1 Mathematische Grundlagen

1.1 Hilberträume

Definition 1 *Auf einem Vektorraum V heißt eine Abbildung $s : V \times V \to \mathbb{C}$* Skalarprodukt *genau dann, wenn gilt*

- *s ist linear in der zweiten Komponente*

$$\forall \vec{v}, \vec{w}, \vec{x} \in V, \alpha, \beta \in \mathbb{C} :$$
$$s(\vec{x}, \alpha\vec{v} + \beta\vec{w}) = \alpha s(\vec{x}, \vec{v}) + \beta s(\vec{x}, \vec{w}),$$

- *s ist semilinear in der ersten Komponente*

$$\forall \vec{v}, \vec{w}, \vec{x} \in V, \alpha, \beta \in \mathbb{C} :$$
$$s(\alpha\vec{v} + \beta\vec{w}, \vec{x}) = \alpha^* s(\vec{v}, \vec{x}) + \beta^* s(\vec{w}, \vec{x}),$$

- *$\forall \vec{v} \in V : s(\vec{v}, \vec{v}) \geq 0$, Gleichheit gilt nur für $\vec{v} = 0$* (positive Definitheit)*,*
- *$\forall \vec{v}, \vec{w} \in V : s(\vec{v}, \vec{w}) = s(\vec{w}, \vec{v})^*$* (Symmetrie-Eigenschaft)*.*

Man schreibt das Skalarprodukt als

$$s(\vec{v}, \vec{w}) = \langle \vec{v} | \vec{w} \rangle.$$

Einen Vektorraum mit Skalarprodukt heißt *Hilbertraum.* Es soll auch die mathematische Eigenschaft der Vollständigkeit erwähnt werden, die ein Hilbertraum erfüllen muß. Für endlichdimensionale Hilberträume, in denen man mit den reellen oder komplexen Zahlen multiplizieren kann, ist diese Bedingung immer erfüllt. In den sonstigen Fällen muß man nachweisen, daß dies der Fall ist, bevor man von einem Hilbertraum sprechen kann.

Satz 1 *Sei V ein Vektorraum mit Skalarprodukt. Für alle $\vec{v} \in V$ gilt, daß*

$$\langle \vec{v} | \vec{v} \rangle \in \mathbb{R}$$

Beweis: Wegen der Symmetrie ist

$$\langle \vec{v} | \vec{v} \rangle = \langle \vec{v} | \vec{v} \rangle^*.$$

Dies gilt genau, wenn $\langle \vec{v} | \vec{v} \rangle \in \mathbb{R}$. *qed.*

Man kann wegen $\langle \vec{v} | \vec{v} \rangle \in \mathbb{R}^+$ eine sogenannte Norm definieren.

Definition 2 *Man nennt die Abbildung auf einem Vektorraum V*

$$\|\cdot\| : V \to \mathbb{R}$$

eine Norm*, wenn gilt*

- *$\forall \vec{v} \in V : \|\vec{v}\| \geq 0$ und das Gleichheitszeichen gilt nur für den Nullvektor* (positive Definitheit)*,*
- *$\forall \vec{v} \in V, \lambda \in \mathbb{C} : \|\lambda\vec{v}\| = |\lambda| \, \|\vec{v}\|$* (Homogenität)*,*
- *$\forall \vec{v}, \vec{w} \in V : \|\vec{v} + \vec{w}\| \leq \|\vec{v}\| + \|\vec{w}\|$* (Dreiecksungleichung)*,*

Diese Norm hat die Eigenschaften wie der Betrag in den Zahlenmengen: Sie gibt immer Werte, die größer-gleich Null sind, nur der Nullvektor hat Norm Null. Außerdem stellt man sich vor, daß die Norm eines Vektors so etwas wie seine Länge ist. Genaugenommen legt man den Begriff Länge so fest. Die Norm der Differenz zweier Vektoren ist dann der Abstand dieser beiden Vektoren.

Definition 3 *In einem Vektorraum mit Skalarprodukt, definiert*

$$\|\vec{v}\| = \langle \vec{v} | \vec{v} \rangle \tag{1}$$

eine Norm.

