Skript zur 3. Vorlesung "Quantenmechanik", Montag den 18. April, 2011.

3 Komplexe Vektorräume

In der Quantenmechanik werden physikalische Zustände durch Vektoren in einem unendlich dimensionalem Vektorraum beschrieben, und Observabelen als hermitesche lineare Operatoren in diesem Vektorraum. In dieser Vorlesung werden die mathematischen Eigenschaften von endlich-dimensionalen Vektorräumen und linearen Operatoren in diesen Vektorräumen besprochen.

3.1 Komplexe Vektorräume

1. Die Menge der "Vektoren"

$$\mathbf{a} = \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ \vdots \\ a_N \end{pmatrix},$$

wobei $a_1, a_2, \ldots, a_N$ komplexe Zahlen sind, wird ein N-dimensionaler komplexer Vektorraum V genannt. Für Vektoren im Vektorraum sind die Addition,

$$\mathbf{a} + \mathbf{b} = \begin{pmatrix} a_1 + b_1 \\ \vdots \\ a_N + b_N \end{pmatrix},$$

und die Multiplikation mit einer komplexen Zahl λ,

$$\lambda \mathbf{a} = \begin{pmatrix} \lambda a_1 \\ \vdots \\ \lambda a_N \end{pmatrix},$$

definiert.

2. Das Skalarprodukt von zwei Vektoren $\mathbf{a}$ und $\mathbf{b}$ ist als

$$(\mathbf{a}, \mathbf{b}) = \sum_{i=1}^{N} a_i^* b_i$$

definiert.

Eigenschaften des Skalarprodukts sind:

- $(\mathbf{a}, \mathbf{b}) = (\mathbf{b}, \mathbf{a})^*$,
- $(\mathbf{a}, \lambda\mathbf{b}) = \lambda\,(\mathbf{a}, \mathbf{b})$,
- $(\mathbf{a}, \mathbf{b}+\mathbf{c}) = (\mathbf{a}, \mathbf{b}) + (\mathbf{a}, \mathbf{c})$,
- $(\mathbf{a}, \mathbf{a}) \geq 0$; $(\mathbf{a}, \mathbf{a}) = 0$ nur wenn $\mathbf{a} = 0$,

Definitionen:

- $\|\mathbf{a}\| = \sqrt{(\mathbf{a}, \mathbf{a})}$ ist der Norm des Vektors $\mathbf{a}$.
- Zwei Vektoren $\mathbf{a}, \mathbf{b}$ werden orthogonal genannt, wenn $(\mathbf{a}, \mathbf{b}) = 0$.
- Zwei orthogonale Vektoren $\mathbf{a}, \mathbf{b}$ werden orthonormal genannt, wenn $\|\mathbf{a}\| = \|\mathbf{b}\| = 1$.
- Eine Basis $\mathbf{e}_1, \cdots, \mathbf{e}_N$ für den Vektorraum besteht aus N Vektoren, sodass jeder Vektor $\mathbf{a}$ *in einer Weise* als lineare Kombination der Basisvektoren geschrieben werden kann,
$$\mathbf{a} = \lambda_1\mathbf{e}_1 + \cdots + \lambda_N\mathbf{e}_N.$$
- Eine Basis wird orthogonal/orthonormal genannt, wenn die Basisvektoren $\mathbf{e}_1, \cdots, \mathbf{e}_N$ orthogonal/orthonormal sind. Für eine orthonormale Basis gilt deshalb
$$(\mathbf{e}_i, \mathbf{e}_j) = \delta_{ij},$$
wobei δ_{ij} das "Kronecker" δ-Symbol ist [$\delta_{ij} = 1$ wenn $i = j$ und $\delta_{ij} = 0$ wenn $i \neq j$]. Für eine orthonormale Basis können die Koeffizienten λ_j mit Hilfe des Skalarproduktes bestimmt werden
$$\lambda_j = (\mathbf{e}_j, \mathbf{a})\,.$$
Beweis:
$$\begin{aligned}(\mathbf{e}_j, \mathbf{a}) &= (\mathbf{e}_j, \lambda_1\mathbf{e}_1 + \ldots + \lambda_N\mathbf{e}_N)\\ &= \lambda_1(\mathbf{e}_j, \mathbf{e}_1) + \ldots + \lambda_N(\mathbf{e}_j, \mathbf{e}_N)\\ &= \lambda_j.\end{aligned}$$

