_{\hat{A}} \rightarrow \mathbb{C}, \quad \psi \mapsto \langle \varphi | \hat{A} \psi \rangle$$

betrachtet werden, wobei der Operator  $\hat{A}$  nun zwar linear, aber auch unbeschränkt und nur auf einem kleineren Definitionsbereich  $D_{\hat{A}} \subset \mathcal{H}$  definiert sein soll. Dies hat zur Konsequenz, dass das eben definierte Funktional ebenfalls linear, unbeschränkt und nicht überall definit ist. Nun ist es wiederum das Ziel, ein eindeutiges  $\tilde{\varphi}$  zu finden, sodass die Beziehung

$$\langle \varphi | \hat{A} \psi \rangle = \langle \tilde{\varphi} | \psi \rangle \quad \text{für alle } \psi \in D_{\hat{A}}$$

gilt. Da der Operator  $\hat{A}$  nun nicht linear-beschränkt ist, kann der Rieszsche Darstellungssatz nicht angewendet werden. Die Existenz eines solchen  $\tilde{\varphi}$  ist durch die Linearität des Operators  $\hat{A}$  sichergestellt. Daher muss nur noch die Eindeutigkeit bewiesen werden. Angenommen es gibt mehrere  $\tilde{\varphi}_1, \tilde{\varphi}_2$ , welche die Gleichung erfüllen, dann würde gelten:

$$\begin{aligned} \langle \varphi | \hat{A} \psi \rangle &= \langle \tilde{\varphi}_1 | \psi \rangle = \langle \tilde{\varphi}_2 | \psi \rangle && \text{für alle } \psi \in D_{\hat{A}}. \\ \Rightarrow \langle \tilde{\varphi}_1 - \tilde{\varphi}_2 | \psi \rangle &= 0 && \text{für alle } \psi \in D_{\hat{A}}. \end{aligned}$$

Wenn diese Bedingung erfüllt ist, sagt man, dass die Teilmenge  $D_{\hat{A}}$  nicht dicht im Hilbert-Raum  $\mathcal{H}$  liegt. Andersrum formuliert ist das  $\tilde{\varphi}$  genau dann eindeutig bestimmt, wenn der Definitionsbereich des Operators  $\hat{A}$  dicht im Hilbert-Raum liegt, wenn also jeder Punkt des Gesamtraums beliebig genau durch einen Punkt aus der Teilmenge approximiert werden kann.

Zusammenfassend kann nun folgende Bedingung formuliert werden:

Ist  $\hat{A}$  ein linearer, dicht definierter Operator auf  $D_{\hat{A}}$ , so kann diesem durch folgende Gleichung ein adjungierter Operator  $\hat{A}^\dagger$  auf  $D_{\hat{A}^\dagger}$  zugeordnet werden:

$$\langle \hat{A}^\dagger \varphi | \psi \rangle := \langle \varphi | \hat{A} \psi \rangle \quad \text{für alle } \psi \in D_{\hat{A}} \text{ und alle } \varphi \in D_{\hat{A}^\dagger} \text{ }^{86}$$

Fast analog zum linear-beschränkten Operator oben kann nun der selbstadjungierte Operator definiert werden. Allerdings muss nun explizit auf die übereinstimmenden Definitionsbereiche geachtet werden:

Ein linearer, dicht definierter Operator  $\hat{A}$  auf  $D_{\hat{A}}$  heißt selbstadjungiert, wenn

$$D_{\hat{A}} = D_{\hat{A}^\dagger} \quad \text{und} \quad \hat{A} = \hat{A}^\dagger$$

Dies ist der Fall, wenn folgende Bedingung erfüllt ist.

$$\langle \varphi | \hat{A} \psi \rangle = \langle \hat{A} \varphi | \psi \rangle \quad \text{für alle } \varphi, \psi \in D_{\hat{A}} = D_{\hat{A}^\dagger} \text{ }^{87}$$

In der Motivation zum selbstadjungierten Operator wurde die Behauptung aufgestellt, dieser könne nur reelle Eigenwerte besitzen. Nun, da seine Eigenschaften und seine Struktur geklärt sind, kann diese wichtige Aussage bewiesen werden.

*Aussage:* Sei  $\hat{A}$  ein selbstadjungierter Operator auf einem Hilbertraum  $\mathcal{H}$ , dann besitzt  $\hat{A}$  nur reelle Eigenwerte und die Eigenvektoren zu verschiedenen Eigenwerten sind orthogonal.

*Beweis:* Es soll die Eigenwertgleichung  $\hat{A}|\psi\rangle = \lambda|\psi\rangle$  gelten, also  $\lambda$  sei ein Eigenwert zum Eigenvektor  $\psi$  vom hermiteschen Operator  $\hat{A}$ . Nach Gleichung 4.1 gilt dann

$$\langle \psi | \hat{A}^\dagger | \psi \rangle = \overline{\langle \psi | \hat{A} | \psi \rangle}$$

Mit der Bedingung  $\hat{A} = \hat{A}^\dagger$ , da  $\hat{A}$  hermitesch, gilt folgende Umformung:

$$\lambda \langle \psi | \psi \rangle = \langle \psi | \lambda | \psi \rangle = \langle \psi | \hat{A} | \psi \rangle = \overline{\langle \psi | \hat{A}^\dagger | \psi \rangle} = \overline{\langle \psi | \hat{A} | \psi \rangle} = \bar{\lambda} \langle \psi | \psi \rangle$$

<sup>86</sup> vgl. Siegfried Großmann. Funktionalanalysis im Hinblick auf Anwendungen in der Physik, S. 298.

<sup>87</sup> Siegfried Großmann. Funktionalanalysis im Hinblick auf Anwendungen in der Physik, S. 306.

Da für einen Eigenvektor  $\langle \psi | \psi \rangle \neq 0$  gilt, folgt aus dieser Gleichung die behauptete Eigenschaft  $\lambda = \bar{\lambda}$ . Daher ist der Eigenwert  $\lambda$  eine reelle Zahl.

Um die zweite Aussage zu beweisen, soll mit  $\psi'$  ein weiterer Eigenvektor zum Operator  $\hat{A}$  mit dem Eigenwert  $\lambda'$  betrachtet werden. Für diese gilt dann analog:

$$\hat{A}|\psi'\rangle = \lambda'|\psi'\rangle.$$

Insgesamt folgt nun

$$\begin{aligned} \langle \psi | \hat{A} \psi' \rangle &= \langle \psi | \lambda' \psi' \rangle = \lambda' \langle \psi | \psi' \rangle \\ &= \langle \hat{A} \psi | \psi' \rangle = \langle \lambda \psi | \psi' \rangle = \lambda \langle \psi | \psi' \rangle \end{aligned}$$

Die Gleichung  $\lambda' \langle \psi | \psi' \rangle = \lambda \langle \psi | \psi' \rangle$  kann wegen  $\lambda \neq \lambda'$  nur genau dann erfüllt sein, wenn  $\langle \psi' | \psi \rangle = 0$ , sprich, wenn die beiden Eigenvektoren zu verschiedenen Eigenwerten orthogonal sind.<sup>88</sup>

Die selbstadjungierten Operatoren, wie beispielsweise Orts-, Impuls-, Spin- oder Drehimpulsoperator, liefern als Eigenwerte die möglichen Messwerte des Systems für den Ort, Impuls, Spin bzw. den Drehimpuls. Die Eigenwerte geben demnach entscheidende Informationen über das System. Nun ist es an der Zeit, auch die zugehörigen Eigenvektoren genauer zu untersuchen. Dafür gilt es, die Erkenntnis der eben bewiesenen Aussage mit den Informationen aus dem Kapitel über vollständige Orthonormalsysteme und dem Wissen über Eigenvektoren miteinander zu verknüpfen und neue Schlussfolgerungen zu ziehen. Der folgende Abschnitt ist allerdings nur für selbstadjungierte Operatoren gültig, da nur hier die orthogonale Orientierung der Eigenvektoren zu verschiedenen Eigenwerten sichergestellt ist.

Zu einem bestimmten Eigenwert  $\lambda$  gibt es unendlich viele verschiedene linear abhängige Eigenvektoren, die durch die Vielfachen  $\mu |\psi_\lambda\rangle$  beschrieben werden können. Daher ist insbesondere auch der auf Eins normierte Vektor  $|\psi_\lambda\rangle$  ein solcher Eigenvektor. Nach der eben bewiesenen Aussage stehen die Eigenvektoren zu verschiedenen Eigenwerten  $\lambda_i$  orthogonal zueinander. Daher bilden die auf eins normierten Eigenvektoren  $|\psi_{\lambda_i}\rangle$  ein Orthonormalsystem. Gibt es nun zu einem selbstadjungierten Operator so viele verschiedene Eigenwerte, wie die Dimension des Hilbert-Raums ist, dann bilden die zugehörigen Eigenvektoren ein vollständiges Orthonormalsystem dieses Raumes. Aber auch wenn es

---

<sup>88</sup> vgl. Hans Jürgen Korsch. Mathematik der Quantenmechanik, S. 65.

weniger Eigenwerte gibt, kann aus den Eigenvektoren eine solche Basis gebildet werden. Dann wird das Orthonormalsystem noch durch die linear unabhängigen Eigenvektoren von entarteten Eigenwerten ergänzt. Da diese in der Regel nicht orthogonal zueinander stehen, muss hier zunächst ein Trick angewendet werden. Dank des Superpositionsprinzips entsteht durch Linearkombination zweier Eigenvektoren  $|\lambda\rangle, |\lambda'\rangle$  zum selben Eigenwert  $\lambda$  wieder ein solcher. Wird diese geschickt gebildet, so kann daraus ein neuer Eigenvektor  $|\lambda''\rangle$  konstruiert werden, welcher orthogonal zum Vektor  $|\lambda\rangle$  steht. Diese Vorgehensweise lässt sich nun für alle entarteten Eigenwerte so oft wiederholen, bis die Dimension des Hilbert-Raumes erreicht ist und ein vollständiges Orthonormalsystem, die sogenannte Eigenbasis, gebildet wurde. Jeder Vektor aus dem Hilbert-Raum kann als Linearkombination der hierin enthaltenen Eigenvektoren  $|\psi_i\rangle$  entwickelt werden.

$$|\psi\rangle = \sum \langle \psi_i | \psi \rangle |\psi_i\rangle$$

Diese Aussage liefert wichtige Erkenntnisse für die Physik. Jeder für das Quantensystem mögliche Zustand kann als Linearkombination aus den Eigenzuständen zu einem selbstadjungierten Operator gebildet werden. Denn dessen Eigenvektoren bilden ein vollständiges Orthonormalsystem des Hilbert-Raumes.