Wenn man nur einen Vektorraum hat, kann man nicht unbedingt einen Begriff wie *Länge* definieren. Wenn es sich aber um einen Vektorraum mit Skalarprodukt handelt, so liefert dies nicht nur die Länge (gegeben durch die Norm), sondern auch Begriffe wie den Winkel φ, den zwei Vektoren bilden[1]. Dazu defniert man[2]

$$\cos\varphi = \frac{\langle \vec{v} | \vec{w} \rangle}{\|\vec{v}\| \, \|\vec{w}\|}.$$

Wenn das Skalarprodukt zweier Vektoren also Null ist, so stehen sie im Winkel $\varphi = \pi/2$ zueinander, bilden also einen rechten Winkel. Dazu sagt man auch, sie seien *orthogonal.* Das Skalarprodukt hat noch eine weitere wichtige Eigenschaft.

Man kann zu jedem Vektor $\vec{v} \in V$ eine lineare Abbildung $j_v : V \to \mathbb{C}$ finden. Der sogenannte Rieszsche-Darstellungssatz garantiert uns, daß man umgekehrt auch für jede lineare Abbildung h von V auf $\mathbb{C}$ einen Vektor in V findet, so daß $j_v = h$. Diese Abbildung findet man mit dem Skalarprodukt

$$j_v(\vec{w}) = \langle \vec{v} | \vec{w} \rangle.$$

Das rechtfertigt die Schreibweise

$$\vec{v} = |\vec{v}\rangle = |v\rangle$$

und vor allem

$$j_v = \langle \vec{v}| = \langle v|.$$

Durch diese Schreibweise wird die Definition der linearen Abbildung j_v intuitiv mit dem Skalarprodukt verbunden. Vektoren werden als *Ket* bezeichnet und die Linearformen $\langle \cdot |$ als *Bra.* Diese Bezeichnung spielt darauf an, daß das Skalarprodukt $\langle \cdot | \cdot \rangle$ von Klammern eingeschlossen wird, von *brackets.* Die Bra-Ket-Schreibweise wurde vom britischen Physiker P. A. M. Dirac in den zwanziger Jahren eingeführt und erleichert das Rechnen in der Quantenmechanik erheblich.

Satz 2 *Für alle $\vec{v}, \vec{w} \in V$ gilt*

$$|\langle \vec{v} | \vec{w} \rangle| \leq \|\vec{v}\| \, \|\vec{w}\| \tag{2}$$

(Cauchy-Schwarz-Ungleichung)*.*

[1]Winkel im allgemeinen werden nur für reelle Vektorräume definiert, meist auch dann nur für zwei, drei und vierdimensionale Vektorräume. Den Begriff *rechtwinkelig* bzw. *orthogonal* weitet man aber auch auf komplexe Vektorräume aus, in dem man sagt, zwei Vektoren seien genau dann orthogonal zueinander, wenn das Skalarprodukt der beiden gleich Null ist.

[2]Dies setzt strenggenommen die Cauchy-Schwarz-Ungleichung voraus, siehe Gl. (2)

Beweis: Erstens ist für jede komplexe Zahl λ

$$0 \leq \|\vec{v} + \lambda\vec{w}\|^2 \overset{(1)}{=} \langle \vec{v} + \lambda\vec{w} | \vec{v} + \lambda\vec{w} \rangle.$$

Setzt man $\lambda = -\langle \vec{w} | \vec{v} \rangle / \|\vec{w}\|^2$, so ergibt sich mit der Linearität des Skalarproduktes

$$\begin{aligned} 0 &\leq \langle \vec{v} + \lambda\vec{w} | \vec{v} + \lambda\vec{w} \rangle \\ &= \langle \vec{v} | \vec{v} \rangle - \frac{\langle \vec{w} | \vec{v} \rangle}{\|\vec{w}\|^2} \langle \vec{v} | \vec{w} \rangle - \frac{\langle \vec{w} | \vec{v} \rangle^*}{\|\vec{w}\|^2} \langle \vec{w} | \vec{v} \rangle - \frac{\langle \vec{w} | \vec{v} \rangle^*}{\|\vec{w}\|^2} \langle \vec{w} | \vec{v} \rangle + \\ &\qquad + \frac{\langle \vec{w} | \vec{v} \rangle \langle \vec{w} | \vec{v} \rangle^*}{\|\vec{w}\|^4} \langle \vec{w} | \vec{w} \rangle \\ &= \|\vec{v}\| - \frac{|\langle \vec{w} | \vec{v} \rangle|^2}{\|\vec{w}\|^2}. \end{aligned}$$

Daraus folgt

$$|\langle \vec{v} | \vec{w} \rangle|^2 \leq \|\vec{v}\|^2 \, \|\vec{w}\|^2 ,$$

und damit durch Wurzelziehen die Ungleichung.

qed.

