Kapitel I

Elemente der Linearalgebra

I.1 Komplexe Vektorräume endlicher Dimension

I.1.1 Wiederholungen zu Vektorräumen

I.1.1 a Erste Definitionen

Sei eine Menge $\mathscr{V}$ versehen mit einer inneren Verknüpfung $\underset{\mathscr{V}}{+}\colon \mathscr{V}\times\mathscr{V}\to\mathscr{V}$, welche die folgenden Bedingungen erfüllt:

- Assoziativität: für alle $\vec{a},\vec{b},\vec{c}\in\mathscr{V}$ gilt $\vec{a}\underset{\mathscr{V}}{+}(\vec{b}\underset{\mathscr{V}}{+}\vec{c}) = (\vec{a}\underset{\mathscr{V}}{+}\vec{b})\underset{\mathscr{V}}{+}\vec{c}$; (I.1a)
- $\mathscr{V}$ besitzt ein neutrales Element $\vec{0}$ für $\underset{\mathscr{V}}{+}$ (*Nullvektor*): für alle $\vec{a}\in\mathscr{V}$ gilt $\vec{a}\underset{\mathscr{V}}{+}\vec{0}=\vec{a}$; (I.1b)
- jedes Element $\vec{a}\in\mathscr{V}$ hat ein inverses Element $(-\vec{a})$: $\vec{a}\underset{\mathscr{V}}{+}(-\vec{a}) = (-\vec{a})\underset{\mathscr{V}}{+}\vec{a}=\vec{0}$; (I.1c)
- Kommutativität: für alle $\vec{a},\vec{b}\in\mathscr{V}$ gilt $\vec{a}\underset{\mathscr{V}}{+}\vec{b}=\vec{b}\underset{\mathscr{V}}{+}\vec{a}$. (I.1d)

Sei auch ein kommutativer Körper $(\mathbb{K},\underset{\mathbb{K}}{+},\underset{\mathbb{K}}{\times})$ und eine Verknüpfung $*:\mathbb{K}\times\mathscr{V}\to\mathscr{V}$ mit den folgenden Eigenschaften:

- Distributivität (1): für alle $\vec{a},\vec{b}\in\mathscr{V}$ und $\lambda\in\mathbb{K}$ gilt $\lambda*(\vec{a}\underset{\mathscr{V}}{+}\vec{b}) = (\lambda*\vec{a})\underset{\mathscr{V}}{+}(\lambda*\vec{b})$; (I.1e)
- Distributivität (2): für alle $\vec{a}\in\mathscr{V}$ und $\lambda,\mu\in\mathbb{K}$ gilt $(\lambda\underset{\mathbb{K}}{+}\mu)*\vec{a} = (\lambda*\vec{a})\underset{\mathscr{V}}{+}(\mu*\vec{a})$; (I.1f)
- Gruppenoperation: für alle $\vec{a}\in\mathscr{V}$ und $\lambda,\mu\in\mathbb{K}$ gilt $(\lambda\underset{\mathbb{K}}{\times}\mu)*\vec{a}=\lambda*(\mu*\vec{a})$; (I.1g)
- das neutrale Element $1_{\mathbb{K}}$ für $\underset{\mathbb{K}}{\times}$ ist auch neutral für $*$: für alle $\vec{a}\in\mathscr{V}$ gilt $1_{\mathbb{K}}*\vec{a}=\vec{a}$. (I.1h)

Dann ist $\mathscr{V}$ versehen mit der *Vektoraddition* $\underset{\mathscr{V}}{+}$ und der *Skalarmultiplikation* $*$ ein *Vektorraum* über $\mathbb{K}$, dessen Elemente *Skalare* genannt werden.

Bemerkungen:

∗ Die Eigenschaften (I.1a)–(I.1d) besagen, dass $\mathscr{V}$ versehen mit $\underset{\mathscr{V}}{+}$ eine *kommutative* (oder *abelsche*[(a)]) *Gruppe* ist.

∗ In der Praxis werden die Addition in $\mathbb{K}$ und die Vektoraddition beide $+$ geschrieben, während die Multiplikation in $\mathbb{K}$ und die Skalarmultiplikation nicht geschrieben werden — beispielsweise wird Axiom (I.1f) zu $(\lambda+\mu)\vec{a}=\lambda\vec{a}+\mu\vec{a}$.

∗ In der Quantenmechanik wird $\mathbb{K}=\mathbb{C}$ sein, d.h. man arbeitet mit komplexen Vektorräumen.

Definition: Eine Teilmenge $\mathscr{V}'$ eines Vektorraums $\mathscr{V}$, die selbst ein Vektorraum (über dem gleichen Körper) ist, heißt *Untervektorraum*.

[(a)] N. H. Abel, 1802–1829

Definition: Sei $\mathscr{A}$ eine (nicht-leere) Teilmenge eines Vektorraums $\mathscr{V}$. Die Menge Span($\mathscr{A}$) aller Linearkombinationen der Elemente von $\mathscr{A}$ ist ein Vektorraum — ein Untervektorraum von $\mathscr{V}$ —, der *lineare Aufspann* (oder *lineare Hülle*) von $\mathscr{A}$:

$$\mathrm{Span}(\mathscr{A}) \equiv \left\{ \sum_i \lambda_i \vec{a}_i \;\middle|\; \lambda_i \in \mathbb{K}, \vec{a}_i \in \mathscr{A} \right\}. \tag{I.2}$$

I.1.1 b Vektorraumbasis

Jeder Vektorraum $\mathscr{V}$ besitzt (mindestens) eine *Basis*, d.h. eine erzeugende Familie — eine Teilmenge $\mathscr{B} = \{\vec{e}_j\} \subset \mathscr{V}$ mit $\mathrm{Span}(\mathscr{B}) = \mathscr{V}$ —, deren Vektoren linear unabhängig sind.(1)
Falls die Basis aus einer endlichen Anzahl N von Vektoren $\mathscr{B} = \{\vec{e}_1, \dots, \vec{e}_N\}$ besteht, ist der Vektorraum $\mathscr{V}$ endlichdimensional und seine Dimension ist gerade $\dim \mathscr{V} = N$.