#### 4.4 Der Projektor

Nachdem bisher die mathematischen Prinzipien von Operator und Eigenwertgleichung behandelt wurden, kann nun der dritte wesentliche Bestandteil des Messprozesses untersucht werden. Dieser besteht darin, dass der ursprüngliche Zustand auf den zugehörigen Eigenzustand projiziert wird, sofern sich das System nicht bereits in diesem befunden hat. Das Prinzip dieser Projektion kann in gewisser Weise alltagssprachlich interpretieren. Scheint die Sonne auf einen in der Erde steckenden Stab  $l$ , so kann auf dem Boden ein Schatten betrachtet werden. Der Stab wird im dreidimensionalen Raum, mathematisch der Vektorraum  $\mathbb{R}^3$ , auf die zweidimensionale Ebene (der Vektorraum  $\mathbb{R}^2$ ) projiziert. Nachstehende Skizze soll dies veranschaulichen.



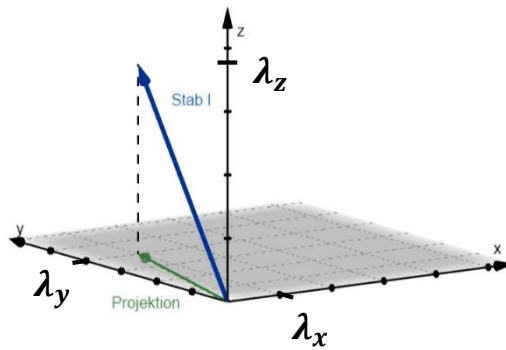


Abb. 20: Projektion eines Stabes in die x-y-Ebene<sup>89</sup>

Bei dem Stab  $l$  handelt es sich mathematisch um einen Vektor  $|l\rangle$  im dreidimensionalen Raum  $\mathbb{R}^3$ , der als Linearkombination der Basisvektoren der Standardbasis  $\{|x\rangle, |y\rangle, |z\rangle\}$  entwickelt werden kann:

$$|l\rangle = \lambda_x |x\rangle + \lambda_y |y\rangle + \lambda_z |z\rangle$$

Bei einer Projektion auf die x-y-Ebene werden diese beiden Komponenten beibehalten und die z-Komponente auf null gesetzt:

$$|l_{xy}\rangle = \lambda_x |x\rangle + \lambda_y |y\rangle$$

Der so entstandene Vektor ist der Bildvektor, welcher bei der Projektion von  $|l\rangle$  auf die x-y-Ebene entsteht. Dabei berechnen sich  $\lambda_x$  und  $\lambda_y$  durch das Skalarprodukt von  $|l\rangle$  mit den Basisvektoren  $|x\rangle$  bzw.  $|y\rangle$ . Der Projektor ist der Operator, der die Abbildung des Vektors  $|l\rangle$  auf die Ebene beschreibt. Für diesen gilt demnach:

$$\begin{aligned} \hat{P} |l\rangle &= |x\rangle\langle x|l\rangle + |y\rangle\langle y|l\rangle \\ \Rightarrow \hat{P} &= |x\rangle\langle x| + |y\rangle\langle y| \end{aligned}$$

Nach diesem konkreten Beispiel soll der allgemeine Fall eines Projektionsoperators betrachtet werden. Dafür sei  $\mathcal{H}$  wie gewohnt ein Hilbert-Raum. Als solcher besitzt er ein vollständiges Orthonormalsystem

$$\{|n\rangle, n \in \mathcal{N}\} \quad \text{mit} \quad \langle n|m\rangle = 0 \quad \text{und} \quad \|n\| = 1$$

Dieses kann aus Eigenvektoren eines selbstadjungierten Operators oder aus beliebigen orthonormierten Vektoren bestehen. Jeder Zustandsvektor  $|\psi\rangle \in \mathcal{H}$  kann als Linearkombination dieser Basis dargestellt werden:

<sup>89</sup> selbst erstellt.

$$|\psi\rangle = \sum_n a_i |n\rangle$$

Der Entwicklungskoeffizient  $a_i$  lässt sich mit Hilfe des Skalarprodukts bilden:

$$a_i = \langle n|\psi\rangle$$

Damit kann der Zustandsvektor  $|\psi\rangle$  wie folgt dargestellt werden:

$$|\psi\rangle = \sum_n a_i |n\rangle \sum_n \langle n|\psi\rangle |n\rangle = \sum_n |n\rangle \langle n|\psi\rangle$$

Bei einem Vergleich von der linken Seite, auf der ausführlich geschrieben  $\mathbf{1}|\psi\rangle$  steht, mit der rechten Seite dieser Gleichung, ergibt sich eine neue bedeutsame Schreibweise des Eins-Operators.

$$\hat{\mathbf{1}} = \sum_n |n\rangle \langle n| \quad (\text{Gleichung 4.2})$$

Hierbei ist  $|n\rangle \langle n|$  ein Operator, welcher den Vektor  $|\psi\rangle$  auf den Zustand  $|n\rangle$  projiziert und wird daher Projektor genannt.

$$\hat{P}_n |\psi\rangle = |n\rangle \langle n|\psi\rangle = a_i |n\rangle$$

$$\hat{P}_n = |n\rangle \langle n|^{90}$$

Der Eins-Operator besteht folglich aus der Summe sämtlicher Projektionsoperatoren. Mit diesem kann auf die Vollständigkeitsrelation hergeleitet werden, mit Hilfe derer eine potentielle Basis  $\{|n\rangle\}$  verifiziert werden kann. Hierfür wird der Eins-Operator wie folgt geschickt eingefügt:

$$\langle \varphi|\psi\rangle = \langle \varphi|\hat{\mathbf{1}}|\psi\rangle = \sum_n \langle \varphi|n\rangle \langle n|\psi\rangle$$

Daraus folgt direkt die Vollständigkeitsrelation:

$$\langle \psi|\psi\rangle = \sum_n |\langle n|\psi\rangle|^2$$

---

<sup>90</sup> vgl. Wolfgang Kinzel. Theoretische Physik 1, S. 117 f.

Ist Gleichung 4.2 erfüllt, so ist ebenfalls die Vollständigkeit des Orthonormalsystems  $\{|n\rangle\}$  sichergestellt, weshalb auch diese Gleichung häufig als Vollständigkeitsrelation bezeichnet wird.<sup>91</sup>

Ein Vektor  $|\psi\rangle$  kann aber nicht nur auf einen einzigen Zustand, sondern auf einen gesamten Unterraum  $\mathcal{H}_R$  projiziert werden, so wie es im obigen Beispiel beim Stab der Fall war. Hierfür muss zunächst ein System orthogonaler Vektoren  $\{|r\rangle, r \in I\}$  der Länge eins ausgewählt werden, welche den gesamten Unterraum aufspannen. Der Projektor ist dann wie folgt definiert:

$$\hat{P}_R|\psi\rangle = \sum_r |r\rangle \langle r|\psi\rangle$$

$$\hat{P}_R = \sum_r |r\rangle \langle r|^{92}$$

Hierbei ist zu betonen, dass der Projektor nicht von der speziellen Basis  $\{|r\rangle, r \in I\}$ , sondern ausschließlich vom Unterraum  $R$  abhängt. Wird der Projektor  $\hat{P}_R$  auf ein Element  $\phi_R$  aus dem Unterraum  $R$  angewendet, so wird dieses auf sich selbst abgebildet:

$$\hat{P}_R|\phi_R\rangle = |\phi_R\rangle^{93}$$

Die Projektionsabbildung bewirkt also keine Änderung.

Mit dem Wissen um den Projektionsoperator kann nun besser nachvollzogen werden, was beim quantenmechanischen Messvorgang passiert: Vor der Messung befindet sich das System in irgendeinem Zustand, der eine Überlagerung sämtlicher Eigenzustände darstellt. Es nimmt also gewissermaßen mehrere Zustände gleichzeitig ein. Mathematisch lässt sich dies durch die Linearkombination aus den Eigenvektoren beschreiben.<sup>94</sup> Anschaulich kann dieses Prinzip eindrucksvoll am Doppelspaltexperiment nachvollzogen werden. In einer seiner Durchführungsvariationen werden Photonen immer nur einzeln auf den Doppelspalt geschossen und damit sichergestellt, dass nicht mehrere Photonen miteinander interferieren. Dennoch kann nach einiger Zeit auf dem dahinterliegenden

---

<sup>91</sup> vgl. Jan-Markus Schwindt. Tutorium Quantenmechanik, S.30 f.

<sup>92</sup> vgl. Gerald Grawert. Quantenmechanik, S. 127.

<sup>93</sup> vgl. Gerald Grawert. Quantenmechanik, S. 128.

<sup>94</sup> vgl. Matthias Bartelmann u.a. Theoretische Physik. Heidelberg 2015, S. 800.

Schirm das bekannte Intensitätsmuster beobachtet werden, das sich durch Interferenz einer von Spalt 1 ausgehenden Welle mit einer von Spalt 2 ausgehenden Welle erklären lässt.

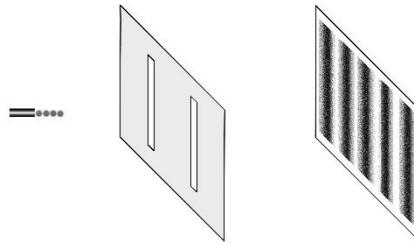


Abb. 21: Doppelspaltexperiment ohne Messung<sup>95</sup>

Das Photon muss also immer gleichzeitig beide Spalte passieren, um anschließend mit sich selbst interferieren zu können.<sup>96</sup> So lautet zumindest die Erklärung dieses Phänomens nach momentanem Wissensstand. Im nächsten Versuchsschritt soll für jedes Photon einzeln gemessen werden, welchen der beiden Spalte es passiert. Dies ist in der Praxis durch geschickte Experimentieranordnungen, wie beispielsweise durch die Positionierung eines Lasers unmittelbar hinter dem Spalt, zu bewerkstelligen. Werden wieder einzelne Photonen in diese Anordnung gebracht, kann genau beobachtet werden, durch welchen der beiden Spalte das Photon fliegt. Allerdings wird nun auf dem Schirm an Stelle eines Interferenzmusters eine klassische Verteilung beobachtet, wie sie beispielsweise beim Werfen mit Farbbällen auf eine solche Anordnung zustande käme.

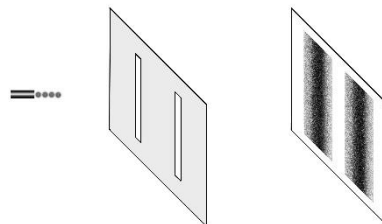


Abb. 22: Doppelspaltexperiment mit Messung des durchdrungenen Spalts<sup>97</sup>

Bevor die Interferenz stattfinden kann, wird das Photon durch den Eingriff in das System dazu gezwungen einen der Eigenzustände einzunehmen und die Überlagerung aufgehoben.<sup>98</sup> Mathematisch kann dieser Prozess, der auch als Kollaps der Wellenfunktion bezeichnet wird, mit dem eben erläuterten Projektionsoperator beschrieben werden.

<sup>95</sup> selbst erstellt.

<sup>96</sup> vgl. Jan-Markus Schwindt. Tutorium Quantenmechanik, S. 326.

<sup>97</sup> selbst erstellt.

<sup>98</sup> vgl. Jan-Markus Schwindt. Tutorium Quantenmechanik, S. 326.

