

Der Harmonische Oszillator in der Quantentheorie: Mathematische Strukturen

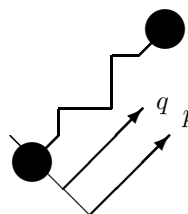
von Haiko Schmarsow
Birkenweg 6
65623 Hahnstätten
Telephon: +49 (0)6430 5335
E-Mail: schmarsow@t-online.de
<http://home.t-online.de/home/schmarsow/>

12. Juli 1997

Dieser Text beschreibt, unter anderem, eine neue mathematische Methode zur Lösung des Energieeigenwertproblems des quantentheoretischen harmonischen Oszillators. Neu sind dabei auch die Begriffe der reduzierten Basis und der riesigen Algebra. Außerdem werden Formeln für iterierte Vertauschungsrelationen angegeben.

Vertauschungsrelation und Hamiltonfunktion

In der Physik werden Schwingungseigenschaften eines zweiatomigen Moleküls (z.B. eines Kohlenmonoxid-Moleküls) durch das Modell einer elastischen Hantel beschrieben. Die relevanten Größen zur Beschreibung der Schwingungszustände sind dabei die Auslenkung aus dem Gleichgewichtszustand und der Relativimpuls beider Hantelmassen.



Die beiden Observablen “Auslenkung” q und “Relativimpuls” p werden als Elemente einer assoziativen Algebra mit einer “Eins” betrachtet, das heißt: Man kann diese Elemente addieren, multiplizieren und mit einer Zahl strecken oder stauchen. Speziell in der Quantentheorie ist die Multiplikation nichtkommutativ, da die “Auslenkungs” - und “Relativimpuls” -Elemente die Heisenberg-Vertauschungsrelation

$$qp - pq = i1$$

erfüllen sollen. (Die Vertauschungsrelation, auch Kommutatorrelation genannt, beschreibt gerade das Maß der Nichtkommutativität der beteiligten Größen, hier q und p .) Ebenfalls charakteristisch für die Quantentheorie ist das Verwenden der komplexen Zahlen, hier als imaginärer Zahlenfaktor vor der “Eins” der Algebra.

Die Schwingungsenergie eines zweiatomigen Moleküls setzt sich zusammen aus kinetischer und potentieller Energie:

$$H = \frac{1}{2}(p^2 + q^2)$$

Dabei ist das Quadratpotential das einfachste Potential, das durch eine Polynom-Funktion beschrieben, einen stabilen Gleichgewichtszustand zuläßt. Die Schwingungsenergie, betrachtet als Funktion von Impuls und Ort, wird auch als Hamiltonfunktion bezeichnet. Die Vertauschungsrelation ist in Einheiten des Planck’schen Wirkungsquantums aufgeschrieben; und die Schwingungsenergie ist in Einheiten der Oszillator-Eigenfrequenz mal dem Planck’schen Wirkungsquantum notiert, was die Schreibearbeit bei Rechnungen vereinfacht. Aus demselben Grund werden die Rechnungen in den folgenden Linearkombinationen der Grundgrößen durchgeführt:

$$\left\{ \begin{array}{l} b := \frac{1}{\sqrt{2}}(q + ip), \\ a := \frac{1}{\sqrt{2}}(q - ip) \end{array} \right\} \Rightarrow \begin{array}{l} ba - ab = 1 \\ H = ab + \frac{1}{2}1 \end{array}$$

Wie läßt sich nun eine, die obigen Zusammenhänge realisierende, assoziative Algebra über den komplexen Zahlen expliziter beschreiben?

Assoziative Algebren in Kleiner Darstellung

Algebren werden im Folgenden “klein dargestellt” genannt, wenn ihre Elemente als Linearkombinationen, einer explizit angegebenen algebraischen Basis, geschrieben werden können.

Oben wird die Multiplikation durch Hintereinanderschreiben von Symbolen realisiert. Assoziativität bedeutet dabei, zum Beispiel $a(ba) = (ab)a$, daß die Klammerung unerheblich ist und, wenn gewünscht, weggelassen werden kann. Nichtkommutativität bedeutet, daß ab nicht gleich ba ist, das heißt, die Reihenfolge der Symbole ist zu beachten. In Fällen von Symbolgleichheit wie bei aaa schreibt man abkürzend a^3 , man definiert sich damit eine Potenzschreibweise. Auf der Menge aller Aneinanderreihungen von vorgegebenen Symbolen, unter den oben spezifizierten Regeln, ist das Aneinanderreihen eine assoziative, nichtkommutative Operation. Eine solche Struktur heißt “freier Monoid” generiert durch die vorgegebenen Symbole.

$$\text{Mo}(\{a, b\}) = \{1, a, b, a^2, ab, ba, b^2, a^3, \dots\}$$

Damit hat man die benötigte Multiplikation durch ein algebraisches Objekt charakterisiert.

Assoziative Algebra, Klein, ohne Relationen

Die Menge $A_{\mathbb{C}} := \text{span}_{\mathbb{C}}(\text{Mo}(\{a, b\})) =$

$$= \left\{ \sum_{\alpha \in \text{Mo}(\{a, b\})} x_{\alpha} \alpha \mid (x_{\alpha})_{\alpha \in \text{Mo}(\{a, b\})} \in \mathbb{C}^{(\text{Mo}(\{a, b\}))} \right\}$$

aller Linearkombinationen mit komplexen Zahlen und Elementen des freien Monoids liefert einen Vektorraum. Man beschreibt Addition und Zahlen- oder Skalarmultiplikation monoidelementweise, wie man sie zum Beispiel zum Hinschreiben der Hamiltonfunktion braucht. (Das Symbol “span” steht hier für die Menge aller Linearkombinationen, wogegen $\mathbb{C}^{(\text{Mo}(\{a, b\}))}$ für die Menge aller Koordinatenfamilien $(x_{\alpha})_{\alpha \in \text{Mo}(\{a, b\})}$ steht, die nur endlich viele Koordinatenwerte ungleich Null haben. Da Linearkombinationen Summen mit endlich vielen Summanden sind, wird jede Linearkombination natürlich auch nur durch endlich viele Koordinaten ungleich Null beschrieben.) Das freie Monoid ist dann eine algebraische Basis dieses komplexen Vektorraumes.

