Anhang A

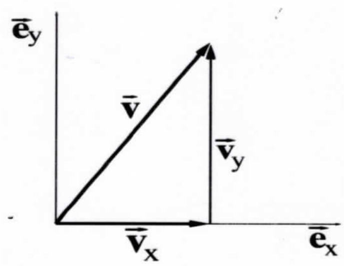
Vektoren und Operatoren

Wir benötigen für die Quantenmechanik eine Reihe mathematischer Werkzeuge mit einer eigenen, sehr effizienten Notation durch „Bra-" und „Ket-" Vektoren. Dabei spielt die lineare Algebra eine Schlüsselrolle. Wir werden zunächst einige Konzepte anschaulich besprechen und dann die mathematische Formalisierung vornehmen.

A.1 Heuristische Einführung

A.1.1 Vektoren in 2 Dimensionen

Zur Veranschaulichung der folgenden abstrakteren Konzepte seien zunächst einige bekannte Eigenschaften von Vektoren in Erinnerung gerufen. **Vektoren** $\vec{v}$ sind sind durch eine Länge und eine Richtung charakte-



$\vec{v}_x = \vec{e}_x \cdot v_x$

Abbildung A.1: *Ein Vektor $\vec{v}$ und seine Komponenten $\vec{v}_x$ und $\vec{v}_y$.*

risiert (nicht durch einen Ursprung). Sie existieren, z.B. durch eine Zeichnung, auch ohne ausdrückliche Angabe von Koordinaten.

Das **Skalarprodukt** zweier Vektoren

$$(\vec{v} \cdot \vec{w}) = |\vec{v}|\ |\vec{w}|\ \cos(\text{Winkel zwischen } \vec{v} \text{ und } \vec{w})$$

ist eine Zahl.

Eine **orthonormale Basis** ist in zwei Dimensionen durch zwei normierte orthogonale Vektoren wie $\vec{e}_x$ und $\vec{e}_y$ gegeben. Jeden Vektor kann man als Linearkombination der Basisvektoren schreiben:

$$\vec{v} \;=\; \vec{e}_x\, v_x \,+\, \vec{e}_y\, v_y \;=\; \vec{v}_x \,+\, \vec{v}_y$$

Die Koeffizienten v_x, v_y sind die **Koordinaten** von $\vec{v}$ **bezüglich der Basis** $\vec{e}_x$**,** $\vec{e}_y$. Diese Koordinaten kann man mit Hilfe des Skalarproduktes berechnen:

$$v_x = \vec{e}_x \cdot \vec{v} \qquad , \qquad v_y = \vec{e}_y \cdot \vec{v}$$

Also ist

$$\vec{v} \;=\; \vec{v}_x + \vec{v}_y \;=\; \vec{e}_x\,(\vec{e}_x \cdot \vec{v}) \;+\; \vec{e}_y\,(\vec{e}_y \cdot \vec{v})\,. \tag{A.1}$$

Hier ist $\vec{v}_x$ die **Projektion** des Vektors $\vec{v}$ auf den Basisvektor $\vec{e}_x$ und $\vec{v}_y$ ist die Projektion auf $\vec{e}_y$. Jeder Vektor lässt sich also als Summe der Projektionen auf die Basisvektoren schreiben. Man beachte, dass die Koeffizienten v_x und v_y von der Basis abhängen, aber der Vektor $\vec{v}$ selber nicht.

A.1.2 Bra- und Ket-Vektoren

Eine von Dirac eingeführte Schreibweise ist z.B. für Basistransformationen oder die Spezifikation von Operatoren sehr günstig. Wir schreiben Vektoren jetzt als **„Ket-Vektor"** $|v\rangle$, statt $\vec{v}$. Das **Skalarprodukt** $(\vec{w} \cdot \vec{v})$ zweier Vektoren schreiben wir jetzt als

$$\langle w|v\rangle$$

Dieses Skalarprodukt[1] kann man als eine lineare **Abbildung** auffassen, die dem Vektor $|v\rangle$ die *Zahl* $\langle w|v\rangle$ zuordnet. Für diese *Abbildung* verwendet

[1]Die Namen „Bra" und „Ket" entstanden als künstliche Aufteilung von „Bracket".

Es gibt eine eineindeutige Beziehung zwischen dem Ket vektor lw> und dem Bra-"Vektor <wl

Siehe Rieszsches Theorem auf Seite A11

man als Notation den **„Bra-Vektor"** $\langle w|$. Diese Abbildung $\langle w|$ angewandt auf den Vektor $|v\rangle$ ergibt die Zahl $\langle w|v\rangle$:

$$\boxed{\underbrace{\langle w|}_{\text{Abb.}}\ (\underbrace{|v\rangle}_{\text{Argument}}) \ \equiv\ \langle w|\,|v\rangle \ :=\ \underbrace{\langle w|v\rangle}_{\text{Zahl}}} \tag{A.2}$$

Wir schreiben die Gleichungen aus dem vorigen Abschnitt jetzt noch einmal mit Bra- und Ket-Vektoren:

Linearkombination von Basisvektoren: $|v\rangle \ = \ \underbrace{v_x\,|e_x\rangle}_{|v_x\rangle} \ + \ \underbrace{v_y\,|e_y\rangle}_{|v_y\rangle}$

Koeffizienten[2]: $v_x = \langle e_x|v\rangle \quad , \quad v_y = \langle e_y|v\rangle.$

Die Projektion von $|v\rangle$ auf den Basisvektor $|e_x\rangle$ ist also

$$|v_x\rangle \ = \ |e_x\rangle \ \langle e_x|v\rangle$$

und $v_x = \langle e_x|v\rangle$ *ist der Koeffizient von* $|v\rangle$ *in Richtung des Basisvektors* $|e_x\rangle$.

Man kann hier einen **Projektionsoperator**

$$\boxed{\hat{P}_{e_x} \ := \ |e_x\rangle\,\langle e_x|} \tag{A.3}$$

identifizieren, mit dem sogenannten *äußeren Produkt* von $|e_x\rangle$ und $\langle e_x|$. Die Abbildung $\langle e_x|$ ergibt bei Anwendung auf einen Vektor das Skalarprodukt, also eine Zahl. Diese Zahl multipliziert dann den Vektor $|e_x\rangle$:

$$|v_x\rangle \ = \ \underbrace{|e_x\rangle\,\overbrace{\langle e_x|}^{\text{Abb.}}}_{\text{Operator}}\ \underbrace{|v\rangle}_{\text{Vektor}} \ = \ \underbrace{|e_x\rangle}_{\text{Vektor}}\ \underbrace{\langle e_x|v\rangle}_{\text{Zahl}} \ .$$

Insgesamt: Operator angewandt auf Vektor ergibt Vektor.

Die Aufspaltung des Vektors $|v\rangle$ in seine Komponenten (A.1) lautet nun

$$\begin{aligned} |v\rangle \ = \ |v_x\rangle + |v_y\rangle \ &= \ |e_x\rangle\ \langle e_x|v\rangle \ + \ |e_y\rangle\ \langle e_y|v\rangle \\ &= \ \Big(|e_x\rangle\langle e_x| \ + \ |e_y\rangle\langle e_y|\Big)\ |v\rangle \\ &= \ \Big(\hat{P}_{e_x} \ + \ \hat{P}_{e_y}\Big)\ |v\rangle \ . \end{aligned} \tag{A.4}$$

[2]In der Quantenmechanik benötigen wir auch *komplexe* Koeffizienten (formale Beschreibung folgt). Man definiert $\langle w|v\rangle = \langle v|w\rangle^*$ (Kap. A.2.1). Das Skalarprodukt ist dadurch im zweiten Argument linear und im ersten Argument „antilinear".

Wir sehen, dass die Summe der Projektionsoperatoren bezüglich aller Basisvektoren, hier $\hat{P}_{e_x} + \hat{P}_{e_y}$, den Vektor $|v\rangle$ *unverändert* lässt. Diese Summe ist also der **Identitätsoperator**

$$\hat{P}_{e_x} + \hat{P}_{e_y} \;=\; |e_x\rangle\langle e_x| \;+\; |e_y\rangle\langle e_y| \;=\; \hat{1\!\!1}$$

In *höherdimensionalen Räumen* ist natürlich über *alle* (orthonormalen) Basisvektoren zu summieren, somit (siehe Kap. A.3.1)

$$\boxed{\hat{1\!\!1} \;=\; \sum_i \Big(|e_i\rangle\langle e_i| \Big)} \;. \tag{A.5}$$

Dort wird aus der ersten Zeile von (A.4) jetzt $|v\rangle = \sum_i |e_i\rangle\, v_i$ (siehe Gl. (A.9) mit den Koeffizienten $v_i = \langle e_i|v\rangle$ (siehe Gl. (A.13)).

Die Form (A.5) des Identitätsoperators ist oft sehr nützlich. Wir können sie zum Beispiel verwenden, um das Skalarprodukt $\langle w|v\rangle$ umzuschreiben:

$$\begin{aligned}
\langle w|v\rangle = \langle w|\;|v\rangle \;&=\; \langle w|\; \underbrace{\hat{1\!\!1}\;|v\rangle}_{|v\rangle} \\
&= \sum_i \langle w|\;\; |i\rangle\langle i|\;|v\rangle \\
&= \sum_i \langle w|i\rangle\;\; \langle i|v\rangle \\
&= \sum_i \langle i|w\rangle^*\;\; \langle i|v\rangle \\
&= \sum_i w_i^*\, v_i
\end{aligned} \tag{A.6}$$

Komplexe Konjugation wegen des
im allgemeinen komplexen Vektorraums:
siehe Fußnote auf der Vorseite

wobei w_i und v_i die *Koeffizienten* der Vektoren $|w\rangle$ und $|v\rangle$ in der jetzt kurz als $|i\rangle$ geschriebenen Basis sind. ("i" oder "e_i" sind nur *Namen* !). In einem reellen Vektorraum ist dies die gewohnte Form des Skalarproduktes $\vec{w} \cdot \vec{v} \;=\; \sum w_i\, v_i$. Manchmal ist auch die gewohnte Notation mit Zeilen und Spalten von *Koeffizienten* nützlich.

$$\sum_i w_i^*\, v_i \;=\; (w_1^*, w_2^*, ..) \begin{pmatrix} v_1 \\ v_2 \\ . \\ . \end{pmatrix} \;. \tag{A.7}$$

Man beachte: *eine Koeffizientenspalte bestimmt einen Vektor $|v\rangle$ nur bezüglich einer vorgegebenen Basis; sie ist auch hier* <u>nicht</u> *mit dem Vektor identisch !!*

A.2 Lineare Vektorräume

Wir stellen jetzt die eben anschaulich eingeführten Begriffe auf ein stärkeres mathematisches Fundament. Wir beschränken uns zunächst auf endlichdimensionale Vektorräume.