- Der Vektor $\hat{P}_{\mathbf{e}_j}(\mathbf{a}) = (\mathbf{e}_j, \mathbf{a})\mathbf{e}_j$ heißt die Projektion von $\mathbf{a}$ auf den Basisvektor $\mathbf{e}_j$. Es gilt die Vollständigkeitsrelation

$$\mathbf{a} = \sum_{j=1}^{N} \hat{P}_{\mathbf{e}_j}(\mathbf{a}) = \sum_{j=1}^{N} (\mathbf{e}_j, \mathbf{a})\mathbf{e}_j.$$

3.2 Lineare Operatoren

1. Ein linearer Operator $\hat{A}$ ist eine Funktion, die den Vektorraum in sich selbst abbildet, sodass

$$\hat{A}(\lambda \mathbf{a} + \mu \mathbf{b}) = \lambda \hat{A}(\mathbf{a}) + \mu \hat{A}(\mathbf{b})$$

für beliebige Vektoren $\mathbf{a}$ und $\mathbf{b}$ und komplexe Zahlen λ und μ. Man schreibt $\hat{A}\mathbf{a}$ anstatt $\hat{A}(\mathbf{a})$.

Eigenschaften:

- Wenn $\hat{A}$ und $\hat{B}$ lineare Operatoren sind, dann auch $\lambda \hat{A} + \mu \hat{B}$.
- Wenn $\hat{A}$ und $\hat{B}$ lineare Operatoren sind, dann auch $\hat{A}\hat{B}$ und $\hat{B}\hat{A}$. Die Operatoren $\hat{A}\hat{B}$ und $\hat{B}\hat{A}$ sind definiert durch die wiederholte Anwendung der Operatoren,

$$(\hat{A}\hat{B})\mathbf{a} = \hat{A}(\hat{B}\mathbf{a}), \quad (\hat{B}\hat{A})\mathbf{a} = \hat{B}(\hat{A}\mathbf{a}).$$

Wichtige Bemerkung: Die Operatoren $\hat{A}\hat{B}$ und $\hat{B}\hat{A}$ müssen nicht die gleichen Operatoren sein. Man nennt $[\hat{A}, \hat{B}] = \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}$ den “Kommutator”. Operatoren $\hat{A}, \hat{B}$ mit $[\hat{A}, \hat{B}] = 0$ werden “vertauschbar” genannt.

Beispiele von linearen Operatoren:

  - Der Nulloperator $\hat{0}$, definiert durch $\hat{0}\mathbf{a} = \mathbf{0}$ für alle $\mathbf{a}$;
  - Der Einheitsoperator $\hat{1}$, definiert durch $\hat{1}\mathbf{a} = \mathbf{a}$ für alle $\mathbf{a}$;
  - Die Projektion $\hat{P}_{\mathbf{e}}$.

- Sei $\mathbf{e}_1, \mathbf{e}_2, \ldots, \mathbf{e}_N$ eine orthonormale Basis für den Vektorraum V. Ein linearer Operator wird dann vollständig festgelegt durch die N^2 komplexen Zahlen $A_{ij} = (\mathbf{e}_i, \hat{A}\mathbf{e}_j)$. Diese Zahlen bilden eine $N \times N$-Matrix,

$$\begin{pmatrix} A_{11} & A_{12} & \cdots & A_{1N} \\ \vdots & & & \vdots \\ A_{N1} & A_{N2} & \cdots & A_{NN} \end{pmatrix}.$$

Sie werden die Matrixelemente des Operators $\hat{A}$ in der Basis $\mathbf{e}_1, \ldots, \mathbf{e}_N$ genannt. Wenn ein Vektor $\mathbf{a}$ durch seine Komponente

$$\mathbf{a} = \begin{pmatrix} a_1 \\ \vdots \\ a_N \end{pmatrix}$$

in einer orthonormalen Basis $\mathbf{e}_1, \cdots, \mathbf{e}_N$ dargestellt wird, so ist die Wirkung des Operators $\hat{A}$ nichts anderes als Multiplikation mit der Matrix der Matrixelemente A_{ij}.