Jeder Vektor $\vec{a}$ des Raumes lässt sich eindeutig als (endliche(2)) Linearkombination von Basisvektoren darstellen:

$$\vec{a} = \sum_{j=1}^{N} a^j\, \vec{e}_j. \tag{I.3}$$

Anhand der Komponenten $\{a^j\}$ kann man einen Spaltenvektor schreiben — der traditionell auch mit $\vec{a}$ bezeichnet wird:

$$\vec{a} \cong \begin{pmatrix} a^1 \\ \vdots \\ a^N \end{pmatrix}, \tag{I.4}$$

wobei die in diesem Skript benutzt Notation $\cong$ für „wird dargestellt durch" steht.

I.1.1 c Summen und Produkte von Vektorräumen

Direkte Summe

Seien $\mathscr{V}_1, \dots, \mathscr{V}_k$ eine Familie von k Untervektorräumen eines Vektorraums $\mathscr{V}$. Dann ist der lineare Aufspann der Vereinigung $\mathscr{V}_1 \cup \cdots \cup \mathscr{V}_k$ ein mit $\mathscr{V}_1 + \cdots + \mathscr{V}_k$ bezeichneter Vektorraum, dessen Elemente sich als $\vec{a}_1 + \cdots + \vec{a}_k$ mit $\vec{a}_i \in \mathscr{V}_i$ schreiben lassen:

$$\sum_{i=1}^{k} \mathscr{V}_i \equiv \mathrm{Span}\Big(\bigcup_{i=1}^{k} \mathscr{V}_i\Big) \tag{I.5}$$

Wenn jeder Vektor $\vec{a}$ der Summe $\mathscr{V}_1 + \cdots + \mathscr{V}_k$ sich *eindeutig* als $\vec{a} = \vec{a}_1 + \cdots + \vec{a}_k$ mit $\vec{a}_i \in \mathscr{V}_i$ zerlegen lässt, wird die Summe *direkte Summe* genannt und mit $\mathscr{V}_1 \oplus \cdots \oplus \mathscr{V}_k$ bezeichnet.
In diesem Fall reduziert sich der Schnitt zweier beliebiger unterschiedlicher Untervektorräume $\mathscr{V}_i$, $\mathscr{V}_j$ mit $i \neq j$ auf den Nullvektor $\mathscr{V}_i \cap \mathscr{V}_j = \{\vec{0}\}$.

Wenn $\mathscr{V}_1$, $\mathscr{V}_2$ mit $\mathscr{V}_1 \cap \mathscr{V}_2 = \{\vec{0}\}$ zwei Untervektorräume eines Vektorraums $\mathscr{V}$ sind, deren direkte Summe der ganze Raum ist, $\mathscr{V}_1 \oplus \mathscr{V}_2 = \mathscr{V}$, heißen sie *komplementär*.
Zu einem Unterraum $\mathscr{V}_1$ eines Vektorraums $\mathscr{V}$ existiert immer ein (im Allgemeinen nicht eindeutiger) komplementärer Untervektorraum oder *Komplement*.

Direktes Produkt

Seien $\mathscr{V}$, $\mathscr{V}'$ zwei Vektorräume über den gleichen Körper $\mathbb{K}$. Dann kann deren (kartesisches) Produkt — bestehend aus den geordneten Paaren $(\vec{a}, \vec{a}')$ mit $\vec{a} \in \mathscr{V}$ und $\vec{a} \in \mathscr{V}'$ — natürlich mit einer Vektoraddition und einer Skalarmultiplikation versehen werden: der resultierende Vektorraum

(1) d.h. eine Linearkombination $\sum_i \lambda_i \vec{e}_i$ ist genau gleich dem Nullvektor $\vec{0}$, wenn alle Koeffizienten λ_i Null sind.
(2) Diese Präzisierung gilt nur für Vektorräume unendlicher Dimension — in einem Vektorraum endlicher Dimension ist sie unnötig, da es nur endlich viele Basisvektoren gibt.

$\mathscr{V} \times \mathscr{V}'$ heißt *direktes Produkt*. Wenn $\mathscr{V}$ und $\mathscr{V}'$ endlichdimensional sind, so ist der Raum $\mathscr{V} \times \mathscr{V}'$ und $\dim(\mathscr{V} \times \mathscr{V}') = \dim \mathscr{V} + \dim \mathscr{V}'$.

Sowohl die Definition als das Ergebnis für die Dimension lassen sich problemlos auf das direkte Produkt mehrerer Vektorräume verallgemeinern.

Tensorprodukt

Seien wieder zwei Vektorräume $\mathscr{V}$, $\mathscr{V}'$ über den gleichen Körper $\mathbb{K}$ mit jeweiligen Basen $\{\vec{e}_i\}$ und $\{\vec{e}'_j\}$. Dann ist deren *Tensorprodukt* $\mathscr{V} \otimes \mathscr{V}'$ ein Vektorraum über $\mathbb{K}$, in dem es eine Basis $\{\mathbf{e}_{ij} \equiv \vec{e}_i \otimes \vec{e}'_j\}$ gibt, die sich auf eindeutige Weise mit den geordneten Paaren $(\vec{e}_i, \vec{e}'_j)$ identifizieren lässt. Demzufolge ist $\mathscr{V} \otimes \mathscr{V}'$ von Dimension $\dim \mathscr{V} \otimes \mathscr{V}' = \dim \mathscr{V} \dim \mathscr{V}'$.

Wieder verallgemeinert man ohne Schwierigkeit die Definition auf das Tensorprodukt mehrerer Vektorräume.