Durch die Messung des Eigenwertes  $\lambda$  wird der ursprüngliche Zustand  $|\psi\rangle$ , sprich die Linearkombination aus Eigenzuständen, auf den zugehörigen Eigenraum  $\mathcal{H}_\lambda$ , ein Unterraum des Hilbert-Raumes, projiziert und befindet sich daher anschließend im zugehörigen Eigenzustand  $|\psi_\lambda\rangle$ . Wie zuvor allgemein erläutert, lässt sich diese Projektion wie folgt beschreiben:

$$\hat{P}_{\psi,\lambda}|\psi\rangle = \langle\psi_\lambda|\psi\rangle|\psi_\lambda\rangle,$$

wobei der Projektor  $\hat{P}_{\psi,\lambda}$  wie folgt definiert ist:

$$\hat{P}_{\psi,\lambda} = |\psi_\lambda\rangle\langle\psi_\lambda|.$$

#### 4.5 Beispiele für quantenmechanische Operatoren

Wie der Impuls-, aber auch der Ortsoperator in den folgenden Beispielen deutlich machen, sind die meisten Operatoren nicht auf dem gesamten Hilbert-Raum definiert. Der Definitionsbereich muss sehr häufig auf eine dichte Teilmenge eingeschränkt werden.

---

##### Beispiel für quantenmechanischen Operator: Der Ortsoperator

---

Dieser Operator wird benötigt, um die Ortsmessung eines Quantenobjekts zu beschreiben.

Zunächst muss ein Hilbert-Raum gewählt werden, auf dem der Operator definiert werden kann. Im Folgenden soll der bereits untersuchte Raum  $\mathcal{L}_2(a, b)$  der quadratsummablen Funktionen die Grundlage bilden, wobei das Intervall entweder endlich von  $a$  bis  $b$  oder beidseitig unendlich gewählt wird.

Die Operationsvorschrift im Ortsraum entspricht der Multiplikation mit  $x$ :

$$(\hat{x}f)(x) := xf(x)$$

- Endliches Intervall

Ist das Intervall  $I = [a, b]$  endlich, so ist der Operator linear, überall definit, beschränkt und selbstadjungiert. Als Definitionsbereich kann somit der gesamte Hilbert-Raum gewählt werden:  $D_{\hat{x}} = \mathcal{L}_2(a, b)$ . Zudem sind die Eigenwerte in jedem Fall reell.

Für beschränkte Funktionen  $f(x)$  in  $\mathcal{L}_2(a, b)$  entspricht dem adjungierten Operator  $\hat{x}^\dagger$  die Multiplikation mit der komplex konjugierten Funktion  $\bar{f}(x)$ :

$$(\hat{x}^\dagger f)(x) = x\bar{f}(x)^{99}$$

- Unendliches Intervall

Ist das Intervall beidseitig unbeschränkt, sprich der Hilbert-Raum ist durch  $\mathcal{L}_2(-\infty, \infty)$  gegeben, so ist der Ortsoperator nicht überall definit und der Definitionsbereich muss eingeschränkt werden:

$$D_{\hat{x}} = \{f | f \in \mathcal{L}_2 \text{ und } xf(x) \in \mathcal{L}_2\}$$

Dieser Definitionsbereich liegt dicht im Hilbert-Raum  $\mathcal{L}_2(-\infty, \infty)$ , sodass der Multiplikationsoperator auch in diesem Fall selbstadjungiert ist. Der adjungierte Operator  $x'$  stimmt mit dem ursprünglichen Ortsoperator  $x$  überein.<sup>100</sup> Der Ortsoperator ist auf diesem Hilbert-Raum zudem ebenfalls linear aber nicht beschränkt und daher nirgends stetig.

Sowohl für das endliche Intervall  $[a, b]$ , als auch für das unendliche Intervall  $(-\infty, \infty)$  ist das Spektrum des Multiplikationsoperators  $\hat{x}$  nicht-diskret, sondern erstreckt sich rein stetig über das gesamte Intervall.

### Beispiel: Der Impulsoperator

Bei diesem für die Impulsmessung zuständigen Operator handelt es sich um einen Differentiationsoperator, der im Ortsraum folgender Operationsvorschrift genügt:

$$\hat{p}(f(x)) := \frac{1}{i} \frac{d}{dx} f(x)$$

Dieser Operator soll zunächst im Hilbert-Raum  $\mathcal{L}_2(0, b)$  untersucht werden. Der Definitionsbereich muss so eingeschränkt werden, dass die Ableitung  $\frac{d}{dx} f(x)$  fast überall gebildet werden kann und die Bildfunktion wieder in  $\mathcal{L}_2(0, b)$  liegt und damit quadratsummabel ist. Diese Bedingungen sind erfüllt, wenn die Funktion  $f(x)$  absolut stetig ist und  $f'$  in  $\mathcal{L}_2$  liegt.

<sup>99</sup> vgl. Siegfried Großmann. Funktionalanalysis im Hinblick auf Anwendungen in der Physik, S. 201.

<sup>100</sup> vgl. Siegfried Großmann. Funktionalanalysis im Hinblick auf Anwendungen in der Physik, S. 315.

Der maximale Definitionsbereich kann nun folgendermaßen angegeben werden:

$$D_p = \{f | f \in \mathcal{L}_2(0, b), f \text{ absolut stetig}, f' \in \mathcal{L}_2(0, b)\} \subseteq \mathcal{L}_2(0, b)$$

Der so definierte Operator ist linear, aber nicht beschränkt und damit nirgends stetig.

Die Unbeschränktheit kann mit Hilfe der Folge  $f_n = \frac{1}{\sqrt{b}} e^{2\pi i \frac{x}{b} n} \in D_p$  nachgewiesen werden, welche im geforderten Definitionsbereich liegt. Nun sollen zunächst die Ableitung und anschließend die Konvergenz der Norm untersucht werden:

$$\frac{d}{dx} f_n = \frac{1}{\sqrt{b}} e^{2\pi i \frac{x}{b} n} \left(2\pi i \frac{1}{b} n\right)$$

$$\begin{aligned} \left\| \frac{d}{dx} f_n \right\| &= \sqrt{\left( \frac{1}{\sqrt{b}} e^{2\pi i \frac{x}{b} n} \left(2\pi i \frac{1}{b} n\right) \right) \cdot \overline{\left( \frac{1}{\sqrt{b}} e^{2\pi i \frac{x}{b} n} \left(2\pi i \frac{1}{b} n\right) \right)}} \\ &= \sqrt{\left( \frac{1}{\sqrt{b}} e^{2\pi i \frac{x}{b} n} \left(2\pi i \frac{1}{b} n\right) \right) \cdot \overline{\left( \frac{1}{\sqrt{b}} e^{-2\pi i \frac{x}{b} n} \left(-2\pi i \frac{1}{b} n\right) \right)}} = \sqrt{\frac{1}{b} \left(\frac{2\pi n}{b}\right)^2} \\ &= \frac{2\pi}{b^2} n \end{aligned}$$

Nun kann der Grenzwert untersucht werden:

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \left\| \frac{d}{dx} f_n \right\| = \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{2\pi}{b^2} n = \infty$$

Dies beweist die Unbeschränktheit des Operators. Der Definitionsbereich liegt allerdings dicht im Hilbert-Raum, sodass ein adjungierter Operator existiert. Er ist jedoch nicht selbstadjungiert und kann daher auf diese Weise keine physikalische Messung repräsentieren. Um dies dennoch auf einem endlichen Intervall zu ermöglichen, kann der Operator zu einem selbstadjungierten Operator erweitert werden. Wie genau das funktioniert soll hier jedoch nicht weiter thematisiert werden.<sup>101</sup>

---

<sup>101</sup> vgl. Siegfried Großmann. Funktionalanalysis im Hinblick auf Anwendungen in der Physik, S. 119 f.

- Der Impulsoperator in  $\mathcal{L}_2(-\infty, \infty)$

Auf dem Definitionsbereich  $D_p = \{f | f, f' \in \mathcal{L}_2\}$  ist die Operationsvorschrift  $\hat{p} = i \frac{d}{dx}$  linear, dicht definiert, unbeschränkt und selbstadjungiert. Die Eigenwerte sind folglich alle reelle Zahlen. Ebenso wie beim Ortsoperator ist das Eigenwertspektrum rein kontinuierlich und erstreckt sich über die gesamte reelle Achse.<sup>102</sup>

Neben dem Orts- und dem Impulsoperator sind der Hamilton-, der Drehimpuls- sowie der Spinoperator die häufigsten Abbildungen in der Quantenmechanik. Bei der Fortsetzung der exemplarischen Untersuchung des harmonischen Oszillators werden mit dem Auf- und dem Absteigeoperator noch zwei weitere besondere Operatoren behandelt.

Beispiel: Auf- und Absteigeoperator im harmonischen Oszillator

Bisher wurde der harmonische Oszillator nur im Ortsraum beschrieben. Durch das Lösen der stationären Schrödingergleichung konnten hierin die Zustandsfunktionen  $|\psi_n\rangle$  und die Energieeigenwerte  $E_n = \hbar\omega(n + \frac{1}{2})$  berechnet werden. Mit Hilfe der Dirac-Notation ist es nun möglich, eine allgemeinere, darstellungsunabhängige Beschreibung des Systems zu entwickeln. Diese wird algebraische Methode genannt.

Dafür soll zunächst erneut der Hamiltonoperator

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{m\omega^2}{2} \hat{x}^2$$

betrachtet werden. An dieser Stelle wird nun ein Trick verwendet, der auch bei anderen quantenmechanischen Problemen, wie beispielsweise bei dem später behandelten Drehimpulsoperator, nützlich ist. Durch die geschickte Definition zweier neuer Operatoren wird der Hamilton-Operator wie folgt umgeschrieben:

$$\hat{H} = \hbar\omega \left( \hat{a}^\dagger \hat{a} + \frac{1}{2} \right) \quad \text{(Gleichung 4.3)}$$

<sup>102</sup> vgl. Siegfried Großmann. Funktionalanalysis im Hinblick auf Anwendungen in der Physik, S. 318.