- $\operatorname{tr}\hat{A} = \sum_{i=1}^{N} A_{ii}$ wird die Spur genannt.
- Ein Operator $\hat{A}$ mit $(\hat{A}\mathbf{a}, \hat{A}\mathbf{b}) = (\mathbf{a}, \mathbf{b})$ wird unitär genannt. Ein unitärer Operator bildet eine orthonormale Basis $\{\mathbf{e}_j\}$ auf eine andere orthonormale Basis $\{\mathbf{e}'_j\}$ ab, wobei $\mathbf{e}'_j = \hat{A}\mathbf{e}_j$.

2. Zu jedem Operator $\hat{A}$ gibt es den hermitesch konjugierten Operator $\hat{A}^\dagger$, der von der Eigenschaft

$$\left(A^\dagger \mathbf{a}, \mathbf{b}\right) = \left(\mathbf{a}, \hat{A}\mathbf{b}\right)$$

eindeutig festgelegt wird. Es gelten folgende Eigenschaften:

- $(\hat{A}^\dagger)^\dagger = \hat{A}$.
  Beweis: Es gilt $((\hat{A}^\dagger)^\dagger \mathbf{a}, \mathbf{b}) = (\mathbf{a}, \hat{A}^\dagger \mathbf{b}) = (\hat{A}^\dagger \mathbf{b}, \mathbf{a})^* = (\mathbf{b}, \hat{A}\mathbf{a})^* = (\hat{A}\mathbf{a}, \mathbf{b})$ für beliebige Vektoren $\mathbf{a}$ und $\mathbf{b}$.
- $(\hat{A}\hat{B})^\dagger = \hat{B}^\dagger \hat{A}^\dagger$.
- $(\lambda\hat{A} + \mu\hat{B})^\dagger = \lambda^* \hat{A}^\dagger + \mu^* \hat{B}^\dagger$.
- Für die "Matrixelemente" der hermitesch konjugierten Operator gilt $\left(A^\dagger\right)_{ij} = A^*_{ji}$.
  Beweis:
  $$(A^\dagger)_{ij} = (\mathbf{e}_i, \hat{A}^\dagger \mathbf{e}_j) = (\hat{A}^\dagger \mathbf{e}_j, \mathbf{e}_i)^* = (\mathbf{e}_j, \hat{A}^\dagger \mathbf{e}_i)^* = A^*_{ji}.$$
- Für einen unitären Operator $\hat{A}$ gilt $\hat{A}^\dagger \hat{A} = \hat{A}\hat{A}^\dagger = \hat{1}$.

3. Ein Operator $\hat{A}$ heißt hermitesch, wenn $\hat{A} = \hat{A}^\dagger$. In diesem Fall gilt, dass $A_{ij} = A^*_{ji}$.

   Beispiele: Die Operatoren $\hat{0}$ and $\hat{1}$ sind hermitesch; $\hat{P}_{\mathbf{e}}$ ist hermitesch.

   Wichtige Eigenschaften: Wenn zwei Operatoren $\hat{A}, \hat{B}$ hermitesch sind, dann ist die lineare Kombination $\lambda\hat{A} + \mu\hat{B}$ auch hermitesch, falls λ, μ reelle Zahlen sind. Aber das Produkt $\hat{A}\hat{B}$ ist nur hermitesch, wenn die Operatoren $\hat{A}$ und $\hat{B}$ vertauschbar sind.

4. Ein Vektor $\mathbf{e}_a \neq 0$ mit der Eigenschaft, dass $\hat{A}\mathbf{e}_a = a\mathbf{e}_a$, wobei a eine komplexe Zahl ist, ist ein Eigenvektor des Operators $\hat{A}$. Die Zahl a ist der zugehörige Eigenwert.