Die Monoidmultiplikation macht diesen Vektorraum zu einer assoziativen Algebra mit “Eins”; allerdings ist die Heisenberg-Vertauschungsrelation in dieser Algebra nicht erfüllt, denn hier ist der Term $ba - ab$ nicht gleich dem neutralen Element der Monoidmultiplikation.

Algebra, Klein, mit Heisenberg-Vertauschungsrelation

Ausgehend von dem oben konstruierten Vektorraum, läßt sich eine neue Vektorraumstruktur definieren, in der die Vertauschungsrelation erfüllt ist. In dem

Raum $\text{span}_{\mathbb{C}}(\text{Mo}(\{a, b\}))$ spannt der multiplikativ eingehüllte Term $ba - ab - 1$ der Vertauschungsrelation einen Untervektorraum I auf:

$$I := \text{span}_{\mathbb{C}}(A_{\mathbb{C}}(ba - ab - 1)A_{\mathbb{C}})$$

Bemerkenswerterweise kann man Elemente dieses Raumes von links und rechts mit Algebraelementen multiplizieren; die Ergebnisse sind wieder Elemente in diesem Unterraum. Diese Eigenschaft wird auch Stabilität bezüglich Rechts-, Linksmultiplikation genannt. Ein bezüglich einer Multiplikation rechts-, links-stabiler Untervektorraum wird auch Ideal genannt.

Wenn man ein Algebraelement x (auch Repräsentant genannt) zu jedem Element des obigen Ideals I addiert, nennt man die entstehende Untermenge $x + I \subset A_{\mathbb{C}}$ (die im Allgemeinen keine Vektorraumstruktur mehr hat) eine Nebenklasse.

Betrachtet man nun die Menge aller solcher Untermengen, das heißt die Menge aller Nebenklassen, so kann man zeigen: Die Menge aller Nebenklassen zerlegt die Algebra in nicht überlappende Untermengen (und jedes Element der Algebra ist in einer dieser Nebenklassen). Auf dieser Menge

$$A_{\mathbb{C}}/I := \{x + I \mid x \in A_{\mathbb{C}}\}$$

von Untermengen kann man Addition, Skalarmultiplikation und Algebarmultiplikation finden, indem man allein die Repräsentanten wie gewohnt addiert, skalarmultipliziert, und algebarmultipliziert. Ein entscheidender Unterschied besteht allerdings: Da der Term der Heisenberg-Vertauschungsrelation ein Element des Ideals ist, kann man den Repräsentanten durch einfache Addition dieses Terms (oder auch anderer multiplikativ eingehüllter Versionen dieses Terms) ändern:

$$ba - ab + I = ba - ab - (ba - ab - 1) + I = 1 + I$$

Das gibt der Menge $A_{\mathbb{C}}/I$ aller Nebenklassen eine Algebrastruktur, die sogenannte Quotientenalgebra, in der die Heisenberg-Vertauschungsrelation und die Hamiltonfunktion formulierbar sind. Da die Heisenberg-Relation $ba - ab = 1$ eine Linearkombination von Monoidelementen ist, bilden die Elemente des freien Monoids keine algebraische Basis der neuen Algebrastruktur.

Eine algebraische Basis der Vektorraumstruktur dieser neuen Algebra erhält man dann folgendermaßen: Eine Totalordnung $a < b$ auf der Menge der generierenden Elemente des freien Monoids liefert eine lexikalische Ordnung $1 < a < aa < ab < \dots < b < ba < bb, \dots$ der Elemente des freien Monoids. Darin zeichnen sich normalgeordnete Elemente, wie $1, a, b, aa, ab$ oder b^2 aus. Durch Anwenden der Vertauschungsrelation kann man nichtnormalgeordnete Elemente in Linearkombinationen von Normalgeordneten überführen:

$$ba + I = ba - (ba - ab - 1) + I = ab + 1 + I$$

(Teile dieses Arguments werden systematisiert in dem sogenannten Poincaré-Birkhoff-Witt-Theorem [Dix]). Die Untermenge aller normalgeordneten Elemente

$$\text{PBW}(\{a, b\}) := \{1, a, b, a^2, ab, b^2, a^3, \dots\} \subset \text{Mo}(\{a, b\})$$

des freien Monoids ist daher eine algebraische Basis der Quotientenalgebra, das heißt ein beliebiges Element darin kann als Linearkombination

$$x \in A_{\mathbb{C}}/I \Leftrightarrow \exists (x_{k,l})_{(k,l) \in \mathbb{N}_0 \times \mathbb{N}_0} \left((x_{k,l})_{(k,l) \in \mathbb{N}_0 \times \mathbb{N}_0} \in \mathbb{C}^{(\mathbb{N}_0 \times \mathbb{N}_0)} \text{ und} \right. \\ \left. x = \sum_{k,l \in \mathbb{N}_0} x_{k,l} a^k b^l + I \right)$$

von normalgeordneten Monoiden geschrieben werden plus dem Ideal, das alle möglichen Umformungen mittels der Heisenberg-Vertauschungsrelation enthält. Wenn keine Verwirrung entsteht, werden aus Ökonomiegründen nur die Repräsentanten hingeschrieben und das Ideal weggelassen.

Einschub: Liealgebren

In jeder assoziativen Algebra A über einem Körper \mathbb{K} kann man die sogenannte Kommutatoroperation $A \times A \rightarrow A$ definieren, die zwei Elementen ihren Kommutator zuordnet:

$$\forall x, y (x, y \in A \Rightarrow [x, y] := xy - yx)$$

Ein solcher Kommutator einer Algebra wird meist durch eckige Klammern gekennzeichnet. Die Kommutatoroperation ist nichtassoziativ, aber sie kann, bis auf spezifische Relationen wie der Heisenberg-Vertauschungsrelation, vollständig durch Antisymmetrie und Jacobi-Identität charakterisiert werden (das Hauptergebnis des Poincaré-Birkhoff-Witt-Theorems). Algebren deren Multiplikation antisymmetrisch ist und die Jacobi-Identität erfüllt, heißen Lie-Algebren. Betrachtet man jetzt die Vektorraumstruktur der assoziativen Algebra zusammen mit der Kommutatoroperation, so hat man eine Lie-Algebra:

$$(A, +, \mathbb{K}, [., .])$$

Die spezielle Lie-algebra $(A_{\mathbb{C}}/I, +, \mathbb{K}, [., .])$ hat zum Beispiel die folgenden zwei Lie-Unteralgebren: Zum einen die Heisenberg-Lie-Algebra

$$(\text{span}_{\mathbb{C}}(\{1, a, b\}), +, \mathbb{C}, [b, a] = 1)$$

und die Oszillator-Lie-Algebra

$$(\text{span}_{\mathbb{C}}(\{1, a, b, H\}), +, \mathbb{C}, [b, a] = 1, [b, H] = b, [a, H] = -a).$$

Eigenwerte der Energie- oder Hamiltonfunktion

Um von einer Energiefunktion aus Monoiden zu konkreten Zahlenwerten zu kommen, kann man ein sogenanntes Eigenwertproblem formulieren:

$$H z_{\lambda} = \lambda z_{\lambda}$$

Hierbei sind die Eigenwerte λ und die Eigenelemente z_λ unbekannt.