I.1.2 Operatoren auf einem Vektorraum

I.1.2 a Lineare Operatoren

Seien $\mathscr{V}$ und $\mathscr{V}'$ zwei Vektorräume über den gleichen Körper $\mathbb{K}$. Als *lineare Abbildung* oder auch *linearer Operator* von $\mathscr{V}$ nach $\mathscr{V}'$ bezeichnet man eine Abbildung $\hat{A}$, welche die lineare Struktur der Vektorräume erhält, d.h. für alle $\vec{a}, \vec{b} \in \mathscr{V}$ und $\lambda \in \mathbb{K}$ gilt

$$\hat{A}(\lambda\vec{a} + \vec{b}) = \lambda\hat{A}(\vec{a}) + \hat{A}(\vec{b}). \tag{I.6}$$

In endlicher Dimension lassen sich lineare Operatoren in Matrixform darstellen. Sei $\hat{A}$ ein solcher linearer Operator und $\mathscr{B} = \{\vec{e}_j\}_{j=1,\dots,N}$ bzw. $\mathscr{B}' = \{\vec{e}'_i\}_{i=1,\dots,N'}$ eine Basis von $\mathscr{V}$ bzw. $\mathscr{V}'$, wobei $N \equiv \dim \mathscr{V}$ bzw. $N' \equiv \dim \mathscr{V}'$. Die Komponente von $\hat{A}(\vec{e}_j)$ entlang $\vec{e}'_i$ sei mit A_{ij} bezeichnet:

$$\hat{A}(\vec{e}_j) = \sum_{i=1}^{N'} A_{ij}\, \vec{e}'_i. \tag{I.7a}$$

Anhand der Zahlen A_{ij} kann man eine Matrix A mit N' Zeilen und N Spalten bilden, mit deren Hilfe sich die Wirkung des Operators auf einen Vektor als

$$\hat{A}(\vec{a}) = \sum_{i,j} A_{ij}\, a^j\, \vec{e}'_i \cong A\,\vec{a} \tag{I.7b}$$

mit einem Matrixprodukt schreiben lässt, wobei im zweiten Glied die Zerlegung (I.3) und im dritten Glied die Darstellung (I.4) von Vektoren als Spaltenvektoren benutzt wurden.

Eigenelemente eines Operators

Definition: Sei $\hat{A}$ ein *Endomorphismus* von $\mathscr{V}$, d.h. ein linearer Operator von $\mathscr{V}$ nach sich selbst. Ein Vektor $\vec{a} \in \mathscr{V}$, wobei $\vec{a} \neq \vec{0}$, und eine skalare Zahl $\lambda \in \mathbb{K}$ werden Eigenvektor bzw. Eigenwert zu $\hat{A}$ genannt, wenn sie die Bedingung

$$\hat{A}(\vec{a}) = \lambda\vec{a} \tag{I.8}$$

erfüllen. Die Menge der Eigenwerte eines Operators heißt dessen *Spektrum*.

Die Eigenwerte zu einem linearen Operator $\hat{A}$ sind die Wurzel der Gleichung

$$\det\left(\hat{A} - \lambda\hat{\mathbb{1}}_{\mathscr{V}}\right) = 0, \tag{I.9}$$

wobei $\hat{\mathbb{1}}_{\mathscr{V}}$ den Identitätsoperator auf $\mathscr{V}$ bezeichnet. Die Determinante auf der linken Seite der Gleichung heißt *charakteristisches Polynom*.

Definition: Wenn mehrere linear unabhängige Eigenvektoren demselben Eigenwert entsprechen, so wird dieser Eigenwert *entartet* genannt.

Die Eigenvektoren zu einem gegebenen Eigenwert λ bilden einen Untervektorraum von $\mathscr{V}$, den *Eigenraum* zu λ.

Projektoren

Seien $\mathscr{V}_1$, $\mathscr{V}_2$ zwei komplementäre Untervektorräume eines Vektorraums $\mathscr{V}$. Jeder Vektor $\vec{a} \in \mathscr{V}$ lässt sich dann eindeutig als $\vec{a} = \vec{a}_1 + \vec{a}_2$ mit $\vec{a}_1 \in \mathscr{V}_1$ und $\vec{a}_2 \in \mathscr{V}_2$ zerlegen (vgl. § I.1.1 c).

Definition: Der Endomorphismus $\hat{\mathcal{P}}$ auf $\mathscr{V}$, der $\vec{a}$ auf $\vec{a}_1$ abbildet, heißt *Projektion* oder *Projektor* auf $\mathscr{V}_1$ entlang $\mathscr{V}_2$.

Offensichtlich ist das Bild dieses Projektors eigentlich $\mathscr{V}_1$, und dessen Kern $\mathscr{V}_2$. Dazu prüft man problemlos, dass der Projektor $\hat{\mathcal{P}}$ die Eigenschaft

$$\hat{\mathcal{P}}^2 = \hat{\mathcal{P}} \tag{I.10}$$

erfüllt. Umgekehrt ist jede lineare Abbildung $\hat{\mathcal{P}}$, die dieser Eigenschaft genügt, ein Projektor.

Gleichung (I.10) zeigt insbesondere, dass die möglichen Eigenwerte eines Projektors 0 (für die Vektoren des Kerns) und 1 (für die Vektoren des Bildes) sind.

Bemerkung: Der Identitätsoperator $\hat{\mathbb{1}}_{\mathscr{H}}$ auf dem Hilbert-Raum ist ein (besonderer!) Projektor.

I.1.2 b Linearforme

Wenn die Zielmenge $\mathscr{V}'$ eines linearen Operators auf $\mathscr{V}$ der Körper $\mathbb{K}$ der Skalare ist, spricht man von einer *Linearform* auf $\mathscr{V}$. Der (Vektor)Raum der Linearforme auf $\mathscr{V}$ heißt (algebraischer) *Dualraum* und wird mit $\mathscr{V}^*$ bezeichnet.

Sei $\{\underset{\sim}{\epsilon}^i\}$ eine Basis von $\mathscr{V}^*$, wobei Linearforme mit einer untergestellten Tilde bezeichnet werden. In Übereinstimmung mit Gl. (I.3) lautet die Zerlegung einer Linearform auf dieser Basis

$$\underset{\sim}{h} = \sum_i h_i \underset{\sim}{\epsilon}^i. \tag{I.11}$$

Somit lautet die Wirkung einer Linearform $\underset{\sim}{h}$ auf einen Vektor $\vec{a} = \sum_j a^j \,\vec{\mathrm{e}}_j$

$$\underset{\sim}{h}(\vec{a}) = \sum_{i,j} h_i \, a^j \, \underset{\sim}{\epsilon}^i\big(\vec{\mathrm{e}}_j\big). \tag{I.12}$$