Der hierbei verwendete Operator  $\hat{a}$  und der dazu adjungierte Operator sind dieserart definiert:

$$\hat{a} = \frac{1}{\sqrt{2\hbar}} \left( \sqrt{m\omega} \hat{x} + \frac{i}{\sqrt{m\omega}} \hat{p} \right)$$

$$\hat{a}^\dagger = \frac{1}{\sqrt{2\hbar}} \left( \sqrt{m\omega} \hat{x} - \frac{i}{\sqrt{m\omega}} \hat{p} \right)$$

Bei der expliziten Ausmultiplikation des Operatorprodukts  $\hat{a}^\dagger \hat{a}$  ist zu erkennen, dass der Summand  $+\frac{1}{2}$  aus einem Beitrag der verallgemeinerten dritten Binomischen Formel stammt, der aufgrund der Nichtvertauschbarkeit der beiden Operatoren nicht verschwindet. Mit dem Kommutator von Orts- und Impulsoperator  $[\hat{x}, \hat{p}] = \hat{x}\hat{p} - \hat{p}\hat{x} = i\hbar$  gilt nämlich:

$$\begin{aligned} \hat{a}^\dagger \hat{a} &= \frac{1}{\sqrt{2\hbar}} \left( \sqrt{m\omega} \hat{x} - \frac{i}{\sqrt{m\omega}} \hat{p} \right) \frac{1}{\sqrt{2\hbar}} \left( \sqrt{m\omega} \hat{x} + \frac{i}{\sqrt{m\omega}} \hat{p} \right) \\ &= \frac{1}{2\hbar} \left( m\omega \hat{x}^2 + \frac{1}{m\omega} \hat{p}^2 + i\hat{x}\hat{p} - i\hat{p}\hat{x} \right) \\ &= \frac{m\omega}{2\hbar} \hat{x}^2 + \frac{1}{2m\omega\hbar} \hat{p}^2 + \frac{i}{2\hbar} [\hat{x}, \hat{p}] = \frac{m\omega}{2\hbar} \hat{x}^2 + \frac{1}{2m\omega\hbar} \hat{p}^2 - \frac{1}{2\hbar} \end{aligned}$$

Dies eingesetzt in Gleichung 4.3 bestätigt obige Behauptung:

$$\begin{aligned} \hat{H} &= \hbar\omega \left( \hat{a}^\dagger \hat{a} + \frac{1}{2} \right) = \hbar\omega \left( \frac{m\omega}{2\hbar} \hat{x}^2 + \frac{1}{2m\omega\hbar} \hat{p}^2 - \frac{1}{2} + \frac{1}{2} \right) = \hbar\omega \left( \frac{m\omega}{2\hbar} \hat{x}^2 + \frac{1}{2m\omega\hbar} \hat{p}^2 \right) \\ &= \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{m\omega^2}{2} \hat{x}^2 \end{aligned}$$

Wie zu Beginn von Kapitel 4.1 erläutert, definiert das Produkt zweier Operatoren selbst wieder einen Operator. Im Fall von  $\hat{a}^\dagger$  und  $\hat{a}$  wird dieser als Besetzungsoperator  $\hat{N} = \hat{a}^\dagger \hat{a}$  bezeichnet. Hiermit kann der Hamilton-Operator zu

$$\hat{H} = \hbar\omega \left( \hat{N} + \frac{1}{2} \right)$$

umgeschrieben und die Eigenwertgleichung

$$\hbar\omega \left( \hat{N} + \frac{1}{2} \right) |\psi\rangle = E |\psi\rangle$$

aufgestellt werden. Bei deren Betrachtung fällt auf, dass die Eigenwerte der Energie  $E_n$  durch die Eigenwerte  $n$  vom Operator  $\hat{N}$  ausgedrückt werden können:

$$E_n = \hbar\omega \left( n + \frac{1}{2} \right)$$

Die Eigenzustände von  $\hat{N}$  stimmen also mit denen von  $\hat{H}$  überein.<sup>103</sup> Sie sollen von nun an durch die verkürzte Schreibweise  $|n\rangle$  dargestellt werden.

Das Ziel der folgenden Beweisschritte besteht darin, die möglichen Eigenwerte  $n$  des Operators  $\hat{N}$  und damit die Energie-Eigenwerte  $E_n$  zu bestimmen. Bei  $n$  handelt es sich um die Besetzungszahl. Sie ist ein Maß für die Anzahl der Energiequanten der Größe  $\Delta E = \hbar\omega$ , die im System gespeichert sind. Dies lässt sich unmittelbar aus der Differenz zweier benachbarter Energieniveaus berechnen:

$$\Delta E = E_{n+1} - E_n = \left( \hbar\omega \left( \frac{1}{2} + n + 1 \right) \right) - \left( \hbar\omega \left( \frac{1}{2} + n \right) \right) = \hbar\omega$$

Der Operator  $\hat{N}$  zählt also die Anzahl der Quanten und gibt sie als Eigenwerte des Zustandes aus.<sup>104</sup>

Der erste Schritt zur Bestimmung der möglichen Werte von  $n$  besteht darin, den Operator  $\hat{N}$  auf den Zustand  $\hat{a}|n\rangle$  anzuwenden. Dafür werden folgende Zusammenhänge benötigt:

$$\begin{aligned} [\hat{a}, \hat{a}^\dagger] &= \hat{a}\hat{a}^\dagger - \hat{a}^\dagger\hat{a} \\ &= \left( \frac{m\omega}{2\hbar} \hat{x}^2 + \frac{1}{2m\omega\hbar} \hat{p}^2 + \frac{1}{2\hbar} \right) - \left( \frac{m\omega}{2\hbar} \hat{x}^2 + \frac{1}{2m\omega\hbar} \hat{p}^2 - \frac{1}{2\hbar} \right) = 1 \end{aligned}$$

Wobei das hier verwendete Produkt  $\hat{a}\hat{a}^\dagger$  nach demselben Prinzip wie zuvor für  $\hat{a}^\dagger\hat{a}$  demonstriert berechnet werden kann. Mit dieser Erkenntnis lässt sich folgern

$$\begin{aligned} [\hat{N}, \hat{a}] &= \hat{N}\hat{a} - \hat{a}\hat{N} = \hat{a}^\dagger\hat{a}\hat{a} - \hat{a}\hat{a}^\dagger\hat{a} = -(\hat{a}\hat{a}^\dagger\hat{a} - \hat{a}^\dagger\hat{a}\hat{a}) = -[\hat{a}, \hat{a}^\dagger]\hat{a} = -\hat{a} \\ \Rightarrow \hat{N}\hat{a} &= -\hat{a} + \hat{a}\hat{N} = \hat{a}(\hat{N} - 1) \\ [\hat{N}, \hat{a}^\dagger] &= \hat{N}\hat{a}^\dagger - \hat{a}^\dagger\hat{N} = \hat{a}^\dagger\hat{a}\hat{a}^\dagger - \hat{a}^\dagger\hat{a}^\dagger\hat{a} = \hat{a}^\dagger[\hat{a}, \hat{a}^\dagger] = \hat{a}^\dagger \\ \Rightarrow \hat{N}\hat{a}^\dagger &= \hat{a}^\dagger + \hat{a}^\dagger\hat{N} = \hat{a}^\dagger(\hat{N} + 1) \end{aligned}$$

<sup>103</sup> vgl. Jan-Markus Schwindt. Tutorium Quantenmechanik, S. 175.

<sup>104</sup> vgl. Wolfgang Kinzel. Skript Theoretische Physik 1, S.113.

Hieraus können nun folgende Eigenwertgleichungen abgeleitet werden:

$$\hat{N}\hat{a}|n\rangle = \hat{a}(\hat{N} - 1)|n\rangle = (n - 1)\hat{a}|n\rangle \quad (\text{Gleichung 4.4})$$

$$\hat{N}\hat{a}^\dagger|n\rangle = \hat{a}^\dagger(\hat{N} + 1)|n\rangle = (n + 1)\hat{a}^\dagger|n\rangle \quad (\text{Gleichung 4.5})$$

Bei  $n$  handelt es sich um den Eigenwert vom Operator  $\hat{N}$  zum Eigenvektor  $|n\rangle$ , womit das jeweils zweite Gleichheitszeichen begründet ist. Gleichung 4.4 liefert folgende Erkenntnis:

$$\hat{a}|n\rangle \text{ Eigenzustand von } \hat{N} \text{ mit Eigenwert } n - 1$$

Der Operator  $\hat{a}$  sorgt also dafür, die Energie des Systems schrittweise zu verringern und bei jeder Anwendung auf den Zustand ein Energiequant zu vernichten.  $\hat{a}|n\rangle$  ist somit proportional zu  $|n - 1\rangle$ :

$$\hat{a}|n\rangle = \mu|n - 1\rangle$$

Aufgrund dieser Eigenschaft wird  $\hat{a}$  als Vernichtungsoperator bezeichnet.

Analog lässt sich Gleichung 4.5 wie folgt interpretieren:

$$\hat{a}^\dagger|n\rangle \text{ Eigenzustand von } \hat{N} \text{ mit Eigenwert } n + 1.$$

Der Operator  $\hat{a}^\dagger$  erhöht die Energie des Systems, indem er ein Energiequant erzeugt.  $\hat{a}^\dagger|n\rangle$  ist proportional zu  $|n + 1\rangle$ :

$$\hat{a}^\dagger|n\rangle = \mu|n + 1\rangle$$

Daher wird  $\hat{a}^\dagger$  als Erzeuger betitelt.

Nun kann untersucht werden, welche Werte für  $n$  in Frage kommen. Da es sich hierbei um ein Maß für die gespeicherte Energie handelt, ist es sinnvoll nur positive Werte zuzulassen. Folgende Rechnung beweist, dass  $n$  tatsächlich nicht negativ werden kann. Sei dafür der Zustand  $|v\rangle := \hat{a}|n\rangle$  definiert. Dann gilt

$$n = \langle n|\hat{N}|n\rangle = \langle n|\hat{a}^\dagger\hat{a}|n\rangle = \langle v|v\rangle \geq 0$$

Das Ungleichheitszeichen stammt von der positiven Definitheit des Skalarproduktes. Die Energie des Systems wird demnach durch wiederholte Anwendung des Vernichters in Einzelschritten immer weiter bis zu einem minimalen  $n$  verringert, das nicht weiter verkleinert werden kann. Es muss also einen Zustand  $|n_0\rangle$  minimaler Energie geben, sodass

die Anwendung des Vernichters hierauf keinen weiteren Zustand ergibt. Hier muss stattdessen gelten  $\hat{a}|n_0\rangle = 0$ .<sup>105</sup> Daraus folgt dann:

$$0 = \|\hat{a}|n_0\rangle\|^2 = \langle n_0|\hat{a}^\dagger\hat{a}|n_0\rangle = \langle n_0|\hat{N}|n_0\rangle = n_0$$

Demnach kommt nur  $|0\rangle$  als Grundzustand des Systems in Frage. Es gibt keinen Zustand geringerer Energie. Mit diesen Informationen kann nun die Grundzustandsenergie berechnet werden:

$$E_0 = \frac{\hbar\omega}{2}$$

Anfangen bei dem Wert  $n = 0$  und durch die schrittweise Erhöhung um eins können die Energieeigenwerte nun wie folgt charakterisiert werden:

$$E_n = \hbar\omega \left( n + \frac{1}{2} \right) \quad \text{mit } n = 0, 1, 2, \dots$$

Graphisch lässt sich das System wie folgt durch äquidistante Energieniveaus veranschaulichen, die in einem parabelförmigen Potential angeordnet sind.

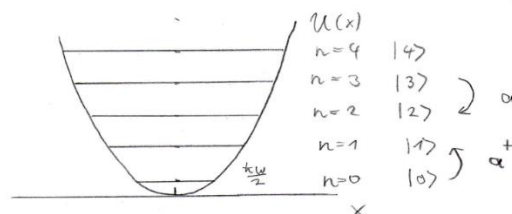


Abb. 23: Energieniveauschema des quantenmechanischen harmonischen Oszillators<sup>106</sup>

Diese Grafik macht plausibel, weshalb der Erzeuger auch als Aufsteigeoperator und der Vernichter als Absteigeoperator bezeichnet werden. Sie sorgen dafür, dass das System in ein höheres Energieniveau aufsteigt, bzw. in ein niedrigeres Niveau absteigt, so wie die Pfeile in der Skizze dies veranschaulichen.