Nach einer elementaren Umformung $(H - \lambda 1) z_\lambda = 0$, sieht man, daß Energieeigenelemente z_λ Nullteiler sind. Und, daß der Faktor $(H - \lambda 1)$ für einen Eigenwert λ ebenfalls nicht invertierbar sein kann. (Kein Element in assoziativen Algebren kann zugleich Nullteiler und invertierbar sein.)

Daher nimmt man die Invertierbarkeit an und erkennt mögliche Energieeigenwerte an entstehenden undefiniertheitsproblemen. Der Rest ist eine Rechenaufgabe:

$$\begin{aligned} 1 &= (H - \lambda 1) x_\lambda = (ab - \underbrace{(\lambda - \frac{1}{2})}_{=: \bar{\lambda}} 1) \sum_{k,l \in \mathbb{N}_0} x_{k,l} a^k b^l = \\ &= \sum_{k,l \in \mathbb{N}_0} x_{k,l} (ab a^k b^l - \bar{\lambda} a^k b^l) = \\ &= \sum_{k',l' \in \mathbb{N}_0} x_{k',l'} a^{k'+1} b^{l'+1} - \sum_{k,l \in \mathbb{N}_0} x_{k,l} (\bar{\lambda} - k) a^k b^l \end{aligned}$$

Dabei wurde die Normalordnung der Monoidenlemente mit der iterierten Heisenberg-Vertauschungsrelation

$$ba - ab = 1 \quad \Rightarrow \quad ba^k - a^k b = k a^{k-1}$$

hergestellt. Durch einen Summationsindexwechsel ($k := k' + 1, l := l' + 1$) werden Monoidenlemente vergleichbar

$$1 = \sum_{k,l \geq 1} x_{k-1,l-1} a^k b^l - \sum_{k,l \geq 1} x_{k,l} (\bar{\lambda} - k) a^k b^l - \sum_{k \geq 1, l=0} \dots - \sum_{k=0, l \geq 1} \dots - \sum_{k=0, l=0} \dots$$

und die Koordinaten gleicher Monoidenlemente können zusammengefasst werden:

$$1 = \sum_{k,l \geq 1} \underbrace{(x_{k-1,l-1} - x_{k,l}(\bar{\lambda} - k))}_{=0} a^k b^l - \sum_{k \geq 1} \underbrace{x_{k,0}(\bar{\lambda} - k)}_{=0} a^k - \sum_{l \geq 1} \underbrace{x_{0,l} \bar{\lambda} b^l}_{=0} - \underbrace{x_{0,0} \bar{\lambda}}_{=1} 1$$

Anschließend wird ein Koeffizientenvergleich durchgeführt (Hier würde die lineare Unabhängigkeit der Monoidenlemente benötigt werden.). Definierte Koordinaten ergeben sich jetzt unter der Bedingung $\bar{\lambda} - k \neq 0$ zu $x_{0,0} = -\frac{1}{\bar{\lambda}}$, $x_{k,0} = 0$ für $k \geq 1$, $x_{0,l} = 0$ für $l \geq 1$ und daraus erhält man die restlichen Koordinaten über $x_{k,l} = \frac{x_{k-1,l-1}}{(\bar{\lambda} - k)} = \dots = \frac{x_{k-m,l-m}}{(\bar{\lambda} - k + m - 1) \dots (\bar{\lambda} - k)}$ zu $x_{k,l} = \delta_{k,l} \frac{-1}{\bar{\lambda}(\bar{\lambda} - 1) \dots (\bar{\lambda} - k)}$. Das potentiell inverse Element bekommt dann die Form

$$x_\lambda = \sum_{n \in \mathbb{N}_0} \frac{-1}{\bar{\lambda}(\bar{\lambda} - 1) \dots (\bar{\lambda} - n)} a^n b^n$$

Die Werte λ beziehungsweise $\bar{\lambda}$, die den Ausdruck undefiniert machen, sind mögliche Energieeigenwerte:

$$\bar{\lambda} \in \mathbb{N}_0 \quad \Leftrightarrow \quad \lambda \in \mathbb{N}_0 + \frac{1}{2}$$

Bemerkenswerterweise widerspricht das bekannte Absorptionsspektrum zweiatomiger Moleküle [BÖHM] dem rechnerischen Ergebnis nicht! Da allerdings

das teilweise definierte inverse Element eine Summe von unendlich vielen Summanden ist, kann dieses Element nicht in der kleinen Quotientenalgebra liegen, deren Elemente ja ausschließlich Linearkombinationen (endlich viele Summanden!) von normalgeordneten Monoidelementen sind.

Trotzdem das potentiell inverse Element eine physikalische Beobachtung bestätigt, ist es mit den bisherigen mathematischen Begriffen (Linearkombination, lineare Unabhängigkeit) nicht beschreibbar. An diesem Punkt kann man drei Probleme erkennen:

Σ_∞ Die Verallgemeinerung des Begriffes der Linearkombination auf Summen mit unendlich vielen Summanden.

FREI Die Verallgemeinerung der linearen Unabhängigkeit (oder auch algebraische Freiheit genannt) auf Summen mit unendlich vielen Summanden damit der Koeffizientenvergleich begründet bleibt,

MULT und eine passende Vergrößerung der Algebra damit die Rechnung mit einer eindeutigen multiplikativen Inversen begründbar wird.

Diese Probleme werden in den folgenden Abschnitten angegangen.