   - Die Eigenvektoren eines linearen Operators $\hat{A}$ zu einem bestimmten Eigenwert a bilden einen komplexen Vektorraum. Dieser Vektorraum wird mit V_a bezeichnet. Die Dimension N_a von V_a ist die Entartung des Eigenwertes a.

     Beweis: Seien $\mathbf{e}_{a,1}$ und $\mathbf{e}_{a,2}$ zwei Eigenvektoren zu der gleichen Eigenwert a. Dann $\hat{A}\mathbf{e}_{a,1} = a\mathbf{e}_{a,1}$ und $\hat{A}\mathbf{e}_{a,2} = a\mathbf{e}_{a,2}$. Damit gilt auch, dass $\hat{A}(\lambda\mathbf{e}_{a,1} + \mu\mathbf{e}_{a,2}) = \lambda\hat{A}\mathbf{e}_{a,1} + \mu\hat{A}\mathbf{e}_{a,2} = a(\lambda\mathbf{e}_{a,1} + \mu\mathbf{e}_{a,2})$, so dass $\lambda\mathbf{e}_{a,1} + \mu\mathbf{e}_{a,2}$ ein Eigenvektor des linearen Operators $\hat{A}$ zu der Eigenwert a ist.

     Sei $\mathbf{e}_{a,1}, \cdots, \mathbf{e}_{a,N_a}$ eine orthonormale Basis für V_a. Dann wird der Operator

     $$\hat{P}_a = \hat{P}_{\mathbf{e}_{a,1}} + \cdots + \hat{P}_{\mathbf{e}_{a,N_a}}$$

     die Projektion auf V_a genannt. Es gilt

     $$\hat{P}_a\mathbf{b} = \sum_{j=1}^{N_a} (\mathbf{e}_{a,j}, \mathbf{b})\mathbf{e}_{a,j}.$$

   - Wichtiges Theorem:
     - Alle Eigenwerte eines hermiteschen Operators $\hat{A}$ sind reell; die Eigenvektoren zu unterschiedlichen Eigenwerten sind orthogonal.
     - Es gibt eine orthonormale Basis für den Vektorraum V aus Eigenvektoren des Operators $\mathbf{A}$.

     Die zweite Behauptung ist ein wichtiges Ergebnis der linearen Algebra und wird hier nicht bewiesen. Um die erste Behauptung zu beweisen, bemerken wir, dass

     $$\hat{A}\mathbf{e}_a = a\mathbf{e}_a.$$

     Hieraus folgt einerseits, dass

     $$(\mathbf{e}_a, \hat{A}\mathbf{e}_a) = (\mathbf{e}_a, a\mathbf{e}_a) = a||\mathbf{e}_a||^2.$$

     Anderseits findet man, under Benützung der Tatsache, dass $\hat{A}$ hermitesch ist, dass auch

     $$(\mathbf{e}_a, \hat{A}\mathbf{e}_a) = (\hat{A}\mathbf{e}_a, \mathbf{e}_a) = (\mathbf{e}_a, \hat{A}\mathbf{e}_a)^* = a^*||\mathbf{e}_a||^2.$$

     Daraus folgt, dass $a = a^*$. Weiterhin, wenn $\mathbf{e}_a$ und $\mathbf{e}_b$ Eigenvektoren zu unterschiedlichen Eigenwerten a und b sind, d.h., $\hat{A}\mathbf{e}_a = a\mathbf{e}_a$ und $\hat{A}\mathbf{e}_b = b\mathbf{e}_b$ mit $a \neq b$, dann findet man, dass einerseits

     $$(\mathbf{e}_a, \hat{A}\mathbf{e}_b) = b(\mathbf{e}_a, \mathbf{e}_b),$$

während andererseits

$$(\mathbf{e}_a, \hat{A}\mathbf{e}_b) = (\hat{A}\mathbf{e}_a, \mathbf{e}_b) = a(\mathbf{e}_a, \mathbf{e}_b).$$

Hieraus folgt dann, dass $(\mathbf{e}_a, \mathbf{e}_b) = 0$.