<sup>105</sup> vgl. Jan-Markus Schwindt. Tutorium Quantenmechanik, S. 176.

<sup>106</sup> Wolfgang Kinzel. Skript Theoretische Physik 1. S. 113.

## 4.6 Stochastische Größen beim Messprozess

Mit dem selbstadjungierten Operator wurde das Werkzeug gefunden, mit dem die quantenmechanischen Messgrößen bestimmt werden können. Als Besonderheit der Quantenmechanik gegenüber der klassischen Physik wurde zu Beginn des Kapitels die Unbestimmtheit der Messwerte erwähnt. Dieses Phänomen, einem bestimmten Zustand keinen eindeutigen Wert zuordnen zu können, sondern lediglich eine statistische Verteilung für alle möglichen Messwerte angeben zu können, lässt sich mit dem entwickelten mathematischen Konstrukt aus Eigenwerten und Eigenvektoren beschreiben. Ebenso wie einer quantenmechanischen Observablen nicht genau ein Messwert zugeordnet werden kann, besitzt auch ein Operator im Allgemeinen nicht genau einen Eigenwert. Die Menge aller möglichen Eigenwerte des selbstadjungierten Operators entspricht den möglichen Messwerten für die physikalische Größe. Mit Hilfe von Wahrscheinlichkeit, Erwartungswert und Standardabweichung ist es aber dennoch möglich, mehr Informationen über den Zustand anzugeben.

Unter der Einschränkung, nur diskrete Eigenwertspektren zu betrachten, kann das Prinzip mit einem stochastischen Zufallsexperiment mit diskreter Verteilung, wie beispielsweise dem Würfelwurf mit zwei Würfeln, verglichen werden. In beiden Fällen existiert eine diskrete Menge von Ergebnissen, die mit unterschiedlichen Wahrscheinlichkeiten eintreten können. Beim Würfel sind dies beispielsweise die Zahlen von zwei bis zwölf, also die Summe der geworfenen Würfelaugen, im physikalischen Fall die Messwerte in Form von Eigenwerten. Für die unterschiedlichen Wahrscheinlichkeiten der Quantenzustände sind diverse physikalische Prinzipien, wie beispielsweise die Stabilität, und quantenmechanische Einflüsse wie das Pauli-Prinzip, verantwortlich. Wie groß die Wahrscheinlichkeit für einen bestimmten Eigenwert  $\lambda$  bei der Messung einer Observablen  $\hat{A}$  ist, wird durch den Zustand  $|\psi\rangle$  des Systems festgelegt und kann wie folgt berechnet werden:

$$W_{\hat{A},\psi}(\lambda) = |\langle\psi|\psi_\lambda\rangle|^2$$

Hierbei ist  $|\psi_\lambda\rangle$  der Eigenzustand zum Eigenwert  $\lambda$ .

Könnte eine bestimmte quantenmechanische Messung nun viele Male hintereinander unter exakt denselben Bedingungen durchgeführt werden, wäre die Wahrscheinlichkeitsverteilung jedes Mal identisch.

Wie in der Stochastik kann auch der Erwartungswert bestimmt werden. Dieser beschreibt den Wert, der bei vielen Messungen unter gleichen Bedingungen im Mittel herauskommen würde:

$$\langle \hat{A} \rangle = \frac{\langle \psi | \hat{A} | \psi \rangle}{\langle \psi | \psi \rangle}$$

Die hier beschriebene Division durch die Norm des Zustandsvektors ist nur dann notwendig, wenn der gewählte Repräsentant  $|\psi\rangle$  des Zustandes nicht auf eins normiert gewählt wurde. Andernfalls würde die Norm eins ergeben und die Division keine Veränderung bewirken. Ebenso wie es beim Werfen mit einem Würfel der Fall ist ( $\langle Z \rangle = 3,5$ ), muss der so berechnete Erwartungswert kein tatsächlich möglicher Messwert, d.h. hier kein Eigenwert des Operators, sein. Bei diesem Wert handelt es sich nur um ein mathematisches Konstrukt und nicht um die Vorhersage des tatsächlichen Messergebnisses. Befindet sich das System vor der Messung in einem Eigenzustand, so kann der Erwartungswert analog wie oben berechnet werden. Hier kann das Ergebnis allerdings konkret angegeben werden:

$$\frac{\langle \psi_\lambda | \hat{A} | \psi_\lambda \rangle}{\langle \psi_\lambda | \psi_\lambda \rangle} = \frac{\langle \psi_\lambda | \lambda | \psi_\lambda \rangle}{\langle \psi_\lambda | \psi_\lambda \rangle} = \frac{\lambda \langle \psi_\lambda | \psi_\lambda \rangle}{\langle \psi_\lambda | \psi_\lambda \rangle} = \lambda$$

Dieses Resultat stimmt mit der zuvor getroffenen Aussage überein, dass der Messwert eines Eigenzustandes mit hundertprozentiger Sicherheit vorhergesagt werden kann. Hier wird immer der zugehörige Eigenwert gemessen.

Als Maß für die Streuung der Messwerte um den Erwartungswert werden wie beim Zufallsexperiment die Größen

$$\text{Varianz} \quad (\Delta \hat{A})^2 = \langle \hat{A}^2 \rangle - \langle \hat{A} \rangle^2 \text{ und}$$

$$\text{Unschärfe} \quad \Delta \hat{A} = \sqrt{\Delta^2 \hat{A}} = \sqrt{\langle \hat{A}^2 \rangle - \langle \hat{A} \rangle^2}$$

angegeben. Die Unschärfe wird auch als Fehler des Messwertes bezeichnet und gibt Information darüber, wie genau durch die Messung ein Wert bestimmt werden kann.

#### 4.7 Die Unschärferelation

Im Gegensatz zur klassischen Mechanik können in der Quantenmechanik zwei Größen nur unter bestimmten Bedingungen gleichzeitig scharf gemessen werden. Anderenfalls

können die Observablen nur auf einen Mindestfehler genau angegeben werden. Die Ursache dieser Unschärfe liegt allerdings nicht in begrenzten technischen Möglichkeiten oder in Fehlern der Messapparatur. Stattdessen handelt es sich hierbei um eine immanente Eigenschaft der Quantenmechanik, die selbst bei idealen Messungen zu beobachten wäre und nicht behoben werden kann. In seiner ersten Formulierung der Unschärferelation beschränkte sich der Physiker Werner Heisenberg im Jahr 1927 auf den Zusammenhang zwischen der Orts- und der Impulsunschärfe und erkannte, dass die Bestimmung des Ortes Einfluss auf die Genauigkeit des Impulses nimmt und umgekehrt. Diese Gesetzmäßigkeit wurde schließlich auch für andere Paare von Observablen festgestellt und konnte in folgender allgemeiner Aussage zusammengefasst werden: Für zwei nicht vertauschbare Operatoren  $\hat{A}$  und  $\hat{B}$ , deren Kommutator durch

$$[\hat{A}, \hat{B}] = \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}$$

gegeben ist, kann das Produkt der Unschärfe durch den Erwartungswert der Operatoren wie folgt nach unten beschränkt werden:

$$\Delta\hat{A}\Delta\hat{B} \leq \frac{1}{2} |\langle \hat{A} | \hat{B} \rangle|^{107}$$

Speziell für den Orts- und den Impulsoperator hat dies die nachfolgende Abschätzung zur Folge:

$$\Delta x \Delta p \leq \frac{1}{2} \hbar$$

Verschwindet also der Kommutator zweier Operatoren, so können die zugehörigen Werte gleichzeitig scharf bestimmt werden. Dieser Zusammenhang kann wie folgt plausibel gemacht werden: Wird eine Einzelmessung, repräsentiert durch den Operator  $\hat{A}$ , an einem System durchgeführt, so wird der ursprüngliche Zustand auf einen Eigenzustand  $\psi_0$  dieses Operators projiziert. Soll nun gleichzeitig eine zweite Messung  $\hat{B}$  stattfinden, so muss  $\psi_0$  auch ein Eigenzustand des Operators  $\hat{B}$  sein. Nur wenn beide Operatoren eine gemeinsame Eigenfunktion besitzen, ist eine gleichzeitige fehlerfreie Messung der Observablen möglich. Es müssen also die folgenden Gleichungen gleichzeitig erfüllt sein:

$$\hat{A}|\psi_0\rangle = a|\psi_0\rangle \qquad \hat{B}|\psi_0\rangle = b|\psi_0\rangle$$

---

<sup>107</sup> vgl. Albert Messiah. Quantenmechanik, S. 269.

Hierbei sind  $a$  und  $b$  die Eigenwerte der Operatoren  $\hat{A}$  bzw.  $\hat{B}$  zum zugehörigen Eigenzustand  $|\psi_0\rangle$ .

Aus diesen Zusammenhängen können nun folgende Terme gebildet werden:

$$\begin{aligned} (\hat{A}|\psi_0\rangle) \cdot (\hat{B}|\psi_0\rangle) - (\hat{B}|\psi_0\rangle) \cdot (\hat{A}|\psi_0\rangle) &= (a|\psi_0\rangle) \cdot (b|\psi_0\rangle) - (b|\psi_0\rangle) \cdot (a|\psi_0\rangle) \\ \Leftrightarrow (\hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A})|\psi_0\rangle &= (ab - ba)|\psi_0\rangle \end{aligned}$$

Die Klammer auf der linken Seite entspricht genau dem Kommutator der Operatoren  $\hat{A}$  und  $\hat{B}$ . Auf der rechten Seite stehen in der Klammer nur reelle Zahlen. Da die reellen Zahlen kommutativ bezüglich der Multiplikation sind, gilt  $ab = ba$ . Damit ergibt sich folgende Gleichung:

$$[\hat{A}, \hat{B}]\psi_0 = 0 \psi_0 = 0$$

Zwei quantenmechanische Größen können also nur dann gleichzeitig scharf bestimmt werden, wenn deren Kommutator verschwindet. Dies ist wiederum genau dann der Fall, wenn sie ein vollständiges Orthonormalsystem von gemeinsamen Eigenvektoren besitzen. In diesem Fall handelt es sich um kompatible Variablen.<sup>108</sup>

## 5 Der Drehimpulsoperator

In der klassischen Mechanik ist der Drehimpuls für Drehbewegungen das Pendant zum Impuls für Translationen. Auch in der Quantenmechanik spielt diese Größe eine wichtige Rolle und beschreibt sowohl den Bahndrehimpuls, als auch den Eigendrehimpuls, den sogenannten Spin, eines Teilchens. Obwohl es intuitiv naheliegend ist sich ersteren als kreisförmige Bewegung eines Teilchens um ein festes Zentrum und letzteren als Rotation um die eigene Achse vorzustellen, muss mit diesen klassischen Bildern kritisch umgegangen werden, da sie die Gefahr bergen, Fehlvorstellungen zu implizieren. Wie in dieser Arbeit schon mehrfach betont, berücksichtigen sie weder die Quantisierung der möglichen Zustände noch die Einschränkung, nicht alle Observablen gleichzeitig messen zu können. Diese zwei Prinzipien sind aber auch beim Drehimpuls zu berücksichtigen.