Reduzierte Basis

Eine Summe mit unendlich vielen Summanden beschreibt man am besten durch einen Grenzwertprozess. Dabei ist der Grenzwert einer Folge (oder eines Netzes) ein Element, das in jeder seiner Umgebungen fast alle Folge- (Netz-)glieder enthält, bis auf endlich viele Ausnahmen.

Der Umgebungsbegriff wird allgemein durch Untermengen gegeben die Umgebung aller ihrer Elemente sind; diese werden auch offene Mengen genannt. Die Menge aller offenen Mengen einer Grundmenge E heißt Topologie $\mathcal{O} \subset \mathcal{P}(E)$, wobei $\mathcal{P}(E)$ die Menge aller Untermengen der Menge E ist. Der Grenzwertbegriff darin wird eindeutig, wenn so viele Umgebungen darin enthalten sind, daß die sogenannte Hausdorff-Eigenschaft erfüllt ist. Stetige Funktionen sind dann genau die Funktionen, die Grenzwertprozesse konservieren, das heißt das Bild der Folge (oder des Netzes) konvergiert gegen das Bild des Grenzwertes.

Ein Vektorraum $(E, +, \mathbb{C})$ mit einer Hausdorff-Topologie \mathcal{O} und stetiger Addition und Skalarmultiplikation heißt dann Hausdorff-topologischer Vektorraum $(E, +, \mathbb{C}, \mathcal{O})$. Mit diesem Vektorraumbegriff kann man den Begriff der Linearkombination und den der algebraischen Basis erweitern.

Man definiert die Verallgemeinerung des Begriffes der Linearkombination von Vektoren einer Menge $A \subset E$ als Grenzwert eines Netzes von Linearkombinationen:

$$x \in E \text{ heißt lineare Summe einer Familie } (x_a)_{a \in A} \in \mathbb{C}^A \quad :\Leftrightarrow \\ x = \lim_{F \text{ endlich } \subset A} \sum_{a \in F} x_a a$$

Man schreibt dann auch $x = \sum_{a \in A} x_a a$. Die Menge aller linearen Summen einer vorgegebenen Generierenden-Menge von Elementen wird dann Lineare Summe der Menge genannt:

$$\text{Eine Menge } S \text{ hei\u00dft Lineare Summe einer Menge } A :\Leftrightarrow \\ S = \left\{ x \mid x \in E \text{ und } \exists (x_a)_{a \in A} \left((x_a)_{a \in A} \in \mathbb{C}^A \text{ und } x = \sum_{a \in A} x_a a \right) \right\}$$

Diese Lineare Summe, geschrieben $S := \text{sum}_{\mathbb{C}, \mathcal{O}}(A)$, ist ein topologischer Untervektorraum weil Addition und Skalarmultiplikation stetig sind; mit $x, y \in \text{sum}_{\mathbb{C}, \mathcal{O}}(A) \subset E$, $s \in \mathbb{C}$ und [TGIII.42 §5.5 Proposition 6] sieht man:

$$x + s y = \lim_{F_{\text{endlich}} \subset A} \sum_{a \in F} x_a a + s \lim_{G_{\text{endlich}} \subset A} \sum_{a \in G} y_a a = \\ \lim_{M_{\text{endlich}} \subset A} \sum_{a \in M} (x_a + s y_a) a \in \text{sum}_{\mathbb{C}, \mathcal{O}}(A)$$

Ein erstes Beispiel f\u00fcr eine Lineare Summe \u00fcber in einem topologischen Vektorraum ergibt sich folgenderma\u00dfen: Der Raum aller beliebig besetzten Koordinatenfamilien \u00fcber einer vorgegebenen Menge, zum Beispiel PBW $(\{a, b\})$, ist ein Vektorraum $(\mathbb{C}^{\text{PBW}(\{a, b\})}, +, \mathbb{C})$. Mit der sogenannten Produkttopologie bez\u00fcglich der Absolutbetragstopologie der komplexen Zahlen, ist dieser Raum auch ein Hausdorff topologischer Vektorraum $(\mathbb{C}^{\text{PBW}(\{a, b\})}, +, \mathbb{C}, \mathcal{O}_\pi)$. Die Produkttopologie erm\u00f6glicht es jedes beliebige Element dieses topologischen Vektorraumes als lineare Summe einfach besetzter Koordinatenfamilien (sogeannter Koordinaten-Elemente) zu schreiben:

In anderer Schreib- und Denkweise bedeutet dies, da\u00df dieser Vektorraum gerade die Koordinatendarstellung eines Vektorraumes ist, der durch eine Lineare Summe der Generierenden-Elemente beschrieben wird:

$$(\mathbb{C}^{\text{PBW}(\{a, b\})}, +, \mathbb{C}, \mathcal{O}_\pi) \stackrel{\text{Vektorraum}}{\cong} \text{sum}_{\mathbb{C}, \mathcal{O}_\pi}(\text{PBW}(\{a, b\}))$$

Da hier die Generierenden-Elemente gerade die normalgeordneten Elemente des, f\u00fcr die Eigenwertrechnungen verwendeten, freien Monoids sind, so kann man die vorher beschriebenen Eigenwert-Rechnungen darin formuliert denken. (Die explizite Form der, durch die Heisenberg-Vertauschungsrelation definierten, assoziativen Multiplikationsoperation wird sp\u00e4ter ermittelt.) \sum_∞ F\u00fcr den vorgegenommenen Koeffizientenvergleich ben\u00f6tigt man jetzt noch den Begriff der reduzierten Freiheit einer Menge von Vektorraum-Elementen:

$$A \subset E \text{ hei\u00dft reduziert frei } :\Leftrightarrow \\ \forall (x_a)_{a \in A} \left(\left((x_a)_{a \in A} \in \mathbb{K}^A \text{ und } \sum_{a \in A} x_a a = 0 \right) \Rightarrow (x_a)_{a \in A} = (0)_{a \in A} \right)$$

Insbesondere sind die Indexmengen von produkttopologisierten Körperprodukten reduziert frei, was den oben erwähnten Koeffizientenvergleich linearer Summen ermöglicht. Allgemein sind reduziert freie Mengen auch algebraisch frei, wie die Einschränkung auf Summen mit endlich vielen Summanden zeigt. Der Begriff der Linearen Summe und der reduzierten Freiheit zusammen liefern die sogenannte reduzierte Basis $B \subset E$: FREI

B heißt reduzierte Basis $\Leftrightarrow E \subset \text{sum}_{\mathbb{K}, \mathcal{O}}(B)$ und B ist reduziert frei.