A.2.1 Der lineare Vektorraum

Def. A.1 (Lin. Vektorraum). *Menge V von Elementen (Vektoren), die bezüglich einer Addition der Vektoren miteinander und einer Multiplikation mit einem Skalar (d.h. einer Zahl) abgeschlossen ist. Für zwei beliebige Elemente $|v\rangle, |w\rangle$ des Vektorraums V und beliebige skalare Größen a, b soll gelten:*

1) *Abgeschlossenheit bezüglich Addition:* $|v\rangle + |w\rangle \in V$

2) *Abgeschlossenheit bezüglich Multiplikation:* $a|v\rangle \in V$

3) *Distributivgesetz der Multiplikation:* $a(|v\rangle + |w\rangle) = a|v\rangle + a|w\rangle$

4) *Distributivgesetz der Multiplikation:* $(a+b)|v\rangle = a|v\rangle + b|v\rangle$

5) *Assoziativgesetz der Multiplikation:* $b(a|v\rangle) = (ab)|v\rangle$

6) *Kommutativgesetz der Addition:* $|w\rangle + |v\rangle = |v\rangle + |w\rangle$

7) *Assoziativgesetz der Addition:* $|w\rangle + (|v\rangle + |u\rangle) = (|w\rangle + |v\rangle) + |u\rangle$

8) *Existenz des Nullvektors* $|0\rangle : |v\rangle + |0\rangle = |v\rangle \ ; |0\rangle \in V$

9) *Existenz des inversen Elements* $|-v\rangle : |v\rangle + |-v\rangle = |0\rangle \ ; \forall |v\rangle \in V$

10) *Bei der Multiplikation mit der Eins soll gelten:* $1 \cdot |v\rangle = |v\rangle$

Die skalaren Koeffizienten a, b sind Elemente des Körpers, über dem der Vektorraum definiert ist.

Koeffizienten $a, b \in \mathbb{R} \Rightarrow$ *reeller Vektorraum*
Koeffizienten $a, b \in \mathbb{C} \Rightarrow$ *komplexer Vektorraum*
Die Vektoren selber sind weder reell noch komplex!

Aus den Eigenschaften eines Vektorraumes folgt:

- $|0\rangle$ ist eindeutig (Der Nullvektor I0> wird in der Praxis nie geschrieben; stattdessen schreibt man i.d.R. die Zahl 0. Der Name I0> wird anders verwendet, z.B. für den Grundzustand eines Systems (siehe Kap. 4))
- $0|0\rangle = |0\rangle$ 0 Iv> = I0>
- $|-v\rangle$ ist eindeutig

Name!

- $|-v\rangle = -|v\rangle$ bessere Schreibweise

Beispiele für Vektorräume:

A) Vektoren im $\mathbb{R}^n$

Die bekannten Vektoren (Pfeile) mit Länge und Richtung.
Addition bedeutet verbinden der Pfeile: Ende des einen Pfeils ist Anfang des zweiten.
Multiplikation mit einem Skalar a bedeutet Streckung um den Faktor a.
Nullvektor ist der Vektor der Länge 0.
Inverser Vektor ist ein Pfeil in umgekehrter Richtung.

B) 2x2 Matrizen

Auch 2x2 Matrizen repräsentieren Vektoren im verallgemeinerten Sinn.Wir definieren eine Basis

$$|e_1\rangle = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix};\ |e_2\rangle = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix};\ |e_3\rangle = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix};\ |e_4\rangle = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$$

In dieser Basis kann man die Einträge von 2×2 Matrizen als Koeffizienten von Vektoren auffassen:

Addition: $\begin{pmatrix} v_{11} & v_{12} \\ v_{21} & v_{22} \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} w_{11} & w_{12} \\ w_{21} & w_{22} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} v_{11}+w_{11} & v_{12}+w_{12} \\ v_{21}+w_{21} & v_{22}+w_{22} \end{pmatrix}$

Multiplikation mit einem Skalar: $a \begin{pmatrix} v_{11} & v_{12} \\ v_{21} & v_{22} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} av_{11} & av_{12} \\ av_{21} & av_{22} \end{pmatrix}$

Nullvektor: $\begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}$

Inverses Element: $\begin{pmatrix} -v_{11} & -v_{12} \\ -v_{21} & -v_{22} \end{pmatrix}$

Damit sind alle Eigenschaften eines Vektorraumes erfüllt.

Def. A.2 (Lineare Unabhängigkeit). *Eine Menge von Vektoren $|v_i\rangle$ mit $i = 1, 2 ... n$ heißt linear unabhängig, wenn gilt:*

$$\sum_{i=1}^{n} \alpha_i |v_i\rangle = |0\rangle \quad \Leftrightarrow \quad \alpha_i \equiv 0 \quad . \tag{A.8}$$

Ansonsten heißt sie linear abhängig.

Zum Beispiel sind zwei nicht parallele Vektoren (Pfeile) in der Ebene linear unabhängig. Jeder weitere Vektor hingegen muss dann linear abhängig sein, da er durch Linearkombination der beiden anderen Vektoren aufgespannt werden kann. Die Dimension der Ebene ist lediglich zwei.
Das bringt uns zur allgemeinen Definition der Dimension:

Def. A.3 (Dimension). *Ein Vektorraum hat die Dimension n, wenn es in ihm maximal n linear unabhängige Vektoren gibt.*

Notation: $V^n(\mathbb{R})$ n-dimensionaler reeller Vektorraum
$V^n(\mathbb{C})$ n-dimensionaler komplexer Vektorraum

Vektorräume können auch ∞-dimensional sein.

Beispiel:
Der Vektorraum der 2x2 Matrizen ist 4-dimensional, da die eben definierten 4 Matrizen $|e_i\rangle$ offensichtlich linear unabhängig sind und hieraus alle 2x2-Matrizen aufgebaut werden können. Dies gilt sowohl im reellen als auch im komplexen Fall.

Theorem A.1. *Jeder Vektor $|v\rangle$ in einem n-dimensionalen Vektorraum kann als Linearkombination von n linear unabhängigen Vektoren $|e_i\rangle$ $i = 1, 2 ..., n$ geschrieben werden:*

$$\boxed{|v\rangle = \sum_{i=1}^{n} v_i \, |e_i\rangle} \tag{A.9}$$

Def. A.4 (Basis). *Eine Menge von n linear unabhängigen Vektoren in V^n heißt Basis des V^n.*

Def. A.5. *Die Entwicklungskoeffizienten v_i heißen auch Koordinaten des Vektors in der gewählten Basis.*

Theorem A.2. *Die Entwicklung eines Vektors in einer linear unabhängigen Basis ist eindeutig.*

Achtung: In diesem Skript sind alle Basen auch Vollständige Ortho-Normalsysteme[3] *(VON). Wir werden oft "Basis" statt (korrekter) VON schreiben.*

$|v\rangle$ ist die abstrakte Notation eines Vektors. Erst in einer gewählten Basis wird der Vektor durch konkrete Koeffizienten spezifiziert. Wird die Basis gewechselt, ändern sich die Zahlenwerte, aber der Vektor und die Beziehungen mehrerer Vektoren untereinander bleiben immer dieselben. In den Komponenten gelten die altbekannten Regeln für Vektoren:

Mit: $|v\rangle = \sum_{i=1}^{n} v_i\ |e_i\rangle$ und $|w\rangle = \sum_{i=1}^{n} w_i\ |e_i\rangle$

gilt: $|v\rangle + |w\rangle = \sum_{i=1}^{n} (v_i + w_i)\ |e_i\rangle$

Def. A.6 (Unterraum). *Gegeben sei ein Vektorraum V. Eine Untermenge von V, die selber einen Vektorraum bildet, wird Unterraum genannt.*

Addition und Multiplikation sind im Unterraum genauso definiert wie im Vektorraum V.

A.2.2 Das Skalarprodukt

Def. A.7 (Skalarprodukt). *Das Skalarprodukt ist eine* komplexwertige *Funktion zweier Vektoren $|v\rangle$,$|w\rangle$. Es wird mit $\langle v|w\rangle$ gekennzeichnet und hat folgende Eigenschaften:*

- $\langle v|w\rangle = \langle w|v\rangle^*$
- $\langle v|v\rangle \geq 0\ ;\quad \langle v|v\rangle = 0 \ \Leftrightarrow\ |v\rangle = |0\rangle$
- *Das Skalarprodukt ist linear im 2.Argument:*
  Mit $|x\rangle := \alpha|v\rangle + \beta|w\rangle$ gilt
  $\langle u|x\rangle = \alpha\langle u|v\rangle + \beta\langle u|w\rangle$

[3]Ausnahme: kohärente Zustände, Kap. 4.9.6 (vollständig, aber nicht orthonormal)

: "übervollständig"

- *Es ist anti-linear im 1.Argument:*
  $\langle x|u\rangle = \alpha^* \langle v|u\rangle + \beta^* \langle w|u\rangle$

Die vierte Eigenschaft folgt unmittelbar aus den ersten drei Eigenschaften. Es kann leicht überprüft werden, dass das bekannte Skalarprodukt von Vektoren im $\mathbb{R}^n$ diese Eigenschaften erfüllt. Mit Hilfe des Skalarprodukts lässt sich nun in Anlehnung an die Bedeutung der Vektoren des $\mathbb{R}^n$ eine Norm (Länge) von Vektoren definieren.

Def. A.8 (Norm). *Die Norm eines Vektors $|v\rangle$ ist:* $\|v\| \equiv \Big\| \, |v\rangle \, \Big\| = \sqrt{\langle v|v\rangle}$

(Man beachte die oft übliche abkürzende Schreibweise $||v||$) Ebenso lässt sich die Eigenschaft der Orthogonalität mit Hilfe des Skalarprodukts verallgemeinern.

Def. A.9 (Orthogonalität). *Zwei Vektoren $|v\rangle$,$|w\rangle$ heißen orthogonal, wenn gilt:* $\langle v|w\rangle = 0$

Def. A.10 (Orthonormalbasis). *Basisvektoren $|e_i\rangle$ mit $\|e_i\| = 1 \;\; \forall\, i$ und mit* $\boxed{\langle e_i|e_j\rangle = \delta_{ij}}$ $\;\forall\, i,j$ *heißen orthonormal. Eine solche Basis heißt Orthonormalbasis.*

Beispiel:
Wir betrachten das Skalarprodukt der Vektoren $|v\rangle$,$|w\rangle$ in einer Orthonormalbasis $|e_i\rangle$ und leiten noch einmal den schon zu Beginn angesprochenen Ausdruck für $\langle v|w\rangle$ her. Wir nehmen nur Umformungen nach Def.A.7 vor. Es sei: $\langle e_i|e_j\rangle = \delta_{ij}$, $|v\rangle = \sum_i v_i|e_i\rangle$, $|w\rangle = \sum_j w_j|e_j\rangle$. Dann gilt:

$$\begin{aligned} \langle v|w\rangle &= \sum_{i,j} v_i^* w_j \,\langle e_i|e_j\rangle \\ &= \sum_{i,j} v_i^* w_j \,\delta_{ij} \\ &= \sum_{i} v_i^* w_i \end{aligned}$$

durch Einsetzen der Linearität bzw. Antilinearität

Im $\mathbb{R}^n$ wird die letzte Zeile zu: $\vec{a} \cdot \vec{b} = \sum_i a_i b_i$

Die resultierende *Form* $\sum_i v_i^* w_i$ des Skalarprodukts gilt in jeder Orthonormalbasis. Die Koeffizienten v_i, w_i hängen von der Basis ab, nicht aber der *Wert* des Skalarproduktes !