1.2 Hilbertraum und Basisvektoren

Die Komponenten eines Vektors $\vec{v}$ geben an, wie stark der entsprechende Basisvektor zum Vektor $\vec{v}$ beiträgt. Wenn die Basisvektoren mit $\vec{e}^k$ bezeichnet werden[3], so gilt

$$\vec{v} = \begin{pmatrix} v_1 \\ v_2 \\ \vdots \end{pmatrix} = v_1 \vec{e}^1 + v_2 \vec{e}^2 + v_3 \vec{e}^3 + \ldots = \sum_i v_i \vec{e}^i.$$

Wenn man eine Basis hat, kann man diese orthogonalisieren und normalisieren. Das bedeutet, daß man die Vektoren so verändert, daß sie alle paarweise senkrecht aufeinander stehen und jeweils die Länge eins besitzen. Dies ist mit jeder beliebigen Basis möglich. Danach haben die Vektoren der Basis $\{\vec{e}^k | k \in I \subset \mathbb{N}\}$ folgende Eigenschaft

$$\langle \vec{e}^k | \vec{e}^l \rangle = 0 \quad \text{falls } k \neq l$$

und

$$\langle \vec{e}^k | \vec{e}^k \rangle = 1 \quad \text{für alle } k \in I \subset \mathbb{N}.$$

Dies bedeutet, daß der Vektor mit dem Index k nur in der k-ten Komponente den Eintrag 1 hat, sonst aber Null, sofern er in dieser Basis aufgeschrieben wird. Es werden hier nur noch solche *orthonormalen Basen* verwendet.

$$\vec{e}^k = (e_i^k)_i \quad \text{mit } e_i^k = 0 \text{ falls } k \neq i \text{ und } e_k^k = 1. \tag{3}$$

In dieser Situation kann man das Skalarprodukt zweier Vektoren folgendermaßen ausrechnen

$$\langle \vec{a} | \vec{c} \rangle = \langle \sum_i a_i \vec{e}^i | \sum_j c_j \vec{e}^j \rangle = \sum_{i,j} a_i^* c_j \langle \vec{e}^i | \vec{e}^j \rangle = \sum_i a_i^* c_i.$$

Außerdem ist die Komponente k eines Vektors mit der Beziehung (3) gegeben durch

$$\langle \vec{e}^k | \vec{a} \rangle = \sum_i e_i^{k*} a_i = a_k.$$

1.3 Operatoren

Auf einem Hilbertraum V kann man Abbildungen definieren.

$$\mathbf{A} : V \to V.$$

Hier sollen nur solche Abbildungen betrachtet werden, die linear sind. Dann nennt man die Abbildungen (lineare) *Operatoren.* Wenn man nun das Skalarprodukt und die Linearität der Operatoren ausnutzt, so kann man mit der Basis $\{\vec{e}^i | i \in I\}$ schließen, daß sich der Vektor $\vec{v}$ folgendermaßen mit dem Operator multiplizieren läßt

$$\begin{aligned} \langle \vec{e}^k | \mathbf{A}\vec{v} \rangle &= \langle \vec{e}^k | \sum_{j \in I} v_j \mathbf{A} \vec{e}^j \rangle \\ &= \sum_{j \in I} v_j \langle \vec{e}^k | \mathbf{A} \vec{e}^j \rangle. \end{aligned}$$

Dies bedeutet, man kann den Operator $\mathbf{A}$ schreiben als Matrix aus den Elementen

$$a_{ij} = \langle \vec{e}^i | \mathbf{A} \vec{e}^j \rangle.$$

Insbesondere kann man alle Eigenschaften des Operators durch die Angabe der entsprechenden Matrixelemente vollständig beschreiben. Wir können nun also jede quadratische Matrix als einen Operator auf einem Vektorraum entsprechender Dimension benutzen und umgekehrt jedem linearen Operator eine quadratische Matrix zuordnen.