Da, wie vorher erwähnt, eine reduzierte Basis automatisch algebraisch frei ist, kann sie durch den Basisergänzungssatz [AII.95 §7.1 Theorem 2] zu einer algebraischen Basis des Hausdorff-topologischen Vektorraumes erweitert werden. Die reduzierte Basis ist dann eine Untermenge der algebraischen Basis, daher der Name reduzierte Basis. Bemerkenswert ist dabei, daß durch die Summen mit unendlich vielen Elementen die reduzierte Basis alle Elemente desselben Vektorraums mit weniger Basisvektoren beschreiben kann. Eine algebraische Basis braucht mit Linearkombinationen mehr Elemente für die gleiche Aufgabe.

Räume mit Reduzierten Basen

Es folgt eine Liste mit Beispielen für reduzierte Basen:

Die rationalen Zahlen, mit der Topologie die durch den Absolutbetrag gegeben ist, bilden einen Hausdorff-topologischen Vektorraum $(\mathbb{Q}, +, \mathbb{Q}, \mathcal{O}_{|\cdot|})$ mit reduzierter Basis $B = \{1\}$. Dieser Hausdorff-topologische Vektorraum ist nicht vollständig. Die Existenz einer reduzierten Basis in einem Hausdorff-topologischen Vektorraum garantiert also nicht seine Vollständigkeit.

In direkten Summenräumen $(\mathbb{K}^{(B)}, +, \mathbb{K}, \mathcal{O}_{\text{box}}|_{\mathbb{K}^{(B)}})$ mit induzierter Box-Topologie ist die natürliche Einlagerung der Indexmenge B eine algebraische Basis und zugleich reduzierte Basis. Wegen der vielen Umgebungen (wie in leichter Analogie zur diskreten Topologie) wird jeder Grenzwert von unterschiedlichen Koordinaten-Elementen in nur endlich vielen Schritten erreicht, das heißt, lineare Summen von Koordinaten-Elementen haben in der Box-Topologie nur endlich viele Summanden.

$$\begin{array}{c} \bullet \\ \vdots \\ \bullet \end{array} \quad \dots = \begin{array}{c} \bullet \\ \vdots \\ \bullet \end{array} + \begin{array}{c} \bullet \\ \vdots \\ \bullet \end{array} \quad \dots \quad \text{endlich viele}$$

In jedem Hilbertraum ist ein maximales Orthonormalsystem eine reduzierte Basis des Hilbertraumes.

Das letzte Beispiel zeigt gleichzeitig auch eine Algebra in großer Darstellung [AIII.27 §2.10]. Das freie Monoid $\text{Mo}(X)$ einer beliebigen Menge X liefert die assoziative Multiplikation und ist dabei gleichzeitig, als Menge, die reduzierte Basis des Linearen Summenraumes:

$$\left(\mathbb{K}^{\text{Mo}(X)}, +, \mathbb{K}, \cdot, \mathcal{O}_\pi \right) \stackrel{\text{assoziative Algebra}}{\cong} \text{sum}_{\mathbb{K}, \mathcal{O}_\pi}(\text{Mo}(X))$$

$$\begin{aligned} \left(\sum_{\alpha \in \mathcal{M}(X)} x_\alpha \alpha \right) \left(\sum_{\beta \in \mathcal{M}(X)} y_\beta \beta \right) &= \sum_{\alpha, \beta \in \mathcal{M}(X)} x_\alpha y_\beta \alpha \beta = \\ &= \sum_{\gamma \in \mathcal{M}(X)} \underbrace{\left(\sum_{\alpha, \beta \in \mathcal{M}(X) \text{ und } \gamma = \alpha \beta} x_\alpha y_\beta \right)}_{\substack{\text{endlich viele} \\ \text{bis zu unendlich viele}}} \gamma \end{aligned}$$

In Algebren großer Darstellung können die Elemente durch lineare Summen beschrieben werden, während die Koordinaten eines Produktes zweier Elemente aber Summen endlich vieler Zahlen sind. (In Algebren kleiner Darstellung werden Elemente durch Linearkombinationen beschrieben, damit sind die Koordinaten eines Produktes automatisch Summen von nur endlich vielen Zahlen.)

Algebraische-, Reduzierte-, Topologische Basen

In der Mathematik gibt es einen dritten verwandten Basisbegriff, nämlich den der topologischen Basis $B \subset E$ eines Hausdorff-topologischen Vektorraums $(E, +, \mathbb{K}, \mathcal{O})$:

$$B \text{ ist topologische Basis von } E \Leftrightarrow E \subset \overline{\text{span}_{\mathbb{K}}(B)} \text{ und } \forall b \left(b \in B \Rightarrow b \notin \overline{\text{span}_{\mathbb{K}}(B \setminus \{b\})} \right)$$

Die Überstreichung der angegebenen Menge bezeichnet die kleinste Obermenge, deren Komplement offen ist und kennzeichnet den sogenannten topologischen Abschluß der Menge. (Eine topologisch abgeschlossene Menge enthält jedes Element ihres Randes, eine offene Menge dagegen keines, weil sie Umgebung jedes ihrer Elemente ist.) Und es gibt ein Beispiel an dem man sehen kann, daß die drei Basisbegriffe, die algebraische Basis, die reduzierte Basis und die topologische Basis, grundlegend unterschiedliche Sachverhalte beschreiben:

Dazu betrachtet man die Menge $\mathcal{B}([0, 1], \mathbb{R}) \subset \mathbb{R}^{[0, 1]}$ aller beschränkten reellwertigen Funktionen auf dem Einheitsintervall $[0, 1] \subset \mathbb{R}$:

$$(\mathcal{B}([0, 1], \mathbb{R}), +, \mathbb{R}, \|\cdot\|)$$

Auf dieser Menge kann man punktweise Addition und Skalarmultiplikation definieren und hat damit eine Vektorraumstruktur. Der vorzeichenlose Maximalwert jeder Funktion definiert eine Norm auf dem Vektorraum und macht ihn so zu einem Hausdorff-topologischen Vektorraum.

Die Menge aller Monomfunktionen

$$B := \{m_n : [0, 1] \rightarrow \mathbb{R}, x \mapsto x^n \mid n \in \mathbb{N}_0\}$$

spannt den Vektorunterraum $\text{span}_{\mathbb{R}}(B)$ aller Polynomfunktionen auf und ist dessen algebraische Basis.