Das Skalarprodukt erfüllt zwei wichtige Ungleichungen:

Schwarzsche Ungleichung: $$|\langle v|w\rangle|^2 \;\leq\; \langle v|v\rangle\langle w|w\rangle \;=\; \|v\|^2\,\|w\|^2 \tag{A.10}$$

Dreiecksungleichung: $$\|v\| - \|w\| \;\leq\; \|(|v\rangle + |w\rangle)\| \;\leq\; \|v\| + \|w\| \tag{A.11}$$

Beispiel:

z.B. diskrete Werte von x: x1 x2 x3 mit Funktionswerten f(x1), f(x2), f(x3)r

$f(x)$ seien die Funktionswerte eine im Intervall $0 \leq x \leq L$ definierten komplexwertigen Funktion f, die man als Koeffizienten eines Vektors $|f\rangle$ auffassen kann (s.a. später). Die Addition und skalare Multiplikation seien definiert mit:

$$(f+g)(x) \;:=\; f(x) + g(x) \text{ (punktweise Addition)}$$
$$(\alpha f)(x) \;:=\; \alpha f(x)$$

Das Nullelement hat die Funktionswerte: $f(x) \equiv 0 \quad \forall\, x \in [0, L]$
Das inverse Element hat die Funktionswerte: $-f(x)$
Ein mögliches Skalarprodukt zweier solcher Vektoren $|f\rangle$,$|g\rangle$ ist:

$$\langle f|g\rangle = \int_0^L f^*(x)g(x)dx \tag{A.12}$$

siehe "Ortsraum" → (später)

A.2.3 Entwicklung in einer Orthonormalbasis

Wir gehen von der Darstellung des Vektors $|v\rangle$ in der vollständigen Orthonormal-Basis $|e_i\rangle$ gemäß Theorem A.1 aus:

$$|v\rangle = \sum_{i=1}^{n} v_i\;|e_i\rangle$$

Wir berechnen noch einmal die Koeffizienten v_j von $|v\rangle$ in dieser Basis. Wir multiplizieren dazu die Gleichung von links mit $\langle e_j|$ und erhalten die Formel zur Berechnung der Entwicklungskoeffizienten, nämlich gerade das Skalarprodukt mit den Basisvektoren:

$$\langle e_j|v\rangle = \langle e_j|\left(\sum_{i=1}^{n} v_i|e_i\rangle\right) = \sum_{i=1}^{n} v_i\langle e_j|e_i\rangle = \sum_{i=1}^{n} v_i\delta_{ij} = v_j \tag{A.13}$$

A.2.4 Der Dualraum

Zu jedem linearen Vektorraum V existiert ein sogenannter Dualraum **linearer Funktionale auf** V.
Ein *Funktional* weist jedem Vektor $|w\rangle$ einen *skalaren* Wert zu.
Ein *lineares* Funktional erfüllt zusätzlich:

$$F(\, a|v\rangle + b|w\rangle \,) \;=\; aF(|v\rangle) + bF(|w\rangle) \quad \forall a, b \in \mathbb{C} \quad \text{und} \quad \forall |v\rangle, |w\rangle$$

Ein einfaches Beispiel für ein lineares Funktional ist das Integral. Es weist jeder Funktion f einen Skalar zu und ist linear.
Die *Menge aller linearen Funktionale* bildet einen linearen Vektorraum V^* (den Dualraum), wenn wir auch ihre Summe definieren:

$$(F_1 + F_2)\,(|v\rangle) \;=\; F_1(|v\rangle) \;+\; F_2(|v\rangle)$$

Das folgende Theorem setzt nun den Vektorraum und den dazugehörigen Dualraum in eine eindeutige Beziehung zueinander:

Theorem A.3 (Rieszsches Theorem). *V und V^* sind isomorph, d.h. es gibt eine eineindeutige Beziehung zwischen den linearen Funktionalen F in V^* und den Vektoren $|w\rangle$ in V.*
Alle linearen Funktionale haben die Form $F\,(|v\rangle) = \langle w|v\rangle$, wobei $|w\rangle$ ein fester Vektor und $|v\rangle$ ein beliebiger Vektor ist.

Ein Funktional F lässt sich deswegen mit einem „Bra-Vektor" $\langle w| \in V^*$ identifizieren, der auf einen Vektor $|v\rangle \in V$ wirkt, mit der suggestiven Diracschen Schreibweise

$$\langle w| \;\; |v\rangle \;:=\; \langle w|v\rangle\,.$$

Die Antilinearität des Skalarproduktes im 1. Argument führt auch hier zu einer anti-linearen Beziehung: Der (Ket-)Vektor $c\,|v\rangle$ korrespondiert zum Funktional (=„Bra-Vektor") $c^*\,\langle v|$!

4.3.2021

1) Beispiel für das Skalarprodukt zweier Vektoren: Es seien I1> und I2> orthonormale (Basis-)vektoren,
d.h. <1I2> = <2I1> = 0 und <1I1> = <2I2> = 1
Wir betrachten die beiden Vektoren Iu> = 2 I1> + 3i I2> und Iv> = 4 I1> + 5 I2>
Skalarprodukt: <uIv> = (2 <1I **- 3i** <2I) (4 I1> + 5 I2>) = (ausmultiplizieren) = 2·4 **<1I1>** + 2·5 <1I2> -3i·5 **<2I2>** -3i·4 <2I1>
= 8 · 1 + 0 - 15i · 1 - 0 = 8 - 15i
2) Rezept für orthogonale Vektoren: Es sei allg. Iu> = a I1> + b I2). Dazu orthogonal ist Iv> = b* I1> - a* I2>, denn <uIv> = a* b* - b* a* = 0
Beispiel für die Koeffizienten: (cos, sin) und (sin, -cos)

A.2.5 Folgen und Konvergenz

Aus der Norm $\|v\|$ lässt sich ein Abstandsbegriff zweier Vektoren $|w\rangle$ und $|v\rangle$ und eine Metrik im Vektorraum definieren:

Def. A.11 (Abstand). *Der Abstand zweier Vektoren $|v\rangle$, $|w\rangle$ ist definiert durch:*

$$d\big(\,|v\rangle, |w\rangle\,\big) \;\equiv\; d(v,w) \;:=\; \|\,|v\rangle - |w\rangle\,\| \tag{A.14}$$

Diese Abstandsdefinition erfüllt die notwendigen Bedingungen einer Metrik:

1. $d(v,w) \geq 0 \quad ; \quad d(v,w) = 0 \Leftrightarrow |w\rangle = |v\rangle$
2. $d(v,w) \leq d(v,u) + d(u,w) \quad \forall\, u \in V$ (Dreiecksungleichung)
3. $d(v,w) = d(w,v)$

Mit Hilfe des Abstandsbegriffes ist es erst möglich, über die Konvergenz von Folgen zu sprechen.

Def. A.12 (konvergente Folge). *Eine Folge $|v_n\rangle$ mit $|v_n\rangle \in V$, $n \in \mathbb{N}$ heißt konvergent, wenn gilt:*

- $\exists\, |v\rangle \in V$ *mit*
- $\lim\limits_{n\to\infty} d(v_n, v) = 0$
- $|v\rangle$ *ist eindeutig*

Def. A.13 (Cauchy-Folge). *Im Gegensatz zu einer konvergenten Folge muss eine Cauchyfolge kein Grenzelement in V haben. Es muss aber gelten, dass $d(v_m, v_n) \to 0$ für $m, n \to \infty$. Mit anderen Worten:*
Für jedes $\epsilon > 0$ existiert ein N_ϵ mit $d(v_m, v_n) < \epsilon \quad \forall n, m > N_\epsilon$

Die Tatsache, dass der Abstand zwischen den Vektoren einer Cauchy-Folge gegen Null geht, heißt noch nicht, dass das Grenzelement existiert. Z.B. ist $(1 + \frac{a}{n})^n$ eine Cauchy-Folge im Raum der rationalen Zahlen; das Grenzelement e^a existiert aber nicht in diesem Raum.

A.3 Lineare Operatoren

Ein Operator $\hat{A}$ bildet Vektoren auf Vektoren ab,
d.h. Wenn $|v\rangle$ ein Vektor ist, ist auch $|w\rangle := \hat{A}\,|v\rangle$ ein Vektor.
Ein Operator ist ausschließlich durch seine Wirkung auf alle $|v\rangle \in V$ (bzw. alle Vektoren seines Definitionsbereiches) definiert.

Da wir es in der Quantenmechanik nur mit linearen Operatoren zu tun haben werden, werden wir sie in Zukunft einfach als Operatoren bezeichnen. Wir notieren Operatoren mit einem Hut $\hat{}$.

Def. A.14 (Linearer Operator). *Ein linearer Operator erfüllt*

$$\hat{A}\big(a\,|v\rangle + b\,|w\rangle\big) = a\hat{A}\,|v\rangle + b\hat{A}\,|w\rangle \tag{A.15}$$

Es genügt somit, die Wirkung eines linearen Operators auf einen Satz von *Basisvektoren* zu kennen, da jeder beliebige Vektor als Linearkombination der Basisvektoren geschrieben werden kann !
Die Identität zweier Operatoren ($\hat{A} = \hat{B}$) bedeutet, dass $\hat{A}\,|v\rangle = \hat{B}\,|v\rangle$ für alle Vektoren aus dem Definitionsbereich gilt, der für beide Operatoren gleich sein muss.

Def. A.15 (Summe und Produkt von Operatoren).

$$(\hat{A} + \hat{B})\ |v\rangle \ = \ \hat{A}\,|v\rangle \ + \ \hat{B}\,|v\rangle \tag{A.16}$$

$$\hat{A}\hat{B}\ |v\rangle \ = \ \hat{A}\ (\hat{B}\ |v\rangle) \tag{A.17}$$

Beispiel: Der Ausdruck $|v\rangle\langle w|$ ist ein linearer Operator ! Wenn man ihn auf einen Vektor $|u\rangle$ anwendet, erhält man wieder einen Vektor:

$$|v\rangle\langle w|\,|u\rangle \ = \ \underbrace{|v\rangle}_{\text{Vektor}}\ \underbrace{\langle w|u\rangle}_{\text{Zahl}}\ .$$

Summen solcher Operatoren sind ebenfalls wieder Operatoren.

Def. A.16 (Inverser Operator). *Das Inverse $\hat{O}^{-1}$ eines Operators $\hat{O}$ ist definiert durch*

$$\hat{O}\hat{O}^{-1} \ = \ \hat{O}^{-1}\hat{O} \ = \ \hat{1\!\!1} \tag{A.18}$$

Anmerkung: **Beispiel für linksinvers ungleich rechtinvers**:
Die **nicht-quadratische** Matrix M = (1,1) (Zeile) bildet den Spaltenvektor (a,b) auf den einkomponentigen Vektor (a+b) ab.
Das kann man i.a. nicht rückgäng machen, daher gibt es kein Linksinverses.
Es gibt aber viele Rechtsinverse, z.B. die Matrix (=Spalte) (1,0). Sie bildet (c) auf die Spalte (c,0) ab, und M macht daraus wieder (c+0) = (c)

Es existiert keineswegs immer das Inverse eines Operators! Es kann auch passieren, dass kein Inverses bzw. nur das Rechts- oder Linksinverse eines Operators existiert.
Durch Einsetzen sieht man, dass gilt

$$(\hat{A}\hat{B}\cdots\hat{Z})^{-1} = \hat{Z}^{-1}\cdots\hat{B}^{-1}\hat{A}^{-1} \tag{A.19}$$

A.3.1 Einheitsoperator

Wir zeigen noch einmal allgemein die schon zu Beginn eingeführte Darstellung des Einheitsoperators. Es wurde bereits gezeigt, dass sich ein Vektor in einer Basis durch

$$|v\rangle = \sum_{i=1}^{n} v_i \, |e_i\rangle$$

darstellen lässt, und dass die Entwicklungskoeffizienten mit

$$v_i = \langle e_i|v\rangle$$

berechnet werden. Durch Einsetzen ergibt sich damit

$$|v\rangle = \sum_{i=1}^{n} \underbrace{\langle e_i|v\rangle}_{\text{Zahl}} \, |e_i\rangle = \sum_{i=1}^{n} |e_i\rangle \, \langle e_i|v\rangle = \sum_{i=1}^{n} \underbrace{|e_i\rangle\overbrace{\langle e_i|}^{\text{Abb.}}}_{\text{Operator}} \, |v\rangle$$

Der letzte Schritt ist wegen des eingeführten Dualraumes möglich, denn das Skalarprodukt haben wir als eine Abbildungsvorschrift auf Vektoren $|v\rangle$ gedeutet, die mit dem Bra-Vektor $\langle e_i|$ bezeichnet wird. Ein Vergleich der linken und rechten Seite ergibt schließlich

$$\hat{1} = \sum_{i=1}^{n} |e_i\rangle\langle e_i| \tag{A.20}$$

Das Ergebnis ist für jede beliebige orthonormale Basis gültig.