5. Seien $\hat{A}$ und $\hat{B}$ zwei lineare Operatoren. Dann wird der Vektor $\mathbf{e}_{a,b}$ ein gemeinsamer Eigenvektor zu der Eigenwert-Kombination (a, b) genannt, wenn

$$\hat{A}\mathbf{e}_{a,b} = a\mathbf{e}_{a,b}, \quad \text{und} \quad \hat{B}\mathbf{e}_{a,b} = b\mathbf{e}_{a,b},$$

wobei a und b komplexe Zahlen sind. Die gemeinsamen Eigenvektoren zur Eigenwert-Kombination (a, b) bilden einen Vektorraum, $V_{a,b}$. Die Dimension $N_{a,b}$ dieses Vektorraums wird die Entartung dieser Eigenwert-Kombination genannt. Eine orthonormale Basis für $V_{a,b}$ wird dann von $N_{a,b}$ Vektoren $\mathbf{e}_{a,b,j}$, $j = 1, \ldots, N_{a,b}$, gebildet.

- Seien $\hat{A}$ und $\hat{B}$ zwei hermitesche Operatoren. Dann gilt folgende wichtige Eigenschaft: Es gibt eine orthonormale Basis von gemeinsamen Eigenvektoren $\mathbf{e}_{a,b,j}$ für den Vektorraum V dann, und nur dann, wenn $\hat{A}$ und $\hat{B}$ vertauschbar sind, $[\hat{A}, \hat{B}] = 0$.

  Beweis: Wenn es so eine Basis $\mathbf{e}_{a,b,j}$ gibt, dann gilt

  $$[\hat{A}, \hat{B}]\mathbf{e}_{a,b,j} = (ab - ba)\mathbf{e}_{a,b,j} = 0$$

  für alle Basisvektoren, und, daher, für den ganzen Vektorraum V. Umgekehrt, wenn $\mathbf{e}_a$ ein Eigenvektor des Operators $\hat{A}$ zu der Eigenwert a ist (d.h., $\mathbf{e}_a$ ist ein Element des Vektorraumes V_a), dann ist auch $\hat{B}\mathbf{e}_a$ ein Eigenvektor des Operators $\mathbf{A}$ zu der gleichen Eigenwert a, da aus $\hat{A}\hat{B} = \hat{B}\hat{A}$ folgt, dass

  $$\hat{A}(\hat{B}\mathbf{e}_a) = \hat{B}(\hat{A}\mathbf{e}_a) = \hat{B}(a\mathbf{e}_a) = a(\hat{B}\mathbf{e}_a).$$

  Deshalb kann dass Eigenwert-Problem des Operators $\hat{B}$ in jedem Vektorraum V_a der Eigenvektoren des Operators a getrennt gelöst werden. Die Basis von Eigenvektoren, die man in dieser Weise findet, besteht aus gemeinsamen Eigenvektoren der Operatoren $\hat{A}$ und $\hat{B}$.

- Ein Satz vertauschbarer hermitescher Operatoren $\hat{A}, \hat{B}, \hat{C}, \ldots$ heißt komplett, wenn die Eigenwert-Kombinationen $(a, b, c, \ldots)$ nicht entartet sind. [In anderen Worten: $N_{abc\ldots} = 1$ für jede Eigenwert-Kombination $(a, b, c, \ldots)$.] In diesem Fall sind die gemeinsamen Eigenvektoren $\mathbf{e}_{a,b,c,\cdots}$ eindeutig festgelegt, bis auf Multiplikation mit einem Phasenfaktor $e^{i\phi_{abc\ldots}}$.