Die Lineare Summe $\text{sum}_{\mathbb{R}, \mathcal{O}_{\|\cdot\|}}(B)$ der Menge aller Monomfunktionen ist die Menge aller Funktionen mit einer im Einheitsintervall konvergenten Potenzreihendarstellung um die Null. Dies ist ein Hausdorff-topologischer Vektorunterraum und die Eindeutigkeit der Taylorentwicklung macht die Menge der Monomfunktionen reduziert frei. In diesem Vektorunterraum ist die Menge der Monomfunktionen also eine reduzierte Basis.

Der Norm-topologische Abschluß $\overline{\text{span}_{\mathbb{R}}(B)}$ der Menge aller Polynomfunktionen ist nach dem Satz von Stone und Weierstraß [TGX §4.1 Theorem 2] gerade gleich der Menge aller stetigen Funktionen. Und außerdem ist die Menge B der Monomfunktionen nicht topologisch frei (siehe [TGX §4.2 Lemma 2], dort wird gezeigt, daß die identische Funktion gleichmäßig durch eine Folge von Funktionen mit geradem Exponenten genähert werden kann.).

Damit ist eine topologische Basis etwas anderes als eine reduzierte Basis, das gleiche gilt beim Vergleich mit einer algebraischen Basis. Diese Überlegungen beschließen den Exkurs über die reduzierte Basis.

Heisenbergmultiplikation

In der vorher anhand der Heisenberg-Vertauschungsrelation konstruierten assoziativen Algebra $\text{span}_{\mathbb{C}}(\text{PBW}(\{a, b\}))$ kleiner Darstellung wurde die Multiplikation nicht explizit beschrieben. Dies wird hier nachgeholt indem man zwei Elemente x, y in Basisdarstellung multipliziert:

$$xy = \left(\sum_{r,s \in \mathbb{N}_0} x_{r,s} a^r b^s \right) \left(\sum_{t,u \in \mathbb{N}_0} y_{t,u} a^t b^u \right) = \sum_{r,s,t,u \in \mathbb{N}_0} x_{r,s} y_{t,u} a^r b^s a^t b^u$$

Die iterierte Kommutatorrelation

$$ba - ab = 1 \quad \Rightarrow \quad b^s a^t = \sum_{m=0}^{\min(s,t)} \frac{s! t!}{(t-m)! m! (s-m)!} a^{t-m} b^{s-m}$$

stellt die Normalordnung wieder her. Und ein Summationsindexwechsel

$$\sum_{r,s,t,u \in \mathbb{N}_0} \sum_{m=0}^{\min(s,t)} S(r, s, t, u, m) = \sum_{k,l,n \in \mathbb{N}_0} \sum_{q=0}^k \sum_{p=0}^l S(k-q, n+p, n+q, l-p, n)$$

faßt die Koeffizienten gleicher Monoidelemente zusammen:

$$xy = \sum_{k,l \in \mathbb{N}_0} \left(\sum_{n \in \mathbb{N}_0} \sum_{q=0}^k \sum_{p=0}^l \frac{(n+p)! (n+q)!}{p! n! q!} x_{k-q, n+p} y_{n+q, l-p} \right) a^k b^l$$

Alle obigen Summen haben endlich viele Summanden, da Linearkombinationen verwendet werden. Wie man an dem folgenden Beispiel sieht, kann diese Multiplikation nicht auf den zugehörigen Raum $\text{sum}_{\mathbb{C}, \mathcal{O}_{\pi}}(\text{PBW}(\{a, b\}))$ verallgemeinert werden; denn zwei Elemente, mit Koordinaten die überall gleich eins

sind, haben mindestens eine undefinierte Produktkoordinate:

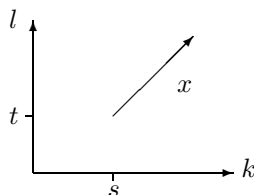
$$\left(\left(\sum_{k,l \in \mathbb{N}_0} 1 a^k b^l \right)^2 \right)_{0,0} = \sum_{n \in \mathbb{N}_0} n!$$

Die sich hieran anschließende Frage ist nun wie man den Linearen Summenraum geeignet einschränken kann, um die Multiplikation definiert zu machen?

Diagonalalgebra in Großer Darstellung

Die erste Möglichkeit liefern sogenannte Diagonalelemente:

$$D := \left\{ \sum_{n \in \mathbb{N}_0} x_n a^{s+n} b^{t+n} \mid (x_n)_{n \in \mathbb{N}_0} \in \mathbb{C}^{\mathbb{N}_0} \text{ und } s, t \in \mathbb{N}_0 \right\}$$



Auf dem linearen Span $\text{span}_{\mathbb{C}}(D)$, der Menge aller Linearkombinationen von Diagonalelementen, ist die durch die Heisenberg-Vertauschungsrelation gegebene Multiplikation definiert, wie man durch rechnerisches Bestätigen der Relation $DD \subset D$ sehen kann. Diese große Algebra ist assoziativ, hat die bekannte "Eins" als multiplikativ neutrales Element und heißt Diagonalalgebra. In dieser Algebra kann das Energieeigenproblem des harmonischen Oszillators gelöst werden. Neben den bereits bekannten Eigenwerten ergeben sich die Eigenelemente und die, in anderem Kontext, bekannten Aufsteige- und Absteigerelationen:

$$H z_n = (n + \frac{1}{2}) z_n \quad n \in \mathbb{N}_0$$

$$z_n = c_n \sum_{s \in \mathbb{N}_0} \frac{(-1)^s}{s!} a^{n+s} b^s \quad c_n \in \mathbb{C} \setminus \{0\}$$

$$a z_n = z_{n+1} \quad \text{Aufsteigerelation für } c_n = c_{n+1}$$

$$b z_{n+1} = (n + 1) z_n \quad \text{Absteigerelation für } c_n = c_{n+1}$$

Die Begriffe der Spurrelation $\text{Tr}(\cdot)$ und der Erwartungswertrelation $\langle \cdot \rangle$ ergeben zusammen mit der, auf den gesamten Raum antilinear und antimultiplikativ erweiterten, Stern-Operation $^+$