Es gibt besondere Operatoren, die zusätzliche Eigenschaften haben. Zum Beispiel findet man zu jedem Operator $\mathbf{A}$ einen sogenannten *adjungierten* Operator $\mathbf{A}^\dagger$, der durch folgende Beziehung eindeutig bestimmt ist:

$$\langle w | \mathbf{A}\vec{v} \rangle = \langle \mathbf{A}^\dagger \vec{w} | \vec{v} \rangle \quad \text{für alle } \vec{v}, \vec{w} \in V.$$

Satz 3 *Die Elemente $a_{ij}^\dagger$ der Matrix des adjungierten Operators $\mathbf{A}^\dagger$ erfüllen $a_{ij}^\dagger = a_{ji}^*$.*

Beweis: Wenn man annimmt, daß man eine orthonormale Basis $\{\vec{e}_i | i \in I \subset \mathbb{N}\}$ kennt, so gilt

$$a_{ij}^\dagger = \langle \vec{e}^i | \mathbf{A}^\dagger \vec{e}^j \rangle = \langle \mathbf{A}^\dagger \vec{e}^j | \vec{e}^i \rangle^* = \langle \vec{e}^j | \mathbf{A} \vec{e}^i \rangle^* = a_{ji}^*.$$

qed.

Manche Operatoren haben die Eigenschaft, selbst ihr adjungierter Operator zu sein, also $\mathbf{A} = \mathbf{A}^\dagger$. Man nennt solche Operatoren *selbstadjungiert.* Auf der Ebene der Matrixdarstellung bedeutet dies, daß $a_{ij} = a_{ji}^*$ erfüllt ist. Die Diagonalelemente solcher Operatoren müssen deswegen reelle Zahlen sein.

Operatoren kann man auch miteinander verknüpfen, in dem man sie nacheinander auf einen Vektor anwendet

$$(\mathbf{AB})\vec{v} = \mathbf{A}(\mathbf{B}\vec{v}).$$

Zu vielen, aber nicht allen Operatoren gibt es einen sogenannten *inversen Operator* $\mathbf{A}^{-1}$. Dieser ist dadurch gegeben, daß gilt

$$\mathbf{A}\mathbf{A}^{-1} = \mathbb{1},$$

wobei $\mathbb{1}$ ein Operator ist, der jeden Vektor auf sich selbst abbildet. Er ist gegeben durch eine Matrix, die überall den

[3] Die oben stehende Zahl k ist ein weiterer Index, der den k-ten Basisvektor bezeichnet und nichts mit einer Potenz zu tun hat. Dies ist nötig, da wir die Basisvektoren durchnummerieren, von denen jeder auch noch verschiedene Vektorkomponenten besitzt, die dann mit e_i^k bezeichnet werden.

Eintrag Null hat, außer auf der Diagonalen von links oben nach rechts unten, wo nur Einsen stehen

$$\mathbb{1} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & \dots \\ 0 & 1 & 0 & \dots \\ 0 & 0 & 1 & \dots \\ \vdots & & & \end{pmatrix}$$

Ein weiterer wichtiger Fall sind Operatoren, deren inverser Operator gleich dem adjungierten Operator ist. Diese bezeichnet man als *unitäre* Operatoren

$$\mathbf{U}^{-1} = \mathbf{U}^{\dagger}.$$

Solche Operatoren haben einige interessante Eigenschaften. Erstens bleiben bei der Anwendung solcher Operatoren die Längen der Vektoren erhalten

$$\|\mathbf{U}\vec{v}\|^2 = \langle \mathbf{U}\vec{v}|\mathbf{U}\vec{v}\rangle = \langle \mathbf{U}^{\dagger}\mathbf{U}\vec{v}|\vec{v}\rangle = \langle \vec{v}|\vec{v}\rangle = \|\vec{v}\|^2 .$$