3.3 Dirac Notation

1. Wir haben gesehen, dass die Wirkung eines linearen Operators als "Matrix Multiplikation" dargestellt werden kann. Das Gleiche gilt für den Skalarprodukt. Hierzu definiert man (rein formal) zum Vektorraum V den dualen Vektorraum $\overline{V}$, der die dualen Vektoren

$$\mathbf{a}^\dagger = (a_1^*, a_2^*, \cdots, a_N^*)$$

enthält. Der Skalar-Produkt $(\mathbf{a}, \mathbf{b})$ ist dann ein gewöhnliches Matrixprodukt,

$$(\mathbf{a}, \mathbf{b}) = \mathbf{a}^\dagger \mathbf{b}.$$

In dieser Notation gelten folgende Eigenschaften:

$$\begin{aligned} (\lambda \mathbf{a} + \mu \mathbf{b})^\dagger &= \lambda^* \mathbf{a}^\dagger + \mu^* \mathbf{b}^\dagger, \\ (\hat{A}\mathbf{a})^\dagger &= \mathbf{a}^\dagger \hat{A}^\dagger, \\ (\mathbf{a}, \hat{A}\mathbf{b}) &= \mathbf{a}^\dagger \hat{A}\mathbf{b} \quad \text{(als Matrixmultiplikation)}. \end{aligned}$$

2. Dirac hat eine besonders wirtschaftliche Notation für Vektoren und Skalarprodukte eingeführt. Diese Notation wird häufig in der Quantenmechanik benützt. In der Dirac Notation schreibt man Vektoren, duale Vektoren und Skalarprodukte als

$$\begin{array}{rcll} \mathbf{a} & \to & |\mathbf{a}\rangle & \text{“ket”} \\ \mathbf{a}^\dagger & \to & \langle \mathbf{a}| & \text{“bra”} \\ (\mathbf{a}, \mathbf{b}) & \to & \langle \mathbf{a}|\mathbf{b}\rangle & \text{“bra-ket”} \end{array}$$

Beispiele:

- $\hat{A}\mathbf{a} \to |\hat{A}\mathbf{a}\rangle = \hat{A}|\mathbf{a}\rangle$,
- $(\hat{A}\mathbf{a})^\dagger = \mathbf{a}^\dagger \hat{A}^\dagger \to \langle \hat{A}\mathbf{a}| = \langle \mathbf{a}|\hat{A}^\dagger$,
- $(\mathbf{a}, \hat{A}\mathbf{b}) = (\hat{A}^\dagger \mathbf{a}, \mathbf{b}) \to \langle \mathbf{a}|\hat{A}\mathbf{b}\rangle = (\langle \mathbf{a}|\hat{A})|\mathbf{b}\rangle = \langle \hat{A}^\dagger \mathbf{a}|\mathbf{b}\rangle = \langle \mathbf{a}|(\hat{A}|b\rangle)$.

Da $(\langle \mathbf{a}|\hat{A})|\mathbf{b}\rangle = \langle \mathbf{a}|(\hat{A}|b\rangle)$ schreibt man symmetrisch

$$(\langle \mathbf{a}|\hat{A})|\mathbf{b}\rangle = \langle \mathbf{a}|(\hat{A}|b\rangle) = \langle \mathbf{a}|\hat{A}|\mathbf{b}\rangle.$$

Vorteil der Dirac-Notation ist eine wirtschaftliche Darstellung:

- Eigenvektoren $\mathbf{e}_a$ eines Operators $\hat{A}$ werden durch den “ket” $|a\rangle$ dargestellt. (Dies ist vor allem hilfreich, wenn der Eigenwert a nicht entartet ist!)
- Den Projektionsoperator $\hat{P}_{\mathbf{e}}$ schreibt man dann als

  $$\hat{P}_{\mathbf{e}} = |\mathbf{e}\rangle\langle\mathbf{e}|.$$

  Beweis: Für einen willkürlichen Vektor $\mathbf{a}$, gilt dass

  $$\hat{P}_{\mathbf{e}}|\mathbf{a}\rangle = \langle\mathbf{e}|\mathbf{a}\rangle|\mathbf{e}\rangle.$$

- Die Orthonormalität und Vollständigkeit einer Basis $|a, j\rangle$ aus Eigenvektoren eines hermiteschen Operators $\hat{A}$, d.h., $\hat{A}|a, j\rangle = a|a, j\rangle$, wird dann geschrieben als

  $$\begin{aligned} \langle a, j|a', j'\rangle &= \delta_{aa'}\delta_{jj'}, \\ \sum_{a,j} |a, j\rangle\langle a, j| &= \hat{1}. \end{aligned}$$