$$\text{Tr} \left(\sum_{k,l \in \mathbb{N}_0} x_{k,l} a^k b^l \right) = \sum_{n \in \mathbb{N}_0} x_{n,n}$$

$$\begin{aligned} \langle z \rangle_n &= \text{Tr}(z x_n x_n^+) \\ b^+ &:= a \text{ und } a^+ := b \text{ und } 1^+ := 1 \text{ mit } (\mu \alpha \beta)^+ = \mu^* \beta^+ \alpha^+ \\ (\mu \in \mathbb{C}, \mu^* \text{ beschreibt die komplexe Konjugation, } \alpha, \beta \in \text{PBW}(\{a, b\})) \end{aligned}$$

auf der Diagonalalgebra die bekannten Erwartungswerte

$$\begin{aligned} \langle q \rangle_n &= \langle p \rangle_n = 0 \\ \langle q^2 \rangle_n &= \langle p^2 \rangle_n = (n + \frac{1}{2}) \frac{|c_n|^2}{e} \end{aligned}$$

für Relativimpuls und Auslenkung des harmonischen Oszillators ($e = \exp(1) \in \mathbb{R}$). Damit folgt auch die Aussage der Heisenberg-Unschärferelation sofort:

$$\sqrt{\langle q^2 \rangle_n} \sqrt{\langle p^2 \rangle_n} = (n + \frac{1}{2}) \frac{|c_n|^2}{e}.$$

Riesige Konturalgebra

Ein anderer Vektorunterraum ist gegeben durch Koordinatenfamilien mit einer Kontur:

$$R_{\mathbb{C}} = \left\{ x \left| x = \sum_{k,l \in \mathbb{N}_0} x_{k,l} a^k b^l \in \text{sum}_{\mathbb{C}, \mathcal{O}_\pi}(\text{PBW}(\{a, b\})) \text{ und} \right. \right. \\ \left. \left. \exists c_x, d_x \left(c_x, d_x \in \mathbb{R}_0^+ \text{ und } |x_{k,l}| \leq c_x \frac{d_x^{(k+l)}}{k! l!} \right) \right\}$$

Dies liefert eine assoziative Algebra mit "Eins". Allerdings ist dies weder eine kleine noch eine große Algebra wie man durch Multiplikation von einem Element fester Kontur mit sich selbst sieht. Algebren, deren Elemente in Koordinatendarstellung bei der Multiplikation Koordinatensummen von unendlich vielen Koordinaten erzeugen, heißen riesig dargestellte oder riesige Algebren. In der obigen riesigen Algebra kann man durch Exponentiation der Elemente der Heisenberg Lie Algebra

$$e^{s a} e^{t b} e^{s' a} e^{t' b} = e^{s' t} e^{(s+s') a} e^{(t+t') b},$$

eine Parametrisierung der Heisenberg-Lie-Gruppe erzeugen, diese hat die Gruppenoperation:

$$(r, s, t)(r', s', t') = (r + r' + s' t, s + s', t + t').$$

Analog, nur mit erheblich höherem Rechenaufwand ist dies auch für die Oszillator-Lie-Algebra möglich.

Oszillatormultiplikation und Gruppe

Um Elemente der Oszillator Lie Algebra so assoziativ multiplizieren zu können, daß man Exponentialfunktionen dieser Elemente bilden kann, betrachtet man

eine komplexe assoziative Algebra, deren Multiplikation durch ein freies Monoid gegeben ist, das von den Symbolen a, b und h erzeugt wird. Wobei in dieser Algebra, zusätzlich zur Heisenberg Vertauschungsrelation, noch zwei andere Vertauschungsrelationen gelten, die sich für $s = \pm 1$ ergeben wenn man das Symbol h als Hamilton Funktion betrachtet, und für c die Symbole a und b einsetzt:

$$[h, c] = sc \Rightarrow h^m c^n = \sum_{r=0}^m (sn)^r \binom{m}{r} c^n h^{m-r} \quad (m, n \in \mathbb{N}_0, n \neq 0)$$

Die notwendigen Summationsindexwechsel schreiben sich wie folgt:

$$\begin{aligned} \text{(i)} \quad & \sum_{r=0}^{\infty} \sum_{u=0}^{\infty} S(r, u) = \sum_{m=0}^{\infty} \sum_{j=0}^m S(j, m-j) \\ \text{(ii)} \quad & \sum_{u=0}^{\infty} \sum_{w=0}^r S(u, w) = \sum_{m=0}^{\infty} \sum_{s=0}^{\min(m,r)} S(m-s, s) \quad (r \in \mathbb{N}_0) \\ \text{(iii)} \quad & \sum_{q=0}^{\infty} \sum_{t=1}^{\infty} S(q, t) = \sum_{l=1}^{\infty} \sum_{i=0}^{l-1} S(i, l-i) \\ \text{(iv)} \quad & \sum_{q=0}^{\infty} \sum_{m=0}^{\min(q,s)} S(q, m) = \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{t=0}^s S(l+t, t) \quad (s \in \mathbb{N}_0) \\ \text{(v)} \quad & \sum_{r=0}^{\infty} \sum_{u=0}^{\infty} \sum_{v=0}^r \sum_{w=0}^{r-v} S(r, u, v, w) = \\ & \sum_{m=0}^{\infty} \sum_{x=0}^{\infty} \sum_{y=0}^x \sum_{z=0}^{\min(m,y)} S(x, m-z, x-y, y-z) \\ \text{(vi)} \quad & \sum_{p=0}^{\infty} \sum_{q=0}^{\infty} \sum_{s=1}^{\infty} \sum_{t=1}^{\infty} \sum_{m=0}^{\min(q,s)} S(p, q, s, t, m) = \\ & = \sum_{k=0}^{\infty} \sum_{l=1}^{\infty} \sum_{j=0}^{l-1} \left(\left(\sum_{i=1}^k S(k-i, j, i, l-j, 0) \right) + \right. \\ & \quad \left. + \left(\sum_{n=1}^{\infty} \sum_{i=0}^k S(k-i, j+n, i+n, l-j, n) \right) \right) \end{aligned}$$

Dann ergibt sich die assoziative Multiplikation zweier Algebraelemente x und y zu:

$$\begin{aligned} xy &= \sum_{k,m \in \mathbb{N}_0} (c_0(k, 0, m) + c_2(k, 0, m)) a^k h^m + \\ &+ \sum_{k,l,m \in \mathbb{N}_0, l \neq 0} (c_0(k, l, m) + c_1(k, l, m) + c_2(k, l, m) + c_3(k, l, m)) a^k b^l h^m \end{aligned}$$