Dieser Ausdruck nimmt eine besonders einfache Form an, wenn $\{\underset{\sim}{\epsilon}^i\}$ von $\mathscr{V}^*$ die *duale Basis* zur Basis $\{\vec{\mathrm{e}}_j\}$ von $\mathscr{V}$ ist, d.h. wenn

$$\underset{\sim}{\epsilon}^i\big(\vec{\mathrm{e}}_j\big) = \delta_{ij} \quad \forall i,j \tag{I.13}$$

gilt, mit dem Kronecker[(b)]-Delta δ_{ij}: dann wird Gl. (I.12) zu

$$\underset{\sim}{h}(\vec{a}) = \sum_i h_i \, a^i. \tag{I.14}$$

Wenn der Vektorraum $\mathscr{V}$ endlichdimensional ist, so ist sein Dualraum $\mathscr{V}^*$ und $\dim \mathscr{V}^* = \dim \mathscr{V}$. Trägt man dann die Komponenten $\{h_i\}$ in einen N-komponentigen Zeilenvektor

$$\underset{\sim}{h} \cong \big(h_1 \;\ldots\; h_N\big) \tag{I.15}$$

mit $N = \dim \mathscr{V}$ ein, so lässt sich auch Gl. (I.14) in der Form des Matrixprodukts von diesem Zeilenvektor mit dem Spaltenvektor $\vec{a}$ aus Gl. (I.4)

$$\underset{\sim}{h}(\vec{a}) = \sum_{i=1}^{N} h_i \, a^i = \big(h_1 \;\ldots\; h_N\big) \begin{pmatrix} a^1 \\ \vdots \\ a^N \end{pmatrix} \tag{I.16}$$

schreiben.

[(b)] L. Kronecker, 1823–1891

I.1.2 c Antilineare Operatoren

Seien $\mathscr{V}$ und $\mathscr{V}'$ zwei Vektorräume über $\mathbb{C}$. Ein *antilinearer* (oder *semilinearer*) *Operator* von $\mathscr{V}$ nach $\mathscr{V}'$ ist eine Abbildung $\hat{A}$ derart, dass für alle $\vec{a}, \vec{b} \in \mathscr{V}$ und $\lambda \in \mathbb{C}$

$$\hat{A}(\lambda\vec{a} + \vec{b}) = \lambda^* \hat{A}(\vec{a}) + \hat{A}(\vec{b}) \tag{I.17}$$

gilt, wobei λ^* das komplex Konjugierte von λ bezeichnet.

Sei $\hat{A}$ ein solcher Operator. Unter Einführung von Basen $\{\vec{e}_j\}$ bzw. $\{\vec{e}'_i\}$ in $\mathscr{V}$ bzw. $\mathscr{V}'$ kann man die Komponente A_{ij} von $\hat{A}(\vec{e}_j)$ entlang $\vec{e}'_i$ einführen:

$$\hat{A}(\vec{e}_j) = \sum_i A_{ij}\,\vec{e}'_i. \tag{I.18a}$$

Dann lässt sich die Wirkung des Operators auf einen Vektor $\vec{a} = \sum_j a^j\,\vec{e}_j$ als

$$\hat{A}(\vec{a}) = \sum_{i,j} A_{ij}\,(a^j)^*\,\vec{e}'_i \tag{I.18b}$$

schreiben. Wenn $\mathscr{V}$ und $\mathscr{V}'$ endlichdimensional sind, kann man mit den A_{ij} eine Matrix A bilden, und die letztere Gleichung lässt sich auch als

$$\hat{A}(\vec{a}) \cong A\,\vec{a}^* \tag{I.18c}$$

darstellen, wobei $\vec{a}^*$ für einen Spaltenvektor mit Einträgen $(a^j)^*$ steht, vgl. Gl. (I.4).

I.1.3 Metrische Struktur auf einem komplexen Vektorraum

I.1.3 a Hermitesches Skalarprodukt

Um die Norm eines Vektors oder den Abstand zwischen zwei Vektoren definieren zu können, wird ein *hermitesches*[(c)] *Skalarprodukt* über dem komplexen Vektorraum $\mathscr{V}$ eingeführt. Dabei handelt es sich um eine Abbildung $\Phi : \mathscr{V} \times \mathscr{V} \to \mathbb{C}$, welche die folgenden Eigenschaften hat:

- Φ ist linear im zweiten Argument:

$$\Phi(\vec{a}, \lambda\vec{b} + \vec{c}) = \lambda\Phi(\vec{a}, \vec{b}) + \Phi(\vec{a}, \vec{c}) \qquad \forall\,\vec{a}, \vec{b}, \vec{c} \in \mathscr{V} \text{ und } \lambda \in \mathbb{C}. \tag{I.19a}$$

- Φ besitzt die hermitesche Symmetrie

$$\Phi(\vec{a}, \vec{b}) = \Phi(\vec{b}, \vec{a})^* \qquad \forall\,\vec{a}, \vec{b} \in \mathscr{V}. \tag{I.19b}$$

- Φ ist *positiv*

$$\Phi(\vec{a}, \vec{a}) \geq 0 \qquad \forall\,\vec{a} \in \mathscr{V} \tag{I.19c}$$

  und *definit*

$$\Phi(\vec{a}, \vec{a}) = 0 \quad \text{genau dann, wenn } \vec{a} = \vec{0}. \tag{I.19d}$$

Versehen mit dem Skalarprodukt Φ heißt der Vektorraum $\mathscr{V}$ (komplexer) *Prähilbertraum.*[(d)]

Bemerkungen:

∗ Aus den Bedingungen (I.19a)–(I.19b) folgt, dass Φ antilinear im ersten Argument ist:

$$\Phi(\lambda\vec{a} + \vec{b}, \vec{c}) = \lambda^*\Phi(\vec{a}, \vec{c}) + \Phi(\vec{a}, \vec{c}) \qquad \forall\,\vec{a}, \vec{b}, \vec{c} \in \mathscr{V} \text{ und } \lambda \in \mathbb{C}. \tag{I.19e}$$

Somit ist Φ eine (hermitesche) *Sesquilinearform.*[(3)]

[(3)] Mathematiker definieren üblicherweise Sesquilinearforme mit Linearität im ersten und Antilinearität im zweiten Argument.