A.3.2 Projektionsoperator

Def. A.17 (Projektionsoperator). *Ein Projektionsoperator ist über die Eigenschaft* $\hat{P}^2 \equiv \hat{P}\,\hat{P} = \hat{P}$ *(Idempotenz) definiert.*

Wir beweisen leicht, dass $\hat{P}_i := |e_i\rangle\langle e_i|$ ein Projektionsoperator ist, wenn $\langle e_i|e_i\rangle = 1$ gilt:

$$\hat{P}_i^{\,2} = \underbrace{|e_i\rangle\langle e_i|}_{P} \cdot \underbrace{|e_i\rangle\langle e_i|}_{P} = |e_i\rangle \underbrace{\langle e_i|e_i\rangle}_{1} \langle e_i| = |e_i\rangle\langle e_i| = \hat{P}_i$$

Der Einheitsoperator Gl. (A.20) ist ebenfalls ein Projektionsoperator, denn es gilt $\hat{\mathbb{1}}^2 = \hat{\mathbb{1}}$.

Beispiel:

Auch die Summe $\hat{P} := \sum_{i=1}^{L} |e_i\rangle\langle e_i|$ mit $\langle e_i|e_j\rangle = \delta_{ij}$ über einen *Teil* der Basisvektoren ist ein Projektionsoperator:

$$\hat{P}^2 = \sum_{i,j=1}^{L} |e_i\rangle\langle e_i||e_j\rangle\langle e_j| = \sum_{i,j=1}^{L} |e_i\rangle\delta_{ij}\langle e_j| = \sum_{i=1}^{L} |e_i\rangle\langle e_i| = \hat{P}$$

Er projiziert in den *Unterraum*, der durch die Vektoren $|e_i\rangle$, $(i = 1, \dots, L)$ aufgespannt wird. Wir berechnen seine Wirkung auf einen Vektor $|v\rangle = \sum_{i=1}^{n} v_i|e_i\rangle$:

$$\begin{aligned}
\hat{P}\,|v\rangle &= \sum_{j=1}^{L} |e_j\rangle\langle e_j| \sum_{i=1}^{n} v_i|e_i\rangle \\
&= \sum_{i=1}^{n} v_i \left(\sum_{j=1}^{L} |e_j\rangle\langle e_j| \right) |e_i\rangle \\
&= \sum_{i=1}^{n} v_i \left(\sum_{j=1}^{L} |e_j\rangle\langle e_j|e_i\rangle \right) \\
&= \sum_{i=1}^{n} v_i \sum_{j=1}^{L} |e_j\rangle\delta_{ij} \\
&= \sum_{j=1}^{L} v_j\,|e_j\rangle
\end{aligned}$$

Ein solcher Operator kann z.B. vom dreidimensionalen Raum auf die von den Vektoren $|e_1\rangle$, $|e_2\rangle$ aufgespannte zweidimensionale Ebene projizieren.

A.3.3 Matrixdarstellung von Operatoren

Jeder Operator in einem n-dimensionalen Vektorraum kann als eine $n \times n$-Matrix in einer Basis $|e_i\rangle$ dargestellt werden. Wir führen zunächst eine Rechnung auf Operatorniveau durch, d.h. ohne den Operator auf einen Vektor $|v\rangle$ anzuwenden. Wir multiplizieren den Operator von links und rechts mit dem Einheitsoperator:

$$\hat{O} = \underbrace{\sum_i |e_i\rangle\langle e_i|}_{\hat{\mathbf{1}}} \; \hat{O} \; \underbrace{\sum_j |e_j\rangle\langle e_j|}_{\hat{\mathbf{1}}} = \sum_{ij} \underbrace{|e_i\rangle}_{\text{Vektor}} \; \underbrace{\langle e_i| \overbrace{\hat{O}|e_j\rangle}^{\text{Vektor}}}_{\text{Zahl } O_{ij}} \; \underbrace{\langle e_j|}_{\text{Abb.}} \tag{A.21}$$

Daher ist der Operator $\hat{O}$ eine Linearkombination von Operatoren $|e_i\rangle\langle e_j|$:

$$\boxed{\hat{O} \;=\; \sum_{ij} O_{ij}\, |e_i\rangle\langle e_j|} \quad \text{mit Koeffizienten} \quad \boxed{O_{ij} \;=\; \langle e_i|\hat{O}|e_j\rangle}$$

und es gilt daher zusammen mit Gl. (A.13)

- Die Koeffizienten v_i eines Vektors $|v\rangle$ in einer Basis $|e_i\rangle$ erhält man durch Multiplikation von links mit $\langle e_i|$: $v_i = \langle e_i|v\rangle$.
- Die Koeffizienten O_{ij} eines Operators $\hat{O}$ in einer Basis $|e_i\rangle$ erhält man durch Multiplikation von links und rechts mit $\langle e_i|$ und $|e_j\rangle$:

$$O_{ij} \;=\; \langle e_i|\hat{O}|e_j\rangle$$

6.3.2023

- **Matrixdarstellung von $\hat{O}\,|v\rangle$:**

$$|\tilde{v}\rangle := \hat{O}|v\rangle = \sum_i |e_i\rangle \underbrace{\sum_j O_{ij} \underbrace{\langle e_j|v\rangle}_{v_j}}_{\tilde{v}_i}$$

Multiplizieren wir dies von links mit $\langle e_l|$, so ergibt sich (oder auch sofort durch Identifikation von tilde v_i)

$$\tilde{v}_l \equiv \langle e_l|\tilde{v}\rangle = \sum_j O_{lj}\, v_j \,.$$

Dies ist eine *Matrixmultiplikation*: Neuer Koeffizientenvektor = Matrix mal Spalte des alten Koeffizientenvektors.

- **Matrixdarstellung von $\langle w|\,\hat{O}\,|v\rangle$:**
Wenn wir statt mit $\langle e_l|$ von links mit $\langle w|$ multiplizieren, erhalten wir

$$\langle w|\,\hat{O}\,|v\rangle = \sum_{ij} w_i^*\, O_{ij}\, v_j$$

Dies kann man als Zeile mal Matrix mal Spalte schreiben !

Genauso kann man in abzählbar unendlich-dimensionalen Vektorräumen vorgehen. Wir müssen dann fordern, dass die auftretenden unendlichen Summen alle konvergieren.

A.3.4 Kommutator

Die Operator-Multiplikation ist assoziativ $\hat{A}(\hat{B}\hat{C}) = (\hat{A}\hat{B})\hat{C}$
aber im allgemeinen nicht kommutativ $\hat{A}\hat{B} \neq \hat{B}\hat{A}$.
Beispiel: Bei 2 aufeinanderfolgenden Drehungen im dreidimensionalen Raum um verschiedene Achsen kommt es auf die Reihenfolge der Drehungen an.

Deswegen definieren wir die folgende in der Quantenmechanik ganz wichtige Größe

Def. A.18 (Kommutator). *Der Kommutator zweier Operatoren $\hat{A}$, $\hat{B}$ ist*

$$\left[\hat{A}, \hat{B}\right] := \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A} \tag{A.22}$$

Eine Eigenschaft von Kommutatoren ist für praktische Rechnungen sehr nützlich

$$\boxed{[\hat{A}\hat{B},\hat{C}] \;=\; \hat{A}[\hat{B},\hat{C}] + [\hat{A},\hat{C}]\hat{B} \qquad , \qquad\qquad \text{(A.23)}}$$

wobei $\hat{A}$, $\hat{B}$ und $\hat{C}$ beliebige Operatoren sind. Beweis durch Einsetzen !

A.3.5 Spur eines Operators

Def. A.19 (Spur). *Die Spur eines Operators ist definiert als*

$$Sp\,\hat{A} \;\equiv\; tr\,\hat{A} \;:=\; \sum_{i=1}^{n} \langle e_i|\hat{A}|e_i\rangle$$

Sie ist die Summe über die Diagonalelemente in einer Matrixdarstellung des Operators. Sie ist linear in $\hat{A}$. Hierbei ist $|e_i\rangle$ eine beliebige vollständige Orthonormalbasis.

Orthonormal-

Theorem A.4. *Die Spur eines Operators ist in jeder Basis gleich.*

Beweis durch Einfügen des Einheitsoperators:

alte Orthonormalbasis: $|e_i\rangle$
neue Orthonormalbasis: $|e'_i\rangle$

$$\begin{aligned}
Sp\,\hat{A} \;=\; \sum_i \langle e_i|\hat{A}|e_i\rangle &= \sum_i \langle e_i|\hat{A}\Big(\sum_j |e'_j\rangle\langle e'_j|\Big)|e_i\rangle && \text{Einheitsoperator eingeschoben}\\
&= \sum_{i,j} \langle e_i|\hat{A}\,|e'_j\rangle \quad \langle e'_j|e_i\rangle && \text{Produkt zweier Zahlen ✓}\\
&= \sum_{i,j} \langle e'_j|e_i\rangle \quad \langle e_i|\hat{A}|e'_j\rangle && \text{Zahlen vertauscht}\\
&= \sum_j \langle e'_j|\Big(\sum_i |e_i\rangle\langle e_i|\Big)\hat{A}\,|e'_j\rangle && \text{Einheitsoperator identifiziert}\\
&= \sum_j \langle e'_j|\hat{A}\,|e'_j\rangle
\end{aligned}$$

Theorem A.5. *Die Spur ist invariant bezüglich zyklischer Vertauschung.*

$$Sp\left(\hat{A}\hat{B}\hat{C}\cdots\hat{Z}\right) = Sp\left(\hat{B}\hat{C}\cdots\hat{Z}\hat{A}\right) = Sp\left(\hat{C}\cdots\hat{Z}\hat{A}\hat{B}\right) \tag{A.24}$$