Nach dem Korrespondenzprinzip kann der Drehimpulsoperator  $\hat{L}$  analog zum Vektor des Drehimpulses in der klassischen Physik wie folgt definiert werden:

---

<sup>108</sup> vgl. Albert Messiah. Quantenmechanik 1, S. 181.



$$\hat{L} = \hat{r} \times \hat{p} = \begin{pmatrix} \hat{L}_x \\ \hat{L}_y \\ \hat{L}_z \end{pmatrix}^{109}$$

Der Drehimpulsoperator und die drei Komponenten dieses Vektoroperators sind selbstadjungiert und besitzen daher ausschließlich reelle Eigenwerte.<sup>110</sup> Wie diese Eigenwerte und die zugehörigen Eigenzustände der Operatoren  $\hat{L}^2, \hat{L}_x, \hat{L}_y, \hat{L}_z$  genau aussehen, soll im Folgenden hergeleitet werden.  $\hat{L}^2$  beschreibt den Operator zum Betragsquadrat des Drehimpulses.

Mit Hilfe des Kommutators für Orts- und Impulsoperator

$$[\hat{r}_i, \hat{p}_j] = i\hbar\delta_{i,j} \quad (\text{Gleichung 5.1})$$

kann aus obiger Definition des Drehimpulses der Kommutator für die Vektorkomponenten  $\hat{L}_x, \hat{L}_y$  und  $\hat{L}_z$  hergeleitet werden. Dafür muss im ersten Schritt das Kreuzprodukt komponentenweise berechnet werden:

$$\hat{L}_x = \hat{y}\hat{p}_z - \hat{z}\hat{p}_y, \quad \hat{L}_y = \hat{z}\hat{p}_x - \hat{x}\hat{p}_z, \quad \hat{L}_z = \hat{x}\hat{p}_y - \hat{y}\hat{p}_x$$

Diese Terme können nun in den Kommutator eingesetzt und mit den Rechenregeln aus Kapitel 4.1.1 wie folgt umgeformt werden:

$$\begin{aligned} [\hat{L}_x, \hat{L}_y] &= [\hat{y}\hat{p}_z - \hat{z}\hat{p}_y, \hat{z}\hat{p}_x - \hat{x}\hat{p}_z] = [\hat{y}\hat{p}_z, \hat{z}\hat{p}_x] - [\hat{y}\hat{p}_z, \hat{x}\hat{p}_z] - [\hat{z}\hat{p}_y, \hat{z}\hat{p}_x] + [\hat{z}\hat{p}_y, \hat{x}\hat{p}_z] \\ &= \hat{y}[\hat{p}_z, \hat{z}]\hat{p}_x - 0 - 0 + \hat{x}[\hat{z}, \hat{p}_z]\hat{p}_y = -i\hbar\hat{y}\hat{p}_x + i\hbar\hat{x}\hat{p}_y = i\hbar\hat{L}_z \end{aligned}$$

Mit analoger Rechnung können auch die anderen Kombinationen bestimmt werden.

$$[\hat{L}_y, \hat{L}_z] = i\hbar\hat{L}_x, \quad [\hat{L}_z, \hat{L}_x] = i\hbar\hat{L}_y$$

Werden die Indizes  $x, y, z$  durch die Ziffern 1, 2, 3 ersetzt, kann mit dem Epsilon-Tensor folgende allgemeine Regel aufgestellt werden:

$$[\hat{L}_i, \hat{L}_j] = i\hbar\varepsilon_{ijk}\hat{L}_k^{111}$$

<sup>109</sup> vgl. Wolfgang Kinzel. Skript Theoretische Physik 1, S. 123.

<sup>110</sup> vgl. Jan-Markus Schwindt. Tutorium Quantenmechanik, S. 193.

<sup>111</sup> vgl. Jan-Markus Schwindt. Tutorium Quantenmechanik, S. 191.

Der Epsilon-Tensor ist wie folgt definiert:

$$\varepsilon_{ijk} = \begin{cases} +1, & \text{wenn } (i, j, k) \text{ eine gerade Permutation von } (1, 2, 3) \text{ ist} \\ -1, & \text{wenn } (i, j, k) \text{ eine ungerade Permutation von } (1, 2, 3) \text{ ist} \\ 0, & \text{wenn mindestens zwei Indizes gleich sind} \end{cases}$$

Der Kommutator zweier Drehimpulskomponenten verschwindet demnach, wenn  $\hat{L}_i$  und  $\hat{L}_j$  übereinstimmen. Daher können zwei verschiedene Komponenten nicht gleichzeitig scharf gemessen werden.

Der Operator  $\hat{L}^2$  kommutiert mit allen Komponenten des Drehimpulses, was sich ebenfalls aus Gleichung 5.1 und aus den eben berechneten Kommutatoren ergibt.

$$\begin{aligned} [\hat{L}^2, \hat{L}_x] &= [\hat{L}_x^2, \hat{L}_x] + [\hat{L}_y^2, \hat{L}_x] + [\hat{L}_z^2, \hat{L}_x] \\ &= \hat{L}_x[\hat{L}_x, \hat{L}_x] + [\hat{L}_x, \hat{L}_x]\hat{L}_x + \hat{L}_y[\hat{L}_y, \hat{L}_x] + [\hat{L}_y, \hat{L}_x]\hat{L}_y + \hat{L}_z[\hat{L}_z, \hat{L}_x] + [\hat{L}_z, \hat{L}_x]\hat{L}_z \\ &= 0 + 0 + i\hbar(-\hat{L}_y\hat{L}_z - \hat{L}_z\hat{L}_y + \hat{L}_z\hat{L}_y + \hat{L}_y\hat{L}_z) \\ &= 0 \end{aligned}$$

In gleicher Weise lässt sich dies für die Komponenten  $\hat{L}_y$  und  $\hat{L}_z$  nachweisen.

Zusammenfassend wurden bisher folgende Erkenntnisse gewonnen:

$$[\hat{L}_i, \hat{L}_j] = i\hbar\varepsilon_{ijk}\hat{L}_k$$

$$[\hat{L}^2, \hat{L}_i] = 0$$

Diese beiden Gesetzmäßigkeiten ergeben zusammen, dass der Operator  $\hat{L}^2$  und genau eine der drei Komponenten des Drehimpulses eine gemeinsame Eigenbasis besitzen und damit gleichzeitig scharf bestimmt werden können. Diese Komponente kann prinzipiell frei gewählt werden. In der Wissenschaft hat sich hierfür einheitlich die z-Komponente als Vorzugsrichtung etabliert, welche im Folgenden übernommen werden soll. Eine weitere Komponente, beispielsweise  $\hat{L}_x$ , kann nicht zusätzlich diese Eigenschaft erfüllen, da sie nicht mit  $\hat{L}_z$  vertauscht. Analoges Prinzip gilt für  $\hat{L}_y$ .

Zur Charakterisierung der Eigenzustände werden die beiden Quantenzahlen  $l$  und  $m$  aus folgendem Grund eingeführt. Ähnlich wie der harmonische Oszillator nur die diskreten Energiewerte  $E_n$  annehmen kann, sind für den Drehimpuls und seine z-Komponente nur

ganz bestimmte diskrete Eigenwerte möglich. Diese werden nach festen Regeln durchnummeriert und den zugehörigen Eigenvektoren die entsprechenden laufenden Nummern  $m$  und  $l$  zugeordnet. Die Quantenzahl  $l$  wird auch als Drehimpulsquantenzahl bezeichnet und charakterisiert die Eigenwerte des Drehimpulsoperators. Die magnetische Quantenzahl des Bahndrehimpulses  $m$  beschreibt die  $z$ -Komponente des Drehimpulses.

Mit Hilfe dieser Quantenzahlen kann nun eine Basis  $|lm\rangle$  für den Hilbert-Raum, bestehend aus gemeinsamen Eigenzuständen von  $\hat{L}^2$  und  $\hat{L}_z$ , definiert werden. Ziel ist es nun das Spektrum der möglichen  $(l, m)$ -Kombinationen herzuleiten. Dafür müssen die Eigenwertgleichungen

$$\hat{L}^2|lm\rangle = \hbar^2\lambda|lm\rangle \quad \text{und} \quad \hat{L}_z|lm\rangle = \hbar m|lm\rangle$$

gelöst werden. Hier lässt sich derselbe Trick wie beim harmonischen Oszillator anwenden und die Operatoren Erzeuger  $L_+$  und Vernichter  $L_-$  wie folgt definieren.

$$\hat{L}_+ = \hat{L}_x + i\hat{L}_y, \quad \hat{L}_- = \hat{L}_x - i\hat{L}_y$$

Für diese gelten folgende Kommutator Relationen:

$$[\hat{L}_z, \hat{L}_+] = [\hat{L}_z, \hat{L}_x] + i[\hat{L}_z, \hat{L}_y] = i\hbar(\hat{L}_y - i\hat{L}_x) = \hbar(\hat{L}_x + i\hat{L}_y) = \hbar\hat{L}_+$$

Auf dieselbe Weise lässt sich

$$[\hat{L}_z, \hat{L}_-] = -\hbar\hat{L}_-$$

berechnen. Nun kann der Operator  $\hat{L}_z$  auf den Zustand  $\hat{L}_+|lm\rangle$  angewendet werden.

$$\begin{aligned} \hat{L}_z(\hat{L}_+|lm\rangle) &= ([\hat{L}_z, \hat{L}_+] + \hat{L}_+\hat{L}_z)|lm\rangle = \hbar\hat{L}_+|lm\rangle + \hat{L}_+(\hat{L}_z|lm\rangle) \\ &= \hbar\hat{L}_+|lm\rangle + \hbar m\hat{L}_+|lm\rangle = \hbar(m+1)(\hat{L}_+|lm\rangle) \end{aligned}$$

Analog gilt  $\hat{L}_z(\hat{L}_-|lm\rangle) = \hbar(m-1)(\hat{L}_-|lm\rangle)$

Betrachtet man jeweils nur das erste und das letzte Element der Gleichungen ist festzustellen, dass  $\hat{L}_+|lm\rangle$  bzw.  $\hat{L}_-|lm\rangle$  Eigenzustände von  $\hat{L}_z$  zu den Eigenwerten  $\hbar(m+1)$  bzw.  $\hbar(m-1)$  sind. Der Erzeuger und der Vernichter erhöhen bzw. verringern demnach die Magnetquantenzahl um den Wert eins.<sup>112</sup>

---

<sup>112</sup> vgl. Jan-Markus Schwindt. Tutorium Quantenmechanik, S.194.