[(c)] C. Hermite, 1822–1901 [(d)] D. Hilbert, 1862–1943

∗ Wiederum führt die Positiv-Definitheit (I.19c)–(I.19d) zur *Cauchy*[(e)]*–Schwarz*[(f)]*-Ungleichung*

$$\left|\Phi(\vec{a},\vec{b})\right| \leq \sqrt{\Phi(\vec{a},\vec{a})\Phi(\vec{b},\vec{b})} \tag{I.20}$$

für alle $\vec{a},\vec{b} \in \mathscr{V}$, wobei Gleichheit genau dann gilt, wenn $\vec{a}$ und $\vec{b}$ linear abhängig sind.

∗ Alternative gebräuchliche Notationen für das hermitesche Skalarprodukt sind

$$\Phi(\vec{a},\vec{b}) \equiv \big(\vec{a},\vec{b}\big) \equiv \langle\vec{a},\vec{b}\rangle.$$

In der Quantenmechanik wird noch eine weitere Notation benutzt, die im Abschn. I.2 eingeführt wird.

∗ Die vom Skalarprodukt Φ induzierte Norm auf $\mathscr{V}$ ist definiert als

$$||\vec{a}|| \equiv \sqrt{\Phi(\vec{a},\vec{a})} \tag{I.21}$$

für jeden Vektor $\vec{a} \in \mathscr{V}$.

Sei $\mathscr{B} = \{\vec{e}_i\}$ eine beliebige Basis von $\mathscr{V}$ und $\{a^i\}_{i=1,\dots,N}$, $\{b^j\}_{j=1,\dots,N}$ die Komponenten zweier Vektoren $\vec{a}$, $\vec{b}$ auf $\mathscr{B}$. Unter Nutzung der Eigenschaften (I.19a) und (I.19e) lautet ihr Skalarprodukt

$$\Phi(\vec{a},\vec{b}) = \sum_{i,j=1}^{N} (a^i)^* b^j\, \Phi(\vec{e}_i,\vec{e}_j). \tag{I.22}$$

Somit ist die Wirkung der Sesquilinearform völlig durch die komplexen Zahlen $\Phi(\vec{e}_i,\vec{e}_j)$ bestimmt. Dementsprechend definiert man eine $N \times N$-Matrix $M_{\mathscr{B}}(\Phi)$ mit Elementen $[M_{\mathscr{B}}(\Phi)]_{ij} \equiv \Phi(\vec{e}_i,\vec{e}_j)$. Wegen der hermiteschen Symmetrie (I.19b) gilt $[M_{\mathscr{B}}(\Phi)]_{ij} = [M_{\mathscr{B}}(\Phi)]^*_{ji}$ bzw. in Matrixform

$$M_{\mathscr{B}}(\Phi) = \big([M_{\mathscr{B}}(\Phi)]^*\big)^{\mathsf{T}} \equiv M_{\mathscr{B}}(\Phi)^\dagger, \tag{I.23}$$

d.h. $M_{\mathscr{B}}(\Phi)$ ist gleich ihrer *adjungierten Matrix*: $M_{\mathscr{B}}(\Phi)$ heißt *hermitesch*.

Schreibt man jetzt die Komponenten $\{b^j\}$ von $\vec{b}$ als einen (auch mit $\vec{b}$ bezeichneten) Spaltenvektor und die komplex-konjugierten Komponenten $\{(a^i)^*\}$ von $\vec{a}$ als einen mit $\vec{a}^\dagger$ bezeichneten Zeilenvektor, so lässt sich Gl. (I.22) als

$$\Phi(\vec{a},\vec{b}) = \vec{a}^\dagger M_{\mathscr{B}}(\Phi)\,\vec{b} \tag{I.24}$$

umschreiben.

I.1.3 b Orthonormalbasis

Die Ausdrücke (I.22) oder (I.24) vereinfachen sich im Fall einer *Orthonormalbasis*, d.h. wenn die Basisvektoren $\{\vec{e}_i\}$ orthogonal (für das Skalarprodukt Φ) und auf 1 normiert sind:

$$\Phi(\vec{e}_i,\vec{e}_j) = \delta_{ij} \quad \forall i,j. \tag{I.25}$$

Anhand des *Gram*[(g)]*–Schmidt*[(h)] *Orthogonalisierungsverfahrens* kann man ausgehend von einer beliebigen Basis $\{\vec{e}_i''\}$ erstens eine Orthogonalbasis $\{\vec{e}_i'\}$, deren Basisvektoren orthogonal sind, finden. Dann kann jeder $\vec{e}_i'$ reskaliert werden, um einen neuen Vektor $\vec{e}_i$ mit Norm 1 zu geben, woraus sich die Orthonormalbasis $\{\vec{e}_i\}$ ergibt.

In einer Orthonormalbasis gilt nämlich

$$\Phi(\vec{a},\vec{b}) = \sum_{i=1}^{N} (a^i)^* b^i = \Big((a^1)^* \;\dots\; (a^N)^*\Big)\begin{pmatrix} b^1 \\ \vdots \\ b^N \end{pmatrix} = \vec{a}^\dagger\,\vec{b}. \tag{I.26}$$

(e) A.-L. Cauchy, 1789–1857 (f) H. A. Schwarz, 1843–1921 (g) J. P. Gram, 1850–1916 (h) E. Schmidt, 1876–1959

Dabei sieht es ähnlich der Gl. (I.16) aus, welche die Wirkung auf einen Vektor — hier $\vec{b}$ mit Komponenten $\{b^i\}$ — von einer Linearform — hier mit Komponenten $(a^i)^*$ — angibt. In der Tat ist die Abbildung $\vec{b} \to \Phi(\vec{a}, \vec{b})$ bei festem $\vec{a} \in \mathscr{V}$ eine Linearform auf $\mathscr{V}$.