Folgerung:
Spur eines Kommutators ist Null

Sp (AB) = (zyklisch vertauschen) Sp(BA)
==>
Sp(AB -BA) = 0

Aber nicht für mehr als zwei Faktoren:
Sp (ABC) = Summe_ijk A_ij **B_jk C_ki**
= Summe_ijk A_ij C_ki B_jk
i.a. **ungleich** Summe_ijk A_ij **C_jk B_ki**
= **Sp (ACB)**

weil **(BC)_ji**
ungleich **(CB)_ji**

Beweis wieder durch Einfügen des Einheitsoperators:

$$\begin{aligned}
Sp\left(\hat{A}\hat{B}\hat{C}\cdots\right) &= \sum_i \langle e_i|\hat{A}\hat{B}\hat{C}\cdots|e_i\rangle = \sum_i \langle e_i|\hat{A}\mathbb{1}\hat{B}\hat{C}\cdots|e_i\rangle \\
&= \sum_i \langle e_i|\hat{A}\left(\sum_j |e_j\rangle\langle e_j|\right)\hat{B}\hat{C}\cdots|e_i\rangle \\
&= \sum_{i,j} \langle e_i|\hat{A}|e_j\rangle \quad \langle e_j|\hat{B}\hat{C}\cdots|e_i\rangle \quad \text{Produkt zweier Zahlen} \\
&= \sum_{i,j} \langle e_j|\hat{B}\hat{C}\cdots|e_i\rangle \quad \langle e_i|\hat{A}|e_j\rangle \quad \text{Zahlen vertauscht} \\
&= \sum_j \langle e_j|\hat{B}\hat{C}\cdots\left(\sum_i |e_i\rangle\langle e_i|\right)\hat{A}|e_j\rangle \\
&= \sum_j \langle e_j|\hat{B}\hat{C}\cdots\mathbb{1}\hat{A}|e_j\rangle = \sum_j \langle e_j|\hat{B}\hat{C}\cdots\hat{A}|e_j\rangle \\
Sp\left(\hat{A}\hat{B}\hat{C}\cdots\right) &= Sp\left(\hat{B}\hat{C}\cdots\hat{A}\right) \\
&\text{etc}
\end{aligned}$$

Mit Hilfe der zyklischen Vertauschbarkeit bzw. durch Einsetzen der Definition zeigt man auch die folgenden Beziehungen

$$\begin{aligned}
Sp\left(\hat{A}\,|v\rangle\langle w|\right) &= \langle w|\hat{A}|v\rangle && \text{(A.25)} \\
Sp\left(\,|v\rangle\langle w|\,\right) &= \langle v|w\rangle^* = \langle w|v\rangle && \text{(A.26)} \\
Sp\,\hat{A}^{\text{transp}} &= Sp\,\hat{A} && \text{(A.27)} \\
Sp\,\hat{A}^\dagger &= (Sp\,\hat{A}\,)^* && \text{(A.28)}
\end{aligned}$$

In der letzten Zeile kommt der im Folgenden definierte adjungierte Operator $\hat{A}^\dagger$ vor.

A.3.6 Adjungierter Operator

Wir definieren zunächst, wie ein Operator nach *links* wirkt, nämlich so, dass seine Matrixelemente zwischen beliebigen Vektoren unverändert sind:

$$\left(\langle u|\hat{A}\right)|v\rangle \;:=\; \langle u|\left(\hat{A}|v\rangle\right) \;. \tag{A.29}$$

Den adjungierten Operator $\hat{A}^\dagger$ kann man über seine Matrixelemente definieren:

$$\boxed{\langle v|\,\hat{A}^\dagger\,|u\rangle \;:=\; \langle u|\,\hat{A}\,|v\rangle^* \qquad \forall\, u, v \in V.} \tag{A.30}$$

$N < \infty$

(Man beachte die komplexe Konjugation.) Wegen der Linearität des Skalarproduktes ist es äquivalent, diese Beziehung nur für die Basisvektoren zu fordern:

$$\langle e_j|\hat{A}^\dagger|e_i\rangle \;=\; \langle e_i|\hat{A}|e_j\rangle^* \tag{A.31}$$

: Matrixdst.

--> (A.34)

Gleichung Gl. (A.30) soll für beliebige $|u\rangle$ gelten. Deswegen ist sie äquivalent zu einer Operatorbeziehung: Wenn wir $\hat{A}|v\rangle \;=\; |w\rangle$ nennen, so definiert wegen $\langle v|\hat{A}^\dagger|u\rangle \equiv \langle u|\hat{A}|v\rangle^* = \langle u|w\rangle^* = \langle w|u\rangle$ der dazugehörige Bra-Vektor den adjungierten Operator $\hat{A}^\dagger$:

$$\boxed{|w\rangle \;=\; \hat{A}|v\rangle \quad\Leftrightarrow\quad \langle w| \;=\; \langle v|\,\hat{A}^\dagger \qquad \forall\, v \in V} \tag{A.32}$$

Der Beweis für die Existenz und Eindeutigkeit des adjungierten Operators findet sich in vielen mathematischen Lehrbüchern.

Aus der Definition ergeben sich folgende Rechenregeln:

$$\begin{aligned}
\left(\hat{A}^\dagger\right)^\dagger &= \hat{A} \\
(c\hat{A})^\dagger &= c^*\hat{A}^\dagger \\
(\hat{A}^\dagger)^{-1} &= (\hat{A}^{-1})^\dagger \\
(\hat{A}+\hat{B})^\dagger &= \hat{A}^\dagger + \hat{B}^\dagger = \hat{B}^\dagger + \hat{A}^\dagger \\
(\hat{A}\hat{B}\cdots\hat{Z})^\dagger &= \hat{Z}^\dagger\cdots\hat{B}^\dagger\hat{A}^\dagger
\end{aligned} \tag{A.33}$$

Beispiel: Wir beweisendie letzte dieser Gleichungen.

$$\begin{aligned}
\langle v|(\hat{A}\hat{B})^\dagger|u\rangle &\overset{\text{Def}}{\equiv} \overbrace{\langle u|\hat{A}}^{\langle\tilde{u}|}\,\hat{B}|v\rangle^* \\
&= \langle\tilde{u}|\hat{B}|v\rangle^* \underset{\text{Def}}{=} \langle v|\hat{B}^\dagger|\tilde{u}\rangle = \langle v|\hat{B}^\dagger\hat{A}^\dagger|u\rangle
\end{aligned}$$

Im Zwischenschritt wurde $\langle\tilde{u}| := \langle u|\,\hat{A}$ definiert und daraus mittels $(\hat{A}^\dagger)^\dagger = \hat{A}$ auf $|\tilde{u}\rangle = \hat{A}^\dagger|u\rangle$ geschlossen.

Darstellung in einer Basis

Wie wir gesehen haben, wird der Operator $\hat{A}$ in der Orthonormalbasis $|e_i\rangle$ über die Matrix $A_{ij} = \langle e_i|\hat{A}|e_j\rangle$ dargestellt:

$$\hat{A} \;=\; \sum_{ij} A_{ij}\;|e_i\rangle\langle e_j|\;.$$

Für den Operator $\hat{A}^\dagger$ lautet die entsprechende Darstellung

$$\hat{A}^\dagger \;=\; \sum_{ij} \left(A^\dagger\right)_{ij}\;|e_i\rangle\langle e_j|\;.$$

mit der Matrix

$$\left(A^\dagger\right)_{ij} = \langle e_i|\hat{A}^\dagger|e_j\rangle \overset{\text{Def.}}{\equiv} \langle e_j|\hat{A}|e_i\rangle^* \;=\; A^*_{ji}\;. \tag{A.34}$$

Man erhält also die „adjungierte Matrix", nämlich die ursprüngliche Matrix transponiert und komplex konjugiert. Der Operator selber lautet daher

$$\hat{A}^\dagger \;=\; \sum_{ij} A^*_{ji}\;|e_i\rangle\langle e_j|\;. \tag{A.35}$$

A.3.7 Äußeres Produkt

Neben dem inneren Produkt, das zwei Vektoren auf einen Skalar abbildet, gibt es, wie wir schon gesehen haben, auch das äußere Produkt, das zwei Vektoren auf einen Operator abbildet.

Def. A.20 (äußeres Produkt). *Das äußere Produkt zweier Vektoren $|v\rangle$, $|w\rangle$ ist der Operator*

$$|v\rangle\langle w|\;.$$

Nicht jeder Operator kann so geschrieben werden:
weil die Koeffizienten O_ij i.A: nicht in der Form v_i w_j geschrieben werden können

Die Wirkung des äußeren Produkts auf einen Vektor $|u\rangle$ ist

$$|v\rangle\langle w|\;|u\rangle \;=\; |v\rangle\;\underbrace{\langle w|u\rangle}_{\text{Zahl}}\;. \tag{A.36}$$

Aufgrund von Gl. (A.31) gilt

$$\boxed{\Big(|v\rangle\langle w|\Big)^\dagger \;=\; |w\rangle\langle v|\,,} \tag{A.37}$$

denn $\langle e_j|\Big(|w\rangle\langle v|\Big)\,|e_i\rangle \;=\; \langle e_j|w\rangle\,\langle v|e_i\rangle \;=\; \langle w|e_j\rangle^*\,\langle e_i|v\rangle^* \;=\; \Big(\langle e_i|\,\Big(|v\rangle\langle w|\Big)\,|e_j\rangle\Big)^*.$

11.3.2021

A.3.8 Hermitesche und Selbstadjungierte Operatoren

Def. A.21 (hermitesche Operatoren). *Ein Operator, der gleich seinem adjungierten Operator ist, heißt hermitesch:*

$$\hat{A} = \hat{A}^\dagger \tag{A.38}$$

$$\text{d.h.:} \quad \langle v|\hat{A}|w\rangle = \Big(\langle w|\hat{A}|v\rangle\Big)^* \qquad \forall\, v, w \in V$$

Für die zu einem hermiteschen Operator gehörigen Matrixdarstellungen gilt

$$A_{ij} = A^*_{ji} \,. \tag{A.39}$$

Def. A.22 (selbstadjungierte Operatoren). *Ein hermitescher Operator $\hat{A}$, für den der Definitionsbereich von $\hat{A}$ mit dem Definitionsbereich von $\hat{A}^\dagger$ übereinstimmt, heißt selbstadjungiert.*

Der Unterschied zwischen hermiteschen und selbstadjungierten Operatoren wird nur in ∞-dimensionalen Räumen wichtig. Wir werden im folgenden daher immer den Begriff hermitesch verwenden, und auf den feinen Unterschied verweisen, wenn es nötig ist.