Um die Eigenwerte konkret bestimmen zu können, müssen zunächst die Gleichungen

$$\hat{L}_+|lm\rangle = \mu_+|l, m+1\rangle \quad \text{und} \quad \hat{L}_-|lm\rangle = \mu_-|l, m-1\rangle$$

von Auf- und Absteigeoperatoren gelöst werden. Dafür gilt es die Normierungskonstanten  $\mu_+$  und  $\mu_-$  zu berechnen. Hierbei wird der Ausdruck  $\hat{L}_-\hat{L}_+$  auftauchen, der sich wie folgt ausführen lässt:

$$\hat{L}_-\hat{L}_+ = (\hat{L}_x - i\hat{L}_y)(\hat{L}_x + i\hat{L}_y) = \hat{L}_x^2 + \hat{L}_y^2 - i[\hat{L}_y, \hat{L}_x] = \hat{L}^2 - \hat{L}_z^2 - \hbar\hat{L}_z$$

Da der Vernichter der Adjungierte zum Erzeuger ist, gilt:  $\hat{L}_+^\dagger = \hat{L}_-$

Mit diesen zwei Gleichungen kann nun folgender Term gelöst werden:

$$\begin{aligned} \|\hat{L}_+|lm\rangle\|^2 &= (\hat{L}_+|lm\rangle)^\dagger(\hat{L}_+|lm\rangle) = \langle lm|\hat{L}_+^\dagger\hat{L}_+|lm\rangle = \langle lm|\hat{L}_-\hat{L}_+|lm\rangle \\ &= \langle lm|\hat{L}^2 - \hat{L}_z^2 - \hbar\hat{L}_z|lm\rangle = \langle lm|\hbar^2\lambda - \hbar^2m^2 - \hbar^2\hat{L}_z|lm\rangle \\ &= (\hbar^2\lambda - \hbar^2m^2 - \hbar^2\hat{L}_z)\langle lm|lm\rangle = \hbar^2(\lambda - m^2 - m) \\ &= \hbar^2(\lambda - m(m+1)) \end{aligned}$$

$$\Rightarrow \mu_+ = \hbar\sqrt{\lambda - m(m+1)}$$

Nach dem gleichen Schema kann auch die Normierungskonstante

$$\Rightarrow \mu_- = \hbar\sqrt{\lambda - m(m-1)}$$

berechnet werden. Hieraus lassen sich schon wichtige Informationen über den Wertebereich der Quantenzahl  $m$  ableiten. Es kann nämlich folgende Abschätzung gemacht werden:

$$0 \leq \|\hat{L}_x|lm\rangle\|^2 + \|\hat{L}_y|lm\rangle\|^2 = \langle lm|\hat{L}_x^2 + \hat{L}_y^2|lm\rangle = \langle lm|\hat{L}^2 - \hat{L}_z^2|lm\rangle = \hbar^2(\lambda - m^2)$$

Damit diese Ungleichung erfüllt ist, muss  $|m| \leq \sqrt{\lambda}$  gelten. Die Werte von  $m$  sind also nach oben und unten beschränkt. Durch das Anwenden von Erzeuger und Vernichter wird die Magnetquantenzahl allerdings immer um einen Wert erhöht bzw. verringert. Daher müssen bestimmte obere und untere Grenzen  $m_{max}$  und  $m_{min}$  existieren, sodass  $\hat{L}_+$  bzw.  $\hat{L}_-$  angewendet auf die entsprechenden Zustände  $|lm_{max}\rangle$  bzw.  $|lm_{min}\rangle$  die Nullfunktion ergeben.

Dies ist der Fall, wenn folgende Bedingungen erfüllt sind:

$$\hat{L}_+|lm_{max}\rangle = 0 \quad \Leftrightarrow \quad 0 = \|\hat{L}_+|lm_{max}\rangle\|^2 = \hbar^2(\lambda - m_{max}(m_{max} + 1)) \quad (5.2)$$

$$\hat{L}_-|lm_{min}\rangle = 0 \quad \Leftrightarrow \quad 0 = \|\hat{L}_-|lm_{min}\rangle\|^2 = \hbar^2(\lambda - m_{min}(m_{min} - 1)).$$

Die Grenzen werden so gewählt, dass sie mit  $+l$  bzw. mit  $-l$  übereinstimmen. Damit ist bereits die Quantenzahl  $m$  vollständig charakterisiert. Sie läuft in Einserschritten von  $-l$  bis  $+l$ . Für ein festes  $l$  gibt es also  $2l + 1$  verschiedene mögliche Zustände.

Dank der Auf- und Absteigeoperatoren ist bekannt, dass die Differenz zweier magnetischer Quantenzahlen ganzzahlig sein muss. Da es sich bei  $+l$  und  $-l$  ebenfalls um solche handelt, muss auch deren Differenz eine natürliche Zahl sein. Daraus ergibt sich die Bedingung

$$l - (-l) = 2l \in \mathbb{N}_0^{113}$$

Wird die obere Grenze  $m_{max} = l$  in Gleichung 5.2 eingesetzt und diese anschließend nach  $\lambda$  aufgelöst kann folgende Lösung bestimmt werden:

$$\lambda = l(l + 1)$$

Zusammenfassend wurden für die Eigenwerte und Eigenzustände der Operatoren  $\hat{L}^2$  und  $\hat{L}_z$  folgende Regeln gefunden.

$$\hat{L}^2|lm\rangle = \hbar^2 l(l + 1)|lm\rangle \quad \text{mit } l = 0, \frac{1}{2}, 1, \frac{3}{2}, 2, \dots$$

$$\hat{L}_z|lm\rangle = \hbar m|lm\rangle \quad \text{mit } -l \leq m \leq l$$

## 6 Ein kleiner Einblick in die Welt der Quantencomputer

Mit den Abhandlungen über die mathematische Struktur der Quantenmechanik gibt diese Arbeit eine kleine Vorstellung davon, weshalb die Mathematik oft als eigene Sprache bezeichnet wird. Sie ermöglicht es physikalische Phänomene und Theorien sauber zu formulieren und noch so abstrakte Zusammenhänge zu verschriftlichen. Doch wie theoretisch und ungreifbar die Quantenmechanik auch scheinen mag, ihre praktische Relevanz

---

<sup>113</sup> Matthias Bartelmann u.a. Theoretische Physik, S. 905.

ist enorm. Die in der Medizin angewendete Kernspinresonanz basiert ebenso auf quantenmechanischen Phänomenen wie der Laser oder das Elektronenmikroskop. Doch auch außerhalb der Naturwissenschaften trifft dieses Thema seit einigen Jahren zunehmend auf gesteigertes Interesse. Das Ziel von Wissenschaftler aus den Bereichen der Informatik, Physik und Mathematik aber auch von Geheimdiensten und Banken besteht aktuell darin, funktionstüchtige Quantencomputer zu entwickeln und damit bisherige Grenzen in der Datenverarbeitung zu überschreiten. Mit diesen, so lauten auch die Hoffnungen der Investoren, soll es möglich werden größere Datenmengen in kürzerer Zeit zu verarbeiten und dadurch Prozesse durchzuführen, die mit den heute vorhandenen Supercomputern nicht möglich sind. Würde dies gelingen, so könnten heute noch unmögliche Primfaktorzerlegungen sehr großer Zahlen in kurzer Zeit berechnet und damit bisher sicher verschlüsselte Daten enkodiert werden.

Wie der Name Quantencomputer bereits zum Ausdruck bringt, handelt es sich hierbei um einen Rechner, der Algorithmen ausführen und mit Zahlen rechnen kann, dafür aber die Gesetzmäßigkeiten der Quantenphysik ausnutzt.<sup>114</sup> Hier sind im Wesentlichen zwei quantenmechanische Prinzipien von Bedeutung: die Superposition und die Quantenverschränkung.

Bei einem klassischen Computer werden die Informationen in Form von Bits gespeichert. Eine einzige solche minimale Informationseinheit kann entweder die Information 0 oder die Information 1 tragen, was praktisch durch einen geöffneten oder geschlossenen Schalter realisiert werden kann. Erst durch die Aneinanderreihung vieler Bits und die unterschiedlichen Kombinationen aus Nullen und Einsen können vielfältigere Informationen gespeichert werden. Bei einem zwei Bit System sind beispielsweise die vier Kombinationen

00, 10, 01, 11

möglich. Werden drei Bits hintereinander betrachtet, könne bereits die acht Möglichkeiten

000, 001, 010, 100, 011, 110, 101, 111

---

<sup>114</sup> vgl. Max Rauner. Wie funktioniert ein Quantencomputer. Zeit Wissen Nr. 1/2018 in <https://www.zeit.de/zeit-wissen/2018/01/quantencomputer-funktion-technologie-investition/komplettansicht>.

realisiert werden, usw. Mit einem  $n$  Bit System lassen sich demnach genau  $2^n$  verschiedene Kombinationen bilden. Da sich jedes Bit allerdings immer nur in genau einem Zustand befinden kann, wird zu jedem Zeitpunkt immer nur genau eine der  $2^n$  möglichen Binärzahlen dargestellt. Wird nun ein Rechenprozess durchgeführt, so wird der Ausgangszustand durch eine bestimmte Operation in einen neuen Zustand überführt. An diesem kann nun der zweite Rechenschritt ausgeführt werden, der ebenfalls einen neuen Zustand erzeugt. Das Prinzip wird so lange durchgeführt, bis der gesamte Rechenprozess abgeschlossen und ein Endzustand erreicht ist. Da jeweils nur genau eine Binärzahl dargestellt werden kann, müssen sämtliche Rechenprozesse nacheinander durchgeführt werden.

Bei Quantencomputern werden die kleinsten Informationseinheiten als Quantenbits oder auch als Qubits bezeichnet und sind durch besondere quantenphysikalische Eigenschaften charakterisiert. Ein Quantenbit kann sich zusätzlich zu den Basiszuständen  $|0\rangle$  und  $|1\rangle$  für eine gewisse Zeitspanne, die sogenannte Kohärenzzeit, auch in einem Überlagerungszustand der Form

$$\alpha|0\rangle + \beta|1\rangle$$

mit der Normierungsbedingung  $|\alpha|^2 + |\beta|^2 = 1$

befinden. Es kann demnach zwei klassische Zuständen zur selben Zeit annehmen.<sup>115</sup> Noch eindrucksvoller wird die Superposition, wenn nicht nur ein einzelnes Qubit, sondern ein ganzes Register betrachtet wird. Besteht dieses aus  $n$  solchen Informationseinheiten, so sind neben den  $2^n$  verschiedenen Basiszuständen auch Überlagerungszustände aus diesen möglich und das System kann sich während der Kohärenzzeit gleichzeitig in allen  $2^n$  klassischen Zuständen gleichzeitig befinden. Nach dieser Zeitspanne findet die sogenannte Dekohärenz statt und das System geht in einen der klassischen Zustände über.<sup>116</sup>

Bei der Zusammenschließung mehrerer Quantenbits zu einem Register ist noch eine weitere besondere quantenmechanische Eigenschaft zu beobachten. Die sogenannte Quantenverschränkung. Anders als die klassischen Bits, laufen die Prozesse der Qubits in einem Register nicht unabhängig voneinander ab, sondern sie sind miteinander verschränkt. Wird auf ein Qubits im Register Einfluss genommen und sein Zustand geändert, so sorgt die Verschränkung für eine simultane Änderung der anderen Qubits ohne, dass direkt auf

---

<sup>115</sup> Matthias Homeister. Quantum Computing verstehen. Wiesbaden 2018, S. 20.