Wobei die Koeffizienten gegeben sind als:

$$c_0(k, l, m) = \sum_{j=0}^m x(k, l, j) y(0, 0, m-j)$$

$$\begin{aligned}
 c_1(k, l, m) &= \sum_{r=0}^{\infty} \sum_{i=0}^{l-1} \sum_{j=0}^{\min(m,r)} (i-l)^{r-j} \binom{r}{j} x(k, i, r) y(0, l-i, m-j) \\
 c_2(k, l, m) &= \sum_{r=0}^{\infty} \sum_{s=1}^{\infty} \sum_{i=0}^{\min(k,s)} \sum_{j=0}^{\min(m,r)} \frac{s^{r-j} s!}{i!} \binom{r}{j} \binom{l-i+s}{l} \\
 &\quad \cdot x(k-i, l-i+s, r) y(s, 0, m-j) \\
 c_3(k, l, m) &= \sum_{x=0}^{\infty} \sum_{y=0}^x \sum_{z=0}^{\min(m,y)} \frac{x!}{(x-y)! (y-z)! z!} \cdot \\
 &\quad \cdot \left(\sum_{j=0}^{l-1} (j-l)^{y-z} \left(\left(\sum_{i=1}^k i^{x-y} x(k-i, j, x) y(i, l-j, m-z) \right) + \right. \right. \\
 &\quad \left. \left. + \left(\sum_{n=1}^{\infty} \sum_{i=0}^k \frac{(i+n)^{x-y} (i+n)! (j+n)!}{i! j! n!} \cdot x(k-i, j+n, x) y(i+n, l-j, m-z) \right) \right) \right)
 \end{aligned}$$

Und eine Parametrisierung der Oszillator-Gruppe hat dann die folgende Gruppenoperation:

$$(p, x, y, t) (p', x', y', t') = (p + p' + yx'e^{st}, x + x'e^{st}, y + y'e^{-st}, t + t'),$$

mit $p, x, y, t, p', x', y', t' \in \mathbb{C}$.

Glossar

Familie Indizierte Gesamtheit von Elementen, kann auch als Funktion interpretiert werden (Die Indizes werden dabei als Argumente betrachtet und die indizierten Größen als ihre Bilder).

Körper Die reellen Zahlen \mathbb{R} , die rationalen Zahlen \mathbb{Q} und die komplexen Zahlen \mathbb{C} sind Beispiele für Körper.

Linearer Span Menge aller Linearkombinationen der Elemente einer vorgegebenen Menge.

Koordinaten-Element Eine Kurzbezeichnung für ein Element einer Produktmenge, das nur eine Koordinate ungleich null hat.

Topologie Laut mathematischer Definition: Spezielle Untermenge der Menge aller Untermengen einer vorgegebenen Grundmenge. Anschaulich, die Menge aller Mengen ohne Rand, also Untermengen die Umgebung aller ihrer Punkte sind. Der Umgebungsbegriff wird verwendet zur mathematischen Definition von Begriffen wie dem Grenzwert einer Folge (eines Netzes) oder der Stetigkeit einer Funktion.

Hausdorff-Topologie Ein Typ von Topologie, der so viele offene Mengen hat, daß Grenzwerte eindeutig bestimmbar sind und stetige Funktionen Grenzwerte erhalten.

Diskrete Topologie Topologie auf einer Menge, so das jede Untermenge der Menge als offen angesehen wird. Dies bewirkt, daß Grenzwerte immer in endlich vielen Schritten erreicht werden, was den Grenzwertbegriff in einer solchen Topologie sehr einfach macht.

Box-Topologie Topologie auf einem Produktraum topologischer Mengen. In einer solchen Topologie sind nur solche Summen unterschiedlicher Koordinaten-Elemente konvergent, die endlich viele Summanden haben.

Produkt-Topologie Topologie auf einem Produktraum topologischer Mengen. In einer solchen Topologie sind alle Summen unterschiedlicher Koordinaten-Elemente konvergent.

Referenzen

- [BÖHM] Böhm, Arno. *Quantum Mechanics*. New York: Springer, 1979.
- [A] Bourbaki, Nicolas. *Algèbre*. Chap.I-III. Paris: Hermann, 1970.
- [AC] —. *Commutative Algebra [Algèbre Commutative]*. Chap.III, Paris: Hermann, 1972.
- [EVT] —. *Espaces Vectoriels Topologiques*. Deuxième edition. Chap.I,II. Paris: Hermann, 1965.
- [LIE] —. *Groupes et Algèbres de Lie*. Chap.I (1971),Chap.II (1972), Paris: Hermann.
- [E] —. *Théorie des Ensembles*. Paris: Hermann, 1970.
- [TG] —. *Topologie Générale*. Chap.I-IV. Paris: Hermann, 1971.
- [TG] —. *General Topology [Topologie Générale]*. Chap.V-X. Paris: Hermann, 1966.
- [DIX] Dixmier, Jacques. *Algèbres Enveloppantes*. Paris: Gauthier-Villars, 1974.
- [ET] Erné, Marcel. “Topologie.” Vorlesungsausarbeitung. Universität Hannover, 1984.
- [FICK] Fick, Eugen. *Einführung in die Grundlagen der Quantentheorie*. 5. Auflage. Wiesbaden: Aula, 1984.
- [HN] Hilgert, Joachim and Neeb, Karl-Hermann. *Lie Gruppen und Lie-Algebren*. Braunschweig: Vieweg, 1991.

[SAKU] Sakurai, Jun John. *Modern Quantum Mechanics*. N.p.: Addison-Wesley, 1985.

[TVS] Schaefer, Helmut H. *Topological Vector Spaces*. New York: Springer, 1970.

[WGT] Willard, Stephen. *General Topology*. N.p.: Addison-Wesley, 1970.

[MATH] Wolfram Research, Inc. *Mathematica*. Version 2.2. Champaign, Illinois: Wolfram Research, Inc., 1994. (Die Formeln der iterierten Vertauschungsrelationen wurden mit Hilfe von *Mathematica* gefunden.)

(N.p. (no place) bedeutet, daß kein Ort angegeben wurde.)