Im besonderen wird kein Vektor auf Null abgebildet außer dem Nullvektor selbst. Außerdem sind die Transformierten zweier rechtwinkeliger Vektoren auch orthogonal zueinander

$$\langle \mathbf{U}\vec{v}|\mathbf{U}\vec{w}\rangle = \langle \mathbf{U}^{\dagger}\mathbf{U}\vec{v}|\vec{w}\rangle = \langle \vec{v}|\vec{w}\rangle = 0.$$

Nimmt man nun an, es werde ein unitärer Operator auf einen Vektor angewendet, den man in der Basis $\{\vec{e}^i | i \in I \subset \mathbb{N}\}$ darstellt

$$\mathbf{U}\vec{x} = \mathbf{U}\sum_{i\in I} x_i \vec{e}^i = \sum_{i\in I} x_i \mathbf{U}\vec{e}^i.$$

Wenn man die Vektoren $\mathbf{U}\vec{e}^i = \vec{u}^i$ umbenennt, so weiß man, daß die Menge $\{\vec{u}^i | i \in I\}$ nur wechselseitig orthogonale Vektoren der Länge eins enthält. Außerdem ist es möglich, mit dieser Menge jeden Vektor $\vec{x}$ des Hilbertraumes darzustellen. Dies bedeutet aber, daß die Menge von Vektoren, die man durch die Transformierten einer orthonormalen Basis erhält, wieder eine orthonormale Basis bilden. Die unitären Operatoren beschreiben also einen Basiswechsel zwischen orthonormalen Basen.

Bestimmte Vektoren stehen in besonderem Zusammenhang mit den Operatoren. Es gibt nämlich solche Vektoren, die ein Operator wieder auf sich selbst bzw. ein Vielfaches davon abbildet

$$\mathbf{A}\vec{v} = \lambda_v \vec{v}.$$

Solche Vektoren nennt man *Eigenvektoren* und die komplexe Zahl $\lambda_v \in \mathbb{C}$ nennt man *Eigenwert* zum Eigenvektor $\vec{v}$. Da auch die Gleichung

$$\mathbf{A}\frac{\vec{v}}{\|\vec{v}\|} = \lambda_v \frac{\vec{v}}{\|\vec{v}\|}$$

gilt, nimmt man immer an, daß die Eigenvektoren die Länge eins haben, also normiert sind.

Wir kommen nun nochmals auf die selbstadjungierten Operatoren zurück.

Satz 4 *1. Die Eigenwerte zu einem selbstadjungierten Operator sind reelle Zahlen.*

2. Zwei Eigenvektoren mit verscheidenen Eigenwerten eines selbstadjungierten Operators sind orthogonal zueinander.

Beweis:

1. $$\lambda_v = \lambda_v \langle \vec{v}|\vec{v}\rangle = \langle \vec{v}|\mathbf{A}\vec{v}\rangle = \langle \mathbf{A}\vec{v}|\vec{v}\rangle = \langle \lambda_v \vec{v}|\vec{v}\rangle = \lambda_v^*.$$

2. Seien $\vec{v}$ und $\vec{w}$ Eigenvektoren des selbstadjungierten Operators $\mathbf{A}$.

$$0 = |\langle \mathbf{A}\vec{v}|\vec{w}\rangle - \langle \vec{v}|\mathbf{A}\vec{w}\rangle| = |\lambda_v - \lambda_w| \cdot |\langle \vec{v}|\vec{w}\rangle|.$$

Wenn aber der erste Faktor ungleich Null ist, so muß

$$\langle \vec{v}|\vec{w}\rangle = 0.$$

qed.

Wenn man die Menge der Eigenvektoren zu einer Basis ergänzt, so hat der Operator in dieser Basis Diagonalgestalt, d. h. nur die Diagonalelemente sind von Null verschieden. Auf der Diagonalen stehen dann die Eigenwerte, da

$$a_{ii} = \langle \vec{e}^i | \mathbf{A}\vec{e}^i\rangle = \lambda_i.$$

Jeder selbstadjungierte Operator läßt sich auf diese Weise in Diagonalform bringen.

$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} \lambda_1 & 0 & 0 & \dots \\ 0 & \lambda_2 & 0 & \dots \\ 0 & 0 & \lambda_3 & \dots \\ \vdots & & & \end{pmatrix}$$

Die Menge der Eigenwerte heiß auch das *Spektrum des Operators.*