9.3.2023

Theorem A.6. *Bereits die Terme $\langle v|\hat{A}|v\rangle$ eines Operators legen die Hermitezität fest:*

$$\text{Wenn} \quad \langle v|\hat{A}|v\rangle \in \mathbb{R} \quad \forall\, |v\rangle \in V$$
$$\text{Dann gilt} \quad \hat{A} = \hat{A}^\dagger$$

(komplexer Vektorraum) ✓

Beweis:

Betrachte $|v\rangle = a|w_1\rangle + b|w_2\rangle \quad a, b \in \mathbb{C}$

$$\langle v|\hat{A}|v\rangle = \underbrace{|a|^2\,\langle w_1|\hat{A}|w_1\rangle}_{T_1} + \underbrace{|b|^2\,\langle w_2|\hat{A}|w_2\rangle}_{T_2} + \underbrace{a^* b\langle w_1|\hat{A}|w_2\rangle}_{T_3} + \underbrace{a b^*\langle w_2|\hat{A}|w_1\rangle}_{T_4}$$

$$|a|^2, |b|^2 \in \mathbb{R}\,;\ \langle w_j|\hat{A}|w_j\rangle \in \mathbb{R} \quad \Rightarrow T_1, T_2 \in \mathbb{R}$$
$$\langle v|\hat{A}|v\rangle \in \mathbb{R} \quad \Rightarrow T_3 + T_4 \in \mathbb{R}$$

Da die obige Gleichung für beliebige $|v\rangle \in V$ gilt, sollte sie insbesondere für $(a = 1, b = 1)$ und $(a = 1, b = i)$ gelten

1. $a = b = 1:$

$$\Rightarrow \langle w_1|\hat{A}|w_2\rangle + \langle w_2|\hat{A}|w_1\rangle \overset{!}{=} \langle w_1|\hat{A}|w_2\rangle^* + \langle w_2|\hat{A}|w_1\rangle^* \tag{A.40}$$

2. $a = 1 \;\; b = i:$

$$\begin{aligned} \Rightarrow i\left(\langle w_1|\hat{A}|w_2\rangle - \langle w_2|\hat{A}|w_1\rangle\right) &\overset{!}{=} -i\left(\langle w_1|\hat{A}|w_2\rangle^* - \langle w_2|\hat{A}|w_1\rangle^*\right) \\ \langle w_1|\hat{A}|w_2\rangle - \langle w_2|\hat{A}|w_1\rangle &\overset{!}{=} \langle w_2|\hat{A}|w_1\rangle^* - \langle w_1|\hat{A}|w_2\rangle^* \end{aligned} \tag{A.41}$$

Addition von Gl. (A.40) und Gl. (A.41) liefert $\langle w_1|\hat{A}|w_2\rangle = \langle w_2|\hat{A}|w_1\rangle^*$.

Die bemerkenswerte Tatsache, daß aus der Annahme der Spezialfälle $\langle v|\hat{A}|v\rangle \in \mathbb{R}$ der Allgemeinfall folgt, liegt daran, daß komplexwertige Skalare verwendet wurden. Im rein Reellen geht das nicht. Es reicht auch *nicht*, $\langle e_i|\hat{A}|e_i\rangle \in \mathbb{R}$ nur für die Basisvektoren $|e_i\rangle$ zu fordern.

Def. A.23 (anti-hermitesche Operatoren). *Ein Operator heißt anti-hermitesch, wenn*

$$\hat{A} = -\hat{A}^\dagger \quad .$$

Ein wichtiges Beispiel eines anti-hermiteschen Operators ist der *Kommutator* $[\hat{A}, \hat{B}]$ zweier hermitescher Operatoren $\hat{A}$ und $\hat{B}$:

$$[\hat{A}, \hat{B}]^\dagger = (\hat{A}\hat{B})^\dagger - (\hat{B}\hat{A})^\dagger = \hat{B}^\dagger\hat{A}^\dagger - \hat{A}^\dagger\hat{B}^\dagger = \hat{B}\hat{A} - \hat{A}\hat{B} = -[\hat{A}, \hat{B}] \; . \tag{A.42}$$

A.3.9 Unitäre Operatoren

Def. A.24 (unitäre Operatoren). *Ein Operator $\hat{U}$ heißt unitär, wenn*

$$\hat{U}^\dagger \hat{U} = \hat{1\!\!1} = \hat{U}\hat{U}^\dagger \quad , \quad \textit{also} \quad \boxed{\hat{U}^\dagger = \hat{U}^{-1}} \tag{A.43}$$

Eine wichtige Eigenschaft unitärer Operatoren ist die Erhaltung der Norm:

siehe (A.32) $\left\| \hat{U}|v\rangle \right\|^2 = \langle v|\hat{U}^\dagger \, \hat{U}|v\rangle = \langle v|v\rangle = \|\,|v\rangle\,\|^2.$ $\approx \|v\|^2$

Unitäre Transformationen entsprechen Drehungen oder Spiegelungen. (2.1) ✓

Bemerkung: Für hermitesche, anti-hermitesche und unitäre Operatoren läßt sich eine Analogie zu den komplexen Zahlen herstellen: Ein hermitescher Operator ist analog zu einer reellen Zahl, ein antihermitescher Operator zu einer rein imaginären Zahl, und ein unitärer Operator zu einer komplexen Zahl auf dem Einheitskreis ($e^{i\varphi}$).

A.3.10 Basistransformation („Passive Transformation")

Unitäre Operatoren erzeugen Basistransformationen von einer Orthonormalbasis $|e_i\rangle$ zu einer neuen Basis

$$|e_i'\rangle \; := \; \hat{U}|e_i\rangle \; . \tag{A.44}$$

Dies ist wieder eine Orthonormalbasis, denn

$$\langle e_i'|e_j'\rangle = \langle e_i|\hat{U}^\dagger U|e_j\rangle = \langle e_i|e_j\rangle = \delta_{ij} \; .$$

Wenn man umgekehrt zwei Orthonormalbasissysteme gegeben hat, kann man den zugehörigen Transformationsoperator explizit als unitären Operator schreiben. Er bildet jeden Basisvektor $|e_l\rangle$ auf $|e_l'\rangle$ ab, ist somit einfach !

$$\boxed{\hat{U} \; = \; \sum_l |e_l'\rangle\langle e_l| \; .} \tag{A.45}$$

U |e_i> = |e_i'>

Die Unitarität sieht man sofort durch Einsetzen:

$$\hat{U}\hat{U}^\dagger \; = \; \sum_{lm} |e_l'\rangle \underbrace{\langle e_l|\,|e_m\rangle}_{\delta_{lm}} \langle e_m'| \; = \; \sum_l |e_l'\rangle\langle e_l'| \; = \; \hat{1\!\!1} \; .$$

(Analog für $\hat{U}^\dagger\hat{U}$.)

Die Matrixelemente von $\hat{U}$ in der *ungestrichenen* Basis sind

$$U_{ij} = \langle e_i|\hat{U}|e_j\rangle = \sum_l \langle e_i|e'_l\rangle \underbrace{\langle e_l|e_j\rangle}_{\delta_{lj}} = \langle e_i|e'_j\rangle \quad . \tag{A.46}$$

Die Spalten der Matrix U_{ij} sind daher die Koeffizienten $\langle e_i|e'_j\rangle$ der neuen Basisvektoren in der alten Basis !

Bei einer *Basis*transformation („passive Transformation") werden nur die Basisvektoren geändert. Die beschriebene physikalische Situation bleibt dieselbe. Daher **bleiben alle „physikalischen" Objekte unverändert, d.h. alle Nicht-Basis-Vektoren und alle Operatoren.** Nur ihre ***Koeffizienten* sind in der neuen Basis anders**:

$$\text{Alte Basis:} \quad v_i = \langle e_i|v\rangle \quad ; \quad O_{ij} = \langle e_i|\hat{O}|e_j\rangle \tag{A.47}$$

$$\text{Neue Basis:} \quad v'_i = \langle e'_i|v\rangle \quad ; \quad O'_{ij} = \langle e'_i|\hat{O}|e'_j\rangle \tag{A.48}$$

Die Transformation dieser Koeffizienten erhält man in der Bra-Ket-Schreibweise z.B. durch Einschieben eines Einheitsoperators.

1) Die Koeffizienten eines Vektors $|v\rangle$ lauten in der neuen Basis

$$v'_i = \langle e'_i|v\rangle = \langle e'_i| \underbrace{\left(\sum_j |e_j\rangle\langle e_j|\right)}_{\hat{1}} |v\rangle = \sum_j \langle e'_i|e_j\rangle \underbrace{\langle e_j|v\rangle}_{v_j} = \sum_j \left(U^\dagger\right)_{ij} v_j \quad . \tag{A.49}$$

Noch einfacher erhält man sie mittels des Adjungierten von Gl. (A.44):

$$\langle e'_i| = \langle e_i|\hat{U}^\dagger \quad \Rightarrow \quad v'_i \equiv \langle e'_i|v\rangle = \langle e_i|\hat{U}^\dagger|v\rangle \quad .$$

Die Koeffizienten eines *festgehaltenen* Vektors transformieren sich daher mit der inversen Matrix $\hat{U}^\dagger = \hat{U}^{-1}$. !

2) Die Matrixelemente eines Operators in der neuen Basis sind

$$\begin{aligned} O'_{ij} &= \langle e'_i|\hat{O}|e'_j\rangle = \langle e'_i| \underbrace{\sum_m |e_m\rangle\langle e_m|}_{\hat{1}} \hat{O} \underbrace{\sum_n |e_n\rangle\langle e_n|}_{\hat{1}} |e'_j\rangle \\ &= \sum_{m,n} \langle e'_i|e_m\rangle \, \langle e_m|\hat{O}|e_n\rangle \, \langle e_n|e'_j\rangle \\ &= \sum_{m,n} \left(U^\dagger\right)_{im} O_{mn} U_{nj} \quad . \end{aligned} \tag{A.50}$$

Dies sieht man auch direkt durch Benutzen von $|e_i'\rangle = \hat{U}|e_i\rangle$:

$$\langle e_i'|\,\hat{O}\,|e_j'\rangle \;=\; \langle e_i|\,\hat{U}^\dagger\hat{O}\hat{U}\,|e_j\rangle\,. \tag{A.51}$$

Die Matrixelemente von $\hat{O}$ in der neuen Basis sind dieselben wie die Matrixelemente von $\hat{O}' \;=\; \hat{U}^\dagger\hat{O}\hat{U}$ in der alten Basis. Erwartungswerte (Matrixelemente bezüglich physikalischer Objekte) $\langle w|\hat{O}|v\rangle$ bleiben bei einer Basistransformation unverändert. 1✓

A.3.11 Aktive Transformation physikalischer Objekte

Wir beschreiben jetzt eine *veränderte physikalische Situation*, z.B. eine Verschiebung oder Rotation der physikalischen Objekte, bei festgehaltener Basis, d.h. unveränderten Basisvektoren. Dies kann formal auf zwei äquivalente Arten geschehen.

1. Wir transformieren die Vektoren (Zustände) $|v\rangle \in V$ mit einem unitären Operator $\hat{U}$:

$$|v\rangle \;\rightarrow\; \hat{U}\,|v\rangle\,. \tag{A.52}$$

Die Norm der Vektoren $|v\rangle$ ändert sich wegen der Unitarität nicht: $\langle v|\hat{U}^\dagger\,\hat{U}|v\rangle = \langle v|v\rangle$. Operatoren (entsprechend physikalischen Messvorgängen) werden nicht transformiert ! Die transformierten Vektoren haben aber veränderte Matrixelemente, d.h. man erhält andere Messergebnisse z.B. für die Positionen der physikalischen Objekte:

$$\langle v|\hat{O}|w\rangle \;\rightarrow\; \langle v|\hat{U}^\dagger\,\hat{O}\,\hat{U}|w\rangle \qquad \text{(meist } |v\rangle = |w\rangle\text{)} \tag{A.53}$$

Nur solche Matrixelemente (nicht aber die Vektoren oder Operatoren selber) entsprechen beobachtbaren Größen !

oder

2. Wir können *dieselbe veränderte physikalische Situation* beschreiben, wenn wir statt der obigen Transformation die Vektoren nun *nicht* verändern und dafür alle Operatoren gemäß

$$\hat{O} \;\rightarrow\; \hat{U}^\dagger\,\hat{O}\,\hat{U} \tag{A.54}$$

transformieren.