<sup>116</sup> vgl. Matthias Homeister. Quantum Computing verstehen, S. 254.

diese eingewirkt wird. Daher können mit einer einzigen Rechenoperation alle Zustände des Registers gleichzeitig, statt wie im klassischen Fall nacheinander, berechnet werden. Dank dieser parallelen Rechenschritte wird eine erhebliche Verkürzung der Rechenzeit ermöglicht.<sup>117</sup> Die Beeinflussung der Quantenbits untereinander ist nicht durch klassische Effekte zu erklären und sogar bei tausenden Kilometern Distanz zwischen den Qubits nachzuweisen.<sup>118</sup> Damit auch die quantenmechanische Superposition während eines Rechenprozesses ausgenutzt werden kann, müssen die Rechenschritte innerhalb der Kohärenzzeit stattfinden. Diese Bedingung ist auch in einem der fünf von David DiVincenzo im Jahr 1996 veröffentlichten Kriterien für einen verwertbaren Quantencomputer verankert: Die Kohärenzzeit des Systems muss möglichst lang sein, um möglichst viel Rechenschritte innerhalb dieser Zeitspanne durchführen zu können.<sup>119</sup>

Technisch werden Qubits beispielsweise durch Ionen in verschiedenen Zuständen realisiert, die mit Hilfe von elektrischen Feldern in sogenannten Paul-Fallen fokussiert werden. Befindet sich das Ion im Grundzustand, so entspricht dies dem Zustand  $|0\rangle$ , der angeregte Energiezustand entspricht dem Befehl  $|1\rangle$ . Durch die dosierte Einstrahlung von Laserpulsen kann dem Ion Energie zugeführt und es aus dem Grundzustand in einen angeregten oder einen Superpositionszustand gebracht werden. Nach David DiVincenzo ist es für ein funktionierendes System unerlässlich, die Qubits in einem möglichst reinen Zustand zu präparieren. Nur dann „können [die Wissenschaftler] durch die Länge der Bestrahlung die Wahrscheinlichkeit festlegen, mit der das Ion anschließend im angeregten oder nicht angeregten Zustand gemessen werden kann“<sup>120</sup>. Dies lässt sich an einem konkreten Beispiel plausibel machen. Wird ein Ion im Grundzustand für eine Dauer von zehn Mikrosekunden mit dem Laser bestrahlt, so befindet es sich anschließend zu 100% im angeregten Zustand. Wird die Bestrahlungsdauer für ein Ion im Grundzustand halbiert, so befindet es sich nach diesem Prozess zu 50% immer noch im Grundzustand und ebenfalls zu 50% im angeregten Zustand. Um eine derart präzise Manipulationen zu erreichen, werden die Ionen auf den absoluten Grundzustand heruntergekühlt, die Anordnung unter Vakuum gesetzt und Laser mit sehr scharfer Wellenlänge verwendet.<sup>121</sup>

---

<sup>117</sup> vgl. Wolfgang Kinzel, Skript Theoretische Physik 1, S. 152 f.

<sup>118</sup> vgl. Anna Schughart. Was genau sind Quantencomputer – und was können sie? Wired: <https://www.wired.de/article/was-genau-sind-quantencomputer-und-was-koennen-sie>, 13.11.2017.

<sup>119</sup> vgl. Mikio Nakahara. Physical Realizations of Quantum Computing, Singapur 2006, S.5.

<sup>120</sup> Nora Kusche. Wie funktioniert ein Quantencomputer. Welt der Physik: <https://www.weltderphysik.de/gebiet/technik/quanten-technik/einfuehrung-quantencomputer/>, 26.02.2016.

<sup>121</sup> vgl. Nora Kusche. Wie funktioniert ein Quantencomputer. Welt der Physik: <https://www.weltderphysik.de/gebiet/technik/quanten-technik/einfuehrung-quantencomputer/>, 26.02.2016.



Die Theorie funktioniert. Bereits im Jahr 2001 gelang es Wissenschaftlern in Kalifornien ein System mit 7 Quantenbits zu realisieren und damit die Zahl 15 in ihre Primfaktoren zu zerlegen. Für leistungsfähige Systeme sind allerdings deutlich mehr Qubits notwendig. Erst ab einer Anzahl von 20 solcher Informationseinheiten soll ein funktionierendes Computersystem möglich sein.<sup>122</sup> Genau hier liegt allerdings ein besonderes Problem. Mit einer wachsenden Anzahl von Qubits steigen die Fehler exponentiell an, die jedoch mit klassischen Fehlerkorrekturen nicht zu beheben sind.<sup>123</sup> Je mehr Qubits miteinander verschränkt sind, desto schwieriger wird es diese einzeln zu isolieren und damit Superpositionszustände zu ermöglichen.<sup>124</sup> Dank intensiver Forschungsarbeiten sind innerhalb der letzten achtzehn Jahren allerdings enorme Fortschritte erzielt worden. So konnte das amerikanische Computerunternehmen IBM im Januar dieses Jahres einen funktionstüchtigen 20 Qubit Quantenrechner präsentieren, der außerhalb der Forschung genutzt und mittels einer Cloud kommerziellen Kunden zugänglich gemacht werden soll. Damit ist bereits ein wichtiger Schritt in der Entwicklung von Quantencomputern erreicht. Inwieweit in den nächsten Jahren allerdings ein Quantensprung möglich ist und Systeme geschaffen werden können, die momentane Supercomputer übertreffen und zu revolutionären Rechenleistungen im Stande sind bleibt abzuwarten.

---

<sup>122</sup> vgl. Manfred Lindinger. Der Quantencomputer verlässt das Labor. FAZ: <https://www.faz.net/aktuell/wissen/computer-mathematik/ibm-praesentiert-den-ersten-kommerziellen-quantencomputer-15980196.html>, 10.01.2019.

<sup>123</sup> vgl. Nora Kusche. Wie funktioniert ein Quantencomputer. Welt der Physik: <https://www.weltderphysik.de/gebiet/technik/quanten-technik/einfuehrung-quantencomputer/>, 26.02.2016.

<sup>124</sup> vgl. Max Rauner. Wie funktioniert ein Quantencomputer. Zeit Wissen Nr. 1/2018.

## 7 Abbildungsverzeichnis

Abb. 1: Doppelspaltexperiment mit Elektronen	S. 6
Abb. 2: Intensitätsverteilung Doppelspaltexperiment	S. 6
Abb. 3: Potentialverlauf des linearen harmonischen Oszillators	S. 9
Abb. 4: Zahlenstrahl zur Illustration der reellen Zahlen	S. 16
Abb. 5: Darstellung zweier komplexer Zahlen in der komplexen Zahlenebene	S. 16
Abb. 6: Addition zweier komplexer Zahlen in der komplexen Zahlenebene	S. 17
Abb. 7: Komplexe Konjugation in der komplexen Zahlenebene	S. 17
Abb. 8: Illustration der euklidischen Norm	S. 25
Abb. 9: Illustration der 1-Norm	S. 25
Abb. 10: Graphische Darstellung der Folge $(\psi_n) = \frac{1}{n}$	S. 30
Abb. 11: Graphische Darstellung der Folge $(f_n)$	S. 34
Abb. 12: Grenzfunktion der Folge $(f_n)$	S. 34
Abb. 13: Mengendarstellung berühmter Physiker mit Geburtsland	S. 39
Abb. 14: Einteilung der Physiker in Äquivalenzklassen	S. 41
Abb. 15: Veranschaulichung der Rotation eines Quaders	S. 59
Abb. 16: Ursprünglicher Operator	S. 65
Abb. 17: Inverser Operator	S. 65
Abb. 18: Ursprünglicher Operator	S. 65
Abb. 19: Inverser Operator existiert nicht	S. 65
Abb. 20: Projektion eines Stabes in die x-y-Ebene	S. 81
Abb. 21: Doppelspaltexperiment ohne Messung	S. 84
Abb. 22: Doppelspaltexperiment mit Messung	S. 84
Abb. 23: Energieniveauschema des quantenmechanischen harm. Oszillators	S. 92

## 8 Literaturverzeichnis

Bartelmann, M. Theoretische Physik. Heidelberg 2015

Bartelmann, M. Theoretische Physik 3 – Quantenmechanik. Berlin 2018

Feynman., R. Vom Wesen physikalischer Gesetze. München 1990

Fließbach, T. Quantenmechanik. Berlin 2018

Grahl, J. Analysis 1/2. Version 12. Januar 2016

Gravert, G. Quantenmechanik. Wiesbaden 1977

Großmann, S. Funktionalanalysis im Hinblick auf Anwendungen in der Physik. Wiesbaden 2014

Homeister, M. Quantum Computing verstehen. Wiesbaden 2018

Jordan, J. Skript: Lineare Algebra

Kersting, G. Anton Wakolbinger. Elementare Stochastik. Basel 2010

Kinzel, W. Skript Theoretische Physik 1

Korsch, H. Mathematik der Quantenmechanik. Hannover 2013

Kusche, N. Wie funktioniert ein Quantencomputer. Welt der Physik: <https://www.weltderphysik.de/gebiet/technik/quanten-technik/einfuehrung-quantencomputer/>, 26.02.2016.

Lindinger, M. Der Quantencomputer verlässt das Labor. FAZ: <https://www.faz.net/aktuell/wissen/computer-mathematik/ibm-praesentiert-den-ersten-kommerziellen-quantencomputer-15980196.html>, 10.01.2019.

Messiah, A. Quantenmechanik. Berlin 1991

Nakahara, M. Physical Realizations of Quantum Computing, Singapur 2006

Purkert, W. Georg Cantor. Leipzig 1985

Rauner, M. Wie funktioniert ein Quantencomputer. Zeit Wissen Nr. 1/2018 in <https://www.zeit.de/zeit-wissen/2018/01/quantencomputer-funktion-technologie-investition/komplettansicht>.

Reents, G. Einführung in die Funktionalanalysis

Rebhan, E. Theoretische Physik: Quantenmechanik. Heidelberg 2008

Schughart, A. Was genau sind Quantencomputer – und was können sie? Wired:  
<https://www.wired.de/article/was-genau-sind-quantencomputer-und-was-koennen-sie>,  
13.11.2017.

Schwindt, J. Tutorium der Quantenmechanik. Heidelberg 2016

Tretter, C. Analysis I. Basel 2013

Ziegler, A. Physik verständlich. Haan-Gruiten 2016

## Erklärung

Hiermit versichere ich, dass ich die Arbeit in allen Teilen selbstständig gefertigt und keine anderen als die in der Arbeit angegebenen Hilfsmittel benutzt habe.

Die Zeichnungen, Kartenskizzen und bildlichen Darstellungen habe ich selbst gefertigt.

Würzburg, den

Unterschrift