In einer Orthonormalbasis lässt sich die Komponente eines Vektors $\vec{a}$ entlang eines der Basisvektoren einfach finden: indem man das Skalarprodukt aus $\vec{e}_j$ mit der allgemeinen Zerlegung (I.27) bildet, ergibt sich nämlich

$$\vec{a} = \sum_{j=1}^{N} a^j \, \vec{e}_j \quad \text{mit} \quad a^j = \Phi(\vec{e}_j, \vec{a}). \tag{I.27}$$

Sei $\hat{A}$ ein Endomorphismus von $\mathscr{V}$; die Beziehung (I.7a) lautet dann

$$\hat{A}(\vec{e}_j) = \sum_k A_{kj} \, \vec{e}_k.$$

Wenn $\{\vec{e}_j\}$ eine Orthonormalbasis ist, lautet das Skalarprodukt aus einem Basisvektor $\vec{e}_i$ und dieser Gleichung unter Verwendung der Linearität von Φ im zweiten Argument

$$\Phi\big(\vec{e}_i, \hat{A}(\vec{e}_j)\big) = \sum_k A_{kj} \, \Phi(\vec{e}_i, \vec{e}_k) = \sum_k A_{kj} \, \delta_{ik}$$

d.h. noch

$$A_{ij} = \Phi\big(\vec{e}_i, \hat{A}(\vec{e}_j)\big). \tag{I.28}$$

I.1.3 c Adjungierter Operator

Sei $\hat{A}$ ein linearer Operator, der Einfachheit halber von einem komplexen Prähilbertraum $\mathscr{V}$ in sich selbst.[(4)] Der dazu *adjungierte Operator* $\hat{A}^\dagger : \mathscr{V} \to \mathscr{V}$ ist so definiert, dass für alle Vektoren $\vec{a}, \vec{b} \in \mathscr{V}$ die Gleichung

$$\Phi\big(\vec{a}, \hat{A}^\dagger(\vec{b})\big) = \Phi\big(\hat{A}(\vec{a}), \vec{b}\big) = \Phi\big(\vec{b}, \hat{A}(\vec{a})\big)^* \tag{I.29}$$

gilt, wobei die zweite Gleichung einfach das Axiom (I.19b) ist.

Nach Angabe einer Orthonormalbasis $\mathscr{B} = \{\vec{e}_i\}$ gibt das Ersetzen von $\vec{a}$ bzw. $\vec{b}$ durch $\vec{e}_i$ bzw. $\vec{e}_j$ in Gl. (I.29)

$$\Phi\big(\vec{e}_i, \hat{A}^\dagger(\vec{e}_j)\big) = \Phi\big(\vec{e}_j, \hat{A}(\vec{e}_i)\big)^*,$$

was unter Berücksichtigung der Gl. (I.28) zu

$$\big(\hat{A}^\dagger\big)_{ij} = A^*_{ji} \tag{I.30}$$

führt. Wenn $\mathscr{V}$ endlichdimensional ist, ist die Matrix des adjungierten Operators $\hat{A}^\dagger$ in der Basis $\mathscr{B}$ die adjungierte Matrix $A^\dagger$ zur Matrix A, die den Operator $\hat{A}$ bezüglich $\mathscr{B}$ darstellt.

Aus der Definition (I.29) oder der Charakterisierung (I.30) folgert man einfach, dass der adjungierte Operator zum Produkt (Hintereinanderausführen) $\hat{A}\hat{B}$ zweier Operatoren $\hat{A}$, $\hat{B}$ auf einem Prähilbertraum $\mathscr{V}$ durch[(5)]

$$\big(\hat{A}\hat{B}\big)^\dagger = \hat{B}^\dagger \hat{A}^\dagger \tag{I.31}$$

gegeben ist.

Wenn ein Operator mit seinem adjungierten Operator übereinstimmt, $\hat{A} = \hat{A}^\dagger$, wird er *selbstadjungierter Operator* genannt — oder auch, durch Physiker, *hermitescher Operator*. In diesem Fall und in endlicher Dimension stimmen nämlich auch die darstellenden Matrizen A und $A^\dagger$ in einer Orthonormalbasis überein, d.h. die Matrix A ist hermitesch. Weitere Eigenschaften von hermiteschen Operatoren werden in Abschn. I.2.4 diskutiert.

Wiederum heißt ein linearer Operator, der $\hat{A}^\dagger = -\hat{A}$ erfüllt, *antihermitesch*.

[(4)] Betrachtet man einen linearen Operator $\hat{A} : \mathscr{V} \to \mathscr{V}'$, so ist dessen adjungierter Operator von $\mathscr{V}'$ nach $\mathscr{V}$ und man soll in der definierenden Gleichung (I.29) die Skalarprodukte auf $\mathscr{V}$ und $\mathscr{V}'$ unterscheiden.

[(5)] In diesem Skript wird das Produkt (die Verkettung) zweier Operatoren $\hat{A}$ und $\hat{B}$ einfach mit $\hat{A}\hat{B}$ bezeichnet.

I.1.3 d Unitärer Operator

Definition: Ein linearer Endomorphismus $\hat{U}$ auf einem Prähilbertraum $\mathscr{V}$ heißt *unitär*, wenn er die Bedingung
$$\hat{U}^\dagger \hat{U} = \hat{U}\hat{U}^\dagger = \hat{\mathbb{1}}_{\mathscr{V}} \tag{I.32a}$$
mit dem Identitätsoperator $\hat{\mathbb{1}}_{\mathscr{V}}$ auf $\mathscr{V}$ erfüllt.
Aus diesen definierenden Eigenschaften folgt offensichtlich sofort, dass $\hat{U}$ invertierbar ist, mit
$$\hat{U}^{-1} = \hat{U}^\dagger. \tag{I.32b}$$

Wegen der Identität $\Phi\big(\hat{U}(\vec{a}), \hat{U}(\vec{b})\big) = \Phi\big(\vec{a}, \hat{U}^\dagger\big(\hat{U}(\vec{b})\big)\big)$ [vgl. Gl. (I.29)] lässt ein unitärer Operator das Skalarprodukt invariant. Insbesondere bildet $\hat{U}$ einen Vektor $\vec{a} \in \mathscr{V}$ auf einen anderen Vektor $\hat{U}(\vec{a})$ von $\mathscr{V}$ mit derselben Norm ab:
$$\big|\big|\hat{U}(\vec{a})\big|\big| = ||\vec{a}||, \tag{I.33}$$
wie aus der Definition (I.21) folgt. Umgekehrt ist jeder lineare Operator auf $\mathscr{V}$, welcher die Norm invariant lässt, unitär.

Die unitären Operatoren auf einem komplexen Prähilbertraum $\mathscr{V}$ bilden eine Gruppe, die *unitäre Gruppe*.