Die Spur eines Operators ist invariant gegenüber solchen Transformationen:

$$Sp\left(\hat{U}^\dagger\hat{A}\hat{U}\right) = Sp\left(\hat{A}\hat{U}\hat{U}^\dagger\right) = Sp\left(\hat{A}\hat{1\!\!1}\right) = Sp\left(\hat{A}\right)\,.$$

A.4 Eigenwertprobleme in endlichdimensionalen Vektorräumen

Wir werden in diesem Abschnitt sehen, dass man die Eigenvektoren jedes hermiteschen Operators als vollständiges Orthonormalsystem (Basis) schreiben kann. In dieser Eigenbasis ist der Operator diagonal, so dass man Funktionen des Operators kompakt schreiben und Operator- bzw. Matrix-Gleichungen leicht lösen kann.

Zunächst werden wir uns mit endlichdimensionalen Vektorräumen beschäftigen. Die Resultate werden auch für abzählbar unendlich dimensionale Hilberträume anwendbar sein, sofern die Konvergenz gewährleistet ist.

A.4.1 Eigenwerte

Eigenwertprobleme spielen in der Quantenmechanik eine Schlüsselrolle. Sie sagen z.B. aus, welche Werte bei einer Messung beobachtet werden können.

Def. A.25 (Eigenwert, -vektor). *Wenn für einen Operator $\hat{A}$ und einen Vektor $|v\rangle$ aus V, der nicht der Nullvektor ist,*

$$\hat{A}\,|v\rangle \;=\; a\,|v\rangle \quad \text{mit } a \in \mathbb{C}$$

gilt, dann nennt man $|v\rangle$ Eigenvektor von $\hat{A}$ zum Eigenwert a.

Die Gesamtheit der Eigenwerte nennt man das **Spektrum** des Operators.

Aus der antilinearen Beziehung zwischen Bra- und Ket-Vektoren und der Definition des adjungierten Operators (A.32) folgt:

$$\langle v|\,\hat{A}^\dagger \;=\; \langle v|\,a^*$$

Der adjungierte Operator hat also linksseitige Eigenwerte a^*.

Theorem A.7. *Für hermitesche Operatoren gilt:*

a) Hermitesche Operatoren haben nur reelle Eigenwerte.

b) *Eigenvektoren zu unterschiedlichen Eigenwerten sind orthogonal.*

c) *Eigenvektoren zu gleichen („entarteten") Eigenwerten können immer orthogonal gewählt werden.*

d) *Die Eigenvektoren eines hermiteschen Operators bilden eine Eigenbasis (vollständigen Satz von Eigenzuständen). Für die orthonormierten Eigenvektoren $|v_i\rangle$ gilt daher*

(die "Eigenbasis")

$$\sum_i |v_i\rangle\langle v_i| = \mathbb{1} .$$

Beweise: (nur zu a und b)

a) Für hermitesche Operatoren $\hat{A} = \hat{A}^\dagger$ gilt:

$$\begin{aligned}
\langle v|\hat{A}|v\rangle &\overset{\text{Def.}}{\equiv} \langle v|\hat{A}^\dagger|v\rangle^* = \langle v|\hat{A}|v\rangle^* \\
\langle v|a|v\rangle &= \langle v|a|v\rangle^* \\
a\langle v|v\rangle &= a^*\langle v|v\rangle \\
a &= a^*
\end{aligned}$$

b) Betrachte zwei Eigenvektoren $|v_1\rangle$, $|v_2\rangle$ von $\hat{A}$ mit (immer reellen) Eigenwerten $a_1 \neq a_2$:

$$\begin{aligned}
\hat{A}\,|v_1\rangle &= a_1\,|v_1\rangle \\
\hat{A}\,|v_2\rangle &= a_2\,|v_2\rangle \qquad .
\end{aligned}$$

Da $\hat{A}$ hermitesch ist, gilt:

$$\begin{aligned}
\langle v_1|\hat{A}|v_2\rangle &\equiv \langle v_2|\hat{A}^\dagger|v_1\rangle^* = \langle v_2|\hat{A}|v_1\rangle^* \\
\langle v_1|a_2|v_2\rangle &= \langle v_2|a_1|v_1\rangle^* \\
a_2\langle v_1|v_2\rangle &= a_1^*\langle v_2|v_1\rangle^* \\
a_2\langle v_1|v_2\rangle &= a_1\langle v_1|v_2\rangle \qquad .
\end{aligned}$$

a_1 = a_1^*

Zuletzt haben wir $a_1 = a_1^*$ ausgenutzt. Wegen $a_1 \neq a_2$ folgt $\langle v_1|v_2\rangle = 0$. Zustände zu verschiedenen Eigenwerten sind orthogonal.

Anmerkung zu c): geeignete Orthonormierungsverfahren sind zum Beispiel das Verfahren nach Gram-Schmidt oder das besonders in der Quantenchemie eingesetzte Löwdin-Orthogonalisierungsverfahren.

Sonst:

Bemerkung: Das Theorem A.7 gilt nur für hermitesche Operatoren! Es kann im Allgemeinen passieren, dass die Säkulargleichung $\det(A - \lambda \mathbb{1}) = 0$, welche die Eigenwerte bestimmt, in λ eine n-fache Wurzel besitzt, also ein n-facher Eigenwert vorliegt, aber nur $m < n$ Eigenvektoren. Wir wollen dies am Beispiel der *nicht-hermiteschen* 2×2-Matrix

$$\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ \epsilon^2 & 0 \end{pmatrix}$$

(mit $\epsilon \neq 1$) studieren. Um das Eigenwertproblem der Matrix zu lösen, benötigen wir die Nullstellen des charakteristischen Polynoms (Säkulargleichung):

$$\left| \begin{pmatrix} -\lambda & 1 \\ \epsilon^2 & -\lambda \end{pmatrix} \right| = \qquad \lambda^2 - \epsilon^2 \stackrel{!}{=} 0$$

$$\text{Eigenwerte:} \qquad \lambda = \pm\epsilon$$

$$\text{(Nicht normierte) Eigenvektoren:} \quad \begin{pmatrix} 1 \\ \pm\epsilon \end{pmatrix}$$

Im Grenzfall $\epsilon \to 0$ geht die Matrix in $\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}$ über. Das charakteristische Polynom hat eine zweifache Nullstelle bei $\lambda = 0$. Es existiert aber nur noch *ein* Eigenvektor $\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$.

A.4.2 Spektraldarstellung, Funktionen von Operatoren

Wir wissen bereits, dass man den Einheitsoperator über ein vollständiges orthonormales Basissystem $\{|e_i\rangle\}$ ausdrücken kann:

$$\hat{\mathbb{1}} = \sum_i |e_i\rangle\langle e_i| \,. \tag{A.55}$$

Ein solches Basissystem wird insbesondere von den orthonormierten Eigenvektoren $|a_i\rangle$ jedes hermiteschen Operators $\hat{A}$ aufgespannt, mit

$$\hat{A}\,|a_i\rangle = a_i\,|a_i\rangle \qquad . \tag{A.56}$$

(orthonormal gewählt)

Damit können wir den Operator $\hat{A}$ *in seiner Eigenbasis* ausdrücken:

$$\begin{aligned}\hat{A} = \mathbb{1}\hat{A}\mathbb{1} \quad &= \sum_i |a_i\rangle\langle a_i| \; \hat{A} \; \sum_j |a_j\rangle\langle a_j| \\ &= \sum_{i,j} |a_i\rangle\langle a_i| \underbrace{\hat{A}|a_j\rangle}_{a_j|a_j\rangle} \langle a_j| \\ &= \sum_{i,j} a_j |a_i\rangle \underbrace{\langle a_i|a_j\rangle}_{\delta_{ij}} \langle a_j| \qquad = \sum_i a_i \; |a_i\rangle\langle a_i|\end{aligned}$$

Wir erhalten die Spektraldarstellung des hermiteschen Operators $\hat{A}$, das ist die *Darstellung in der Eigenbasis:*

$$\boxed{\hat{A} = \sum_i a_i \; |a_i\rangle\langle a_i|} \; . \tag{A.57}$$

Eigenwerte a_i
und zugehörige
Eigenvektoren I a_i >

13.3.2023

Funktionen von Operatoren

Wir wollen nun zu den hermiteschen Operatoren auch Funktionen dieser Operatoren betrachten. Die Bedeutung der Operatorfunktion $\hat{A}^\nu$, $\nu \in \mathbb{N}$ ist sofort einsichtig, nämlich die mehrfache Anwendung des Operators $\hat{A}$: $(\hat{A}\hat{A}\cdots)$. Dies ist wieder ein Operator. Allgemeinere Funktionen eines Operators müssen jedoch erst definiert werden.

Jede analytische Funktion einer komplexen Variablen x lässt sich als Potenzreihe schreiben:

$$f(x) = \sum_{\nu=0}^{\infty} c_\nu \, x^\nu \; .$$

Man erweitert nun die Wirkung dieser Funktionen auf Operatoren:

Def. A.26 (Funktion eines Operators).

$$f(\hat{A}) \; := \sum_{\nu=0}^{\infty} c_\nu \; \hat{A}^\nu \tag{A.58}$$

Die c_ν übernimmt man aus der Reihenentwicklung der Funktion $f(x)$ für $x \in \mathbb{C}$.

Die Funktion eines Operators ist also über die *Potenzreihenentwicklung der Funktion* definiert. Beispiel: $e^{\hat{A}} = \mathbb{1} + \hat{A} + \hat{A}^2/2 + \ldots$.

!

Diese Definition ist für praktische Rechnungen weniger geeignet als die zugehörige Spektraldarstellung, die wir nun herleiten werden. Für ganzzahlige Potenzen m gilt:

$$\hat{A}^m = \sum_j a_j^m \, |a_j\rangle\langle a_j| \qquad \text{(A.59)}$$

Beweis: Vollständige Induktion

$$\begin{aligned} &\text{Induktionsanfang } (m=0): && \hat{A}^0 &&= \hat{1\!\!1} \\ &\text{Induktionsannahme:} && \hat{A}^m &&= \sum_j a_j^m \, |a_j\rangle\langle a_j| \quad \forall m \leq M \end{aligned}$$

Induktionschluss:

$$\hat{A}^{M+1} = \hat{A}^M \hat{A} = \sum_j a_j^M \, |a_j\rangle \underbrace{\langle a_j|\, \hat{A}}_{\langle a_j|\, a_j^* = \langle a_j|\, a_j} = \sum_j a_j^{M+1} \, |a_j\rangle\langle a_j|$$

| ✓

(hermitescher Operator: reellle EW) $q.e.d.$

Mit (A.58) und (A.59) ergibt sich für Operator-Funktionen:

$$f(\hat{A}) = \sum_{\nu=0}^{\infty} c_\nu \hat{A}^\nu = \sum_{\nu=0}^{\infty} c_\nu \sum_j a_j^\nu \, |a_j\rangle\langle a_j| = \sum_j \underbrace{\left(\sum_{\nu=0}^{\infty} c_\nu a_j^\nu \right)}_{f(a_j)} |a_j\rangle\langle a_j|$$

die **Spektraldarstellung von Funktionen eines Operators**

$$\boxed{f(\hat{A}) = \sum_j f(a_j) \, |a_j\rangle\langle a_j|} \qquad \text{(A.60)}$$

Wenn wir Gl. (A.60) als *Definition* der Funktion eines Operators verwenden, können wir *auch nichtanalytische Funktionen* f zulassen.