Neben den unitären Operatoren, die linear sind, gibt es auch *antiunitäre Operatoren*. Somit heißt ein Endomorphismus $\hat{U}$ antiunitär, wenn er antilinear ist and wenn für alle Vektoren $\vec{a}, \vec{b}$
$$\Phi\big(\hat{U}(\vec{a}), \hat{U}(\vec{b})\big) = \Phi\big(\vec{a}, \vec{b}\big)^* \tag{I.34}$$
gilt. Daher lässt ein antiunitärer Operator die Norm invariant — wie ein unitärer Operator —, das Skalarprodukt aber nicht.

Wenn der Vektorraum endlichdimensional ist, sei $N = \dim \mathscr{V}$, lässt sich ein unitärer Operator $\hat{U}$ durch eine quadratische Matrix U darstellen, welche den Bedingungen
$$U^\dagger U = UU^\dagger = \mathbb{1}_N \quad \text{bzw.} \quad U^{-1} = U^\dagger \tag{I.35}$$
mit der N-dimensionalen Einheitsmatrix $\mathbb{1}_N$ genügt, d.h. durch eine *unitäre Matrix*. Die Menge solcher Matrizen versehen mit der üblichen Matrizenmultiplikation ist eine Gruppe, die N-dimensionale unitäre Gruppe $U(N)$.

Insbesondere ist die Matrix der Transformation von einer Orthonormalbasis von $\mathscr{V}$ zu einer anderen eine unitäre Matrix.

Aus $\det U^\dagger = (\det U)^*$ folgt, dass die Determinante einer unitären Matrix eine komplexe Zahl mit Betrag 1 ist. Die unitären $N \times N$-Matrizen mit Determinante 1 bilden eine Untergruppe von $U(N)$, die *spezielle unitäre Gruppe* $SU(N)$.

I.1.3 e Orthogonaler Projektor

Definition: Sei $\mathscr{V}_1$ ein Unterraum eines Vektorraums $\mathscr{V}$. Das *orthogonale Komplement* $\mathscr{V}_1^\perp$ von $\mathscr{V}_1$ in $\mathscr{V}$ ist der Untervektorraum der Vektoren $\vec{a} \in \mathscr{V}$, die orthogonal zu allen Vektoren $\vec{b} \in \mathscr{V}_1$ sind.

Bemerkung: Wenn $\mathscr{V}$ endlichdimensional ist, ist das orthogonale Komplement $\mathscr{V}_1^\perp$ komplementär zu $\mathscr{V}_1$ im Sinne des § I.1.1 c. Dies kann im Fall eines unendlichdimensionalen Vektorraums nicht der Fall sein.

Definition: Ein Projektor auf einem Unterraum $\mathscr{V}_1 \subset \mathscr{V}$ entlang des orthogonalen Komplements $\mathscr{V}_1^\perp$ wird *orthogonaler Projektor* genannt.

I.2 Bra-Ket-Notation

In der Quantenmechanik wird mit komplexen Vektorräumen gearbeitet, auf denen ein hermitesches Skalarprodukt und damit eine Norm definiert wird, für welche jede Cauchy-Folge konvergent ist. Ein solcher Vektorraum heißt *Hilbert-Raum* und wird ab jetzt mit $\mathscr{H}$ (anstatt $\mathscr{V}$) bezeichnet.

In diesem Abschnitt wird eine günstige Notation für die Arbeit mit den Elementen des Hilbert-Raums $\mathscr{H}$ dargelegt, die durch Dirac[(i)] eingeführt wurde [1]. Diese Schreibweise kann sowohl für endlich- als für unendlichdimensionale Hilbert-Räume benutzt werden; hiernach wird nur der erstere Fall behandelt.

I.2.1 Vektoren und Skalarprodukt

Die Vektoren von $\mathscr{H}$ werden ab sofort $|a\rangle$ geschrieben — anstelle der in Abschn. I.1 benutzten Notation $\vec{a}$ —, wobei Dirac die Bezeichnung *Ket* für das Symbol $|\ \rangle$ vorgeschlagen hat:

$$\boxed{\text{Ket: } |a\rangle \in \mathscr{H}.} \tag{I.36}$$

Wiederum werden die Linearforme auf $\mathscr{H}$, d.h. die Vektoren von dessen Dualraum $\mathscr{H}^*$, als $\langle a|$, ausgesprochen *Bra*, geschrieben:

$$\boxed{\text{Bra: } \langle a| \in \mathscr{H}^*.} \tag{I.37}$$

Die Motivation hinter den beiden Notationen wird klarer, wenn man das hermitesche Skalarprodukt von $|a\rangle$ und $|b\rangle$ betrachtet: anstatt $\Phi(\vec{a},\vec{b})$ wird die Schreibweise

$$\boxed{\text{Skalarprodukt: } \langle a|b\rangle \in \mathbb{C}} \tag{I.38}$$

benutzt, entsprechend dem Produkt aus einem Bra und einem Ket. Mit dieser Notation lautet die hermitesche Symmetrie (I.19b) des Skalarprodukts

$$\boxed{\langle a|b\rangle = \langle b|a\rangle^* \quad \forall |a\rangle, |b\rangle \in \mathscr{H}} \tag{I.39}$$

und die Cauchy–Schwarz-Ungleichung (I.20)

$$|\langle a|b\rangle| \leq \sqrt{\langle a|a\rangle\langle b|b\rangle}. \tag{I.40}$$

Angesichts der Schreibweise für das Skalarprodukt ist es naheliegend, dass es eine Korrespondenz $\mathscr{H} \to \mathscr{H}^*$ gibt, die einem Ket $|a\rangle$ einen Bra $\langle a|$ zuordnet. Sei dann $\lambda \in \mathbb{C}$. Damit die Korrespondenz vereinbar mit dem Skalarprodukt ist, insbesondere mit der Antilinearität im ersten Argument, soll der Ket $|\lambda a\rangle \equiv \lambda|a\rangle$ auf den Bra

$$\boxed{\langle\lambda a| = \lambda^*\langle a|} \tag{I.41}$$

abgebildet sein.