Aus Gl. (A.58) leitet man auch leicht das Verhalten von Funktionen bei Transformationen mit einem unitären Operator $\hat{U}$ her:

$$\begin{aligned} f(\,\hat{U}^\dagger \hat{A} \hat{U}\,) &= \sum_\nu c_\nu \left(\hat{U}^\dagger \hat{A} \hat{U} \right)^\nu = \sum_\nu c_\nu \left(\hat{U}^\dagger \hat{A} \underbrace{\hat{U} \hat{U}^\dagger}_{\hat{1}} \hat{A} \hat{U} \ldots \right) \\ &= \sum_\nu c_\nu \hat{U}^\dagger \left(\hat{A} \right)^\nu \hat{U} = \hat{U}^\dagger f(\hat{A}) \, \hat{U} \end{aligned}$$

!

Wir fassen die Ergebnisse zusammen. Sie gelten auch für Operatoren in abzählbar unendlich dimensionalen Vektorräumen.

Es sei $\{|a_i\rangle\}$ das vollständige orthonormierte Basissystem aus Eigenvektoren des hermiteschen Operators $\hat{A}$, mit den zugehörigen Eigenwerten a_i. Dann gilt:

SPEKTRALDARSTELLUNG (SPEKTRALSATZ)

$$\hat{1\!\!1} = \sum_i |a_i\rangle\langle a_i| \tag{A.61a}$$

$$\hat{A} = \sum_i a_i \; |a_i\rangle\langle a_i| \tag{A.61b}$$

$$f(\hat{A}) = \sum_i f(a_i) \; |a_i\rangle\langle a_i| \tag{A.61c}$$

$$f(\;\hat{U}^\dagger \hat{A} \hat{U}\;) = \hat{U}^\dagger \; f(\hat{A}) \; \hat{U} \tag{A.61d}$$

$$\langle\psi|f(\hat{A})|\psi\rangle = \sum_i f(a_i) \; |\langle a_i|\psi\rangle|^2 \tag{A.61e}$$

Die Gleichung (A.61c) enthält die beiden vorherigen Gleichungen als Spezialfälle. Allerdings folgen die Gleichungen (A.61a) und (A.61b) aus den elementaren Eigenschaften der linearen Vektorräume, wohingegen der Gl. (A.61c) die Definition der Funktion eines Operators zugrunde liegt.
Als Anwendung folgt Gl. (A.61e) direkt aus Gl. (A.61c).

A.4.3 Darstellung über Matrizen

Wir haben gerade Beziehungen zwischen abstrakt geschriebenen *Operatoren* hergeleitet. Man kann sie äquivalent auch mittels Matrizen schreiben.

Def. A.27 (Matrixdarstellung). *Die Darstellung eines Operators $\hat{A}$ in einer beliebigen Orthonormalbasis $\{|e_i\rangle\}$ ist die Matrix A mit den Matrixelementen*

$$A_{ij} = \langle e_i|\hat{A}|e_j\rangle. \tag{A.62}$$

Notation:
Operator mit Dach
Matrix ohne Dach

Die obigen Operatorbeziehungen werden in dieser Basis zu entsprechenden Gleichungen für die Matrix A und ihre Funktionen. Nicht nur in der Quantenmechanik, sondern auch in anderen Gebieten spielen Funktionen von Matrizen eine wichtige Rolle.

Entsprechend der Definition Gl. (A.58) haben Funktionen $f(\hat{A})$ die Matrixelemente

$$\langle e_i|f(\hat{A})|e_j\rangle = \sum_{\nu=0}^{\infty} c_\nu \langle e_i|\hat{A}^\nu|e_j\rangle .$$

Beispiele:

$$\begin{aligned}
\langle e_i|\hat{A}|e_j\rangle &= A_{ij} \\
\langle e_i|\hat{A}\hat{A}|e_j\rangle &= \langle e_i|\hat{A} \sum_l |e_l\rangle\langle e_l|\ \hat{A}|e_j\rangle \\
&= \sum_l \langle e_i|\hat{A}|e_l\rangle\langle e_l|\hat{A}|e_j\rangle = \sum_l A_{il}A_{lj} = (AA)_{ij} = (A^2)_{ij} \\
\langle e_i|\hat{A}^\nu|e_j\rangle &= (A^\nu)_{ij}
\end{aligned}$$

gerade gezeigt

Es folgt: $$\langle e_i|f(\hat{A})|e_j\rangle = (f(A))_{ij} \tag{A.63}$$

z.B.: $\langle e_i|e^{\mathrm{i}\hat{A}}|e_j\rangle = \left(e^{\mathrm{i}A}\right)_{ij}$.

Wir erhalten also die analogen Funktionen der *Matrizen*. Zum *Berechnen* solcher Funktionen von Matrizen ist es in der Regel das Einfachste, die *Spektraldarstellung* zu benutzen (d.h. die Eigenbasis). Aus dem Spektralsatz wird die Darstellung

$$\boxed{\begin{aligned}
(f(A))_{ij} = \langle e_i|f(\hat{A})|e_j\rangle &= \langle e_i|\left(\sum_m f(a_m)|a_m\rangle\langle a_m|\right)|e_j\rangle \\
&= \sum_m f(a_m)\ \langle e_i|a_m\rangle\ \langle a_m|e_j\rangle . \qquad \text{(A.64)}
\end{aligned}}$$

Dazu benötigt man die Eigenwerte von A und die Koeffizienten $(a_m)_i = \langle e_i|a_m\rangle$ der Eigenvektoren von A in der Basis $|e_i\rangle$. Die Eigenwerte kann man über die Säkulargleichung $\det(A - \lambda\mathbb{1}) = 0$ erhalten und die Koeffizienten anschließend als Lösungen der linearen Gleichungssysteme

$$\sum_j A_{ij}\ \langle e_j|a_m\rangle = a_m\ \langle e_i|a_m\rangle \quad \Leftrightarrow \quad A\,\vec{a}_m = a_m\,\vec{a}_m . \tag{A.65}$$

Diagonalform

In der Eigenbasis $\{|a_i\rangle\}$ *ist die Matrix* A *diagonal.* Man sieht dies direkt aus der Spektraldarstellung

$$\langle a_i|\,\hat{A}\,|a_j\rangle \;=\; \langle a_i|\,\sum_m a_m\,|a_m\rangle\langle a_m|\,|a_j\rangle \;=\; a_j\,\delta_{ij}\,, \tag{A.66}$$

oder auch daraus, dass die $|a_m\rangle$ Eigenvektoren sind:

$$\langle a_i|\,\hat{A}\,|a_j\rangle \;=\; \langle a_i|\,a_j\,|a_j\rangle \;=\; a_j\,\delta_{ij}\,, \tag{A.67}$$

Man kann also die Matrixdarstellung eines Operators $\hat{A}$ diagonal machen, mit den Eigenwerten a_l auf der Diagonalen, indem man eine Basistransformation $|e_i\rangle \;\rightarrow\; |a_i\rangle = \hat{U}|e_i\rangle$ mit der unitären Matrix (A.45) durchführt: $\hat{U} \;=\; \sum_l\;|a_l\rangle\langle e_l|$.

In der Basis $\{|e_i\rangle\}$ hat $\hat{U}$ die Matrixelemente

$$U_{km} \;=\; \langle e_k|\hat{U}|e_m\rangle \;=\; \langle e_k|a_m\rangle\,. \tag{A.68}$$

= Koeff. der Eigenvektoren

Äquivalent (Gl. (A.54)) hat der Operator $\hat{A}' \;=\; \hat{U}^\dagger\hat{A}\hat{U}$ in der alten Basis $|e_i\rangle$ Diagonalform, mit denselben Matrixelementen:

anderer Operator A ' !

$$\begin{aligned}
\hat{A}' \;=\; \hat{U}^\dagger\hat{A}\hat{U} \quad &=\; \textstyle\sum_{lm}\;|e_l\rangle\langle a_l|\;\hat{A}\;|a_m\rangle\langle e_m| \\
&=\; \textstyle\sum_{lm}\;|e_l\rangle\langle a_l|\;a_m\;|a_m\rangle\langle e_m| \\
&=\; \textstyle\sum_{lm}\;|e_l\rangle\;\;a_m\;\delta_{lm}\quad\langle e_m| \\
&=\; \textstyle\sum_l a_l\,|e_l\rangle\langle e_l|\,.
\end{aligned} \tag{A.69}$$

Ein lineares Gleichungssystem

$$\hat{A}\;|v\rangle \;=\; |b\rangle \quad\Leftrightarrow\quad \sum_j\;A_{ij}\,v_j \;=\; b_i \tag{A.70}$$

löst man durch Diagonalisierung der Matrix A. Dies entspricht einer Transformation auf die Eigenbasis von A. Wir multiplizieren dazu $\hat{A}\,|v\rangle \;=\; \hat{A}\;\mathbb{1}\;|v\rangle \;=\; \hat{A}\,\hat{U}\hat{U}^\dagger\;|v\rangle$ von links mit $\hat{U}^\dagger$:

$$\underbrace{\hat{U}^\dagger\,\hat{A}\,\hat{U}}_{\hat{A}'}\;\underbrace{\hat{U}^\dagger\,|v\rangle}_{=:\,|v'\rangle} \;=\underbrace{\hat{U}^\dagger\,|b\rangle}_{=:\,|b'\rangle}\,. \tag{A.71}$$

$$\Rightarrow\qquad \hat{A}'\quad|v'\rangle \qquad\;=|b'\rangle\,, \tag{A.72}$$

wobei die Matrix $\hat{A}'$ jetzt diagonal ist. Zur Durchführung einer Diagonalisierung gibt es zahlreiche analytische und numerische Verfahren.

18.3.21

A.4.4 Determinanten

Es sollen noch einige nützliche Eigenschaften von Determinanten angegeben werden. Wir unterscheiden hier drei Typen von $n \times n$ Matrizen: 1) beliebige A, B; 2) hermitesche H mit Eigenwerten λ_i , und 3) unitäre Matrizen U.

EIGENSCHAFTEN VON DETERMINANTEN

$$|\det(U)| = 1 \tag{A.73a}$$

$$\det(A^\dagger) = \det(A)^* \tag{A.73b}$$

$$\det(A\, B) = \det(A) \cdot \det(B) \tag{A.73c}$$

$$\det(U^\dagger\, A\, U) = \det(A) \tag{A.73d}$$

$$\det(H) = \prod_i \lambda_i \tag{A.73e}$$

$$\det(H) = e^{\mathrm{Sp}(\ln(H))} \quad \Leftrightarrow \log \det H = \mathrm{tr} \log H \tag{A.73f}$$

$$\left(= \sum_i \log \lambda_i\right)$$

✓

Anmerkung zu Gl. (A.73c): Determinanten sind nur für quadratische ($n \times n$) Matrizen definiert[4]. Dennoch ist die Determinante des Produktes AB zweier nicht-quadratischer Matrizen definiert, wenn das Produkt eine quadratische Matrix liefert, das heißt, wenn A eine $n \times m$- und B eine $m \times n$-Matrix ist. Allerdings gilt dann Gl. (A.73c) nicht mehr in dieser einfachen Form. Diese Determinante ist auf jeden Fall Null, wenn $m < n$.

[4] Determinanten nicht-quadratischer Matrizen werden manchmal dadurch definiert, dass man die Matrix quadratisch ergänzt, d.h. die fehlenden Elemente zur quadratischen Form mit Nullen auffüllen. Die Determinante dieser Matrizen ist zwar Null, aber immerhin definiert.