Für jeden $|b\rangle \in \mathscr{H}$ muss nämlich

$$\langle\lambda a|b\rangle = \langle b|\lambda a\rangle^* = (\lambda\langle b|a\rangle)^* = \lambda^*\langle b|a\rangle^* = \lambda^*\langle a|b\rangle$$

gelten, wobei die hermitesche Symmetrie (I.39) und die Linearität des Skalarprodukts im zweiten Argument benutzt wurden.

[(i)] P. A. M. Dirac, 1902–1984

Eine allgemeine Orthonormalbasis auf $\mathscr{H}$ wird mit $\{|n\rangle\}$ bezeichnet. Dabei ist implizit n eine ganze Zahl: in endlicher Dimension besteht die Basis aus nur $N = \dim \mathscr{H}$ Basisvektoren $|1\rangle, \ldots, |N\rangle$. Die Orthonormalitätsbedingung (I.25) der Basisvektoren lässt sich als

$$\langle n|m\rangle = \delta_{nm} \tag{I.42}$$

schreiben.

Dann lautet die Zerlegung eines Kets auf der Orthonormalbasis

$$\boxed{|a\rangle = \sum_{n=1}^{N} a_n|n\rangle \quad \text{mit} \quad a_n = \langle n|a\rangle,} \tag{I.43}$$

ähnlich der Gl. (I.27) in der „alten“ Notation.

Bemerkung: In diesem Skript wird der Null-Vektor des Hilbert-Raums mit $|\varnothing\rangle$ bezeichnet.[6]

I.2.2 Operatoren

Die Operatoren auf dem Hilbert-Raum $\mathscr{H}$ werden weiter mit $\hat{A}$ bezeichnet. Wenn nichts anderes präzisiert wird, werden im Allgemeinen meistens lineare Endomorphismen von $\mathscr{H}$ betrachtet.

Das Bild eines Vektors $|a\rangle$ unter einem Operator $\hat{A}$ wird als

$$\boxed{|\hat{A}a\rangle \equiv \hat{A}(|a\rangle)} \tag{I.44}$$

geschrieben.

Damit lautet die Definition (I.29) des adjungierten Operators $\hat{A}^\dagger$ zu einem Operator $\hat{A}$

$$\langle a|\hat{A}^\dagger b\rangle = \langle \hat{A}a|b\rangle = \langle b|\hat{A}a\rangle^* \quad \forall |a\rangle, |b\rangle \in \mathscr{H}. \tag{I.45}$$

Sei $|m\rangle$ ein Basisvektor einer Orthonormalbasis von $\mathscr{H}$. Sein Bild $|\hat{A}m\rangle$ unter einem linearen Operator $\hat{A}$ ist ebenfalls ein Vektor von $\mathscr{H}$, der sich deshalb wie in Gl. (I.43) als Linearkombination von Basisvektoren schreiben lässt:

$$|\hat{A}m\rangle = \sum_n A_{nm}|n\rangle, \tag{I.46a}$$

wobei

$$A_{nm} \equiv \langle n|\hat{A}m\rangle \tag{I.46b}$$

die Komponente von $|\hat{A}m\rangle$ auf $|n\rangle$ ist, entsprechend im Fall eines endlichdimensionalen Raums einem Matrixelement der Matrix A, die den Operator darstellt.

Sei nun $|a\rangle = \sum a_m|m\rangle$ ein beliebiger Vektor von $\mathscr{H}$. Aus der Linearität von $\hat{A}$ folgt

$$|\hat{A}a\rangle = \sum_m a_m|\hat{A}m\rangle,$$

d.h. unter Nutzung von Gl. (I.46b)

$$|\hat{A}a\rangle = \sum_{m,n} A_{nm}a_m|n\rangle. \tag{I.47}$$

Dabei erkennt man, wenn $\mathscr{H}$ endlichdimensional bzw. die Basis $\{|n\rangle\}$ endlich ist, das Matrixprodukt aus der Matrixdarstellung von $\hat{A}$ und dem Spaltenvektor mit Komponenten a_m.

[6] Die übliche Notation für diesen Null-Vektor ist eher einfach 0, ohne Ket-Bezeichnung, was am Anfang irreführend sein könnte.

Kommen wir zurück zur Gleichung (I.46b). Anstatt $\langle n|\hat{A}m\rangle$ schreibt man das „Matrixelement“ öfter als

$$A_{nm} = \langle n|\hat{A}m\rangle \equiv \langle n|\hat{A}|m\rangle, \tag{I.48}$$

und allgemeiner für beliebige Vektoren $|a\rangle, |b\rangle \in \mathscr{H}$

$$\boxed{\langle b|\hat{A}|a\rangle \equiv \langle b|\hat{A}a\rangle.} \tag{I.49}$$

Dementsprechend wir für $\hat{A}(|a\rangle)$ neben $|\hat{A}a\rangle$ auch die Notation

$$\boxed{\hat{A}|a\rangle \equiv |\hat{A}a\rangle} \tag{I.50}$$

benutzt. Die „symmetrische“ Schreibweise $\langle b|\hat{A}|a\rangle$ soll an das Produkt aus einem Zeilenvektor, einer quadratischen Matrix und einem Spaltenvektor erinnern, die im endlichdimensionalen Fall jeweils den Bra, den Operator und den Ket darstellen.

In endlicher Dimension prüft man einfach nach, dass der mit $|\hat{A}a\rangle = \hat{A}|a\rangle$ assoziierte Bra durch

$$\boxed{\langle\hat{A}a| = \langle a|\hat{A}^\dagger} \tag{I.51}$$

gegeben ist.(7)

Bemerkung: Für den Operator $\hat{A} = \lambda\hat{\mathbb{1}}_{\mathscr{H}}$ mit $\lambda \in \mathbb{C}$ führt Gl. (I.51) unter Berücksichtigung der (trivialen) Identitäten $\hat{\mathbb{1}}_{\mathscr{H}}|a\rangle = |a\rangle$ und $\langle a|\hat{\mathbb{1}}_{\mathscr{H}} = \langle a|$ zur Gleichung $\langle\lambda a| = \lambda^*\langle a|$, d.h. sie ergibt Gl. (I.41) wieder.

Aus Gl. (I.45) folgt $\langle b|\hat{A}a\rangle = \langle a|\hat{A}^\dagger b\rangle^*$, was sich unter Nutzung der Notation (I.49) als

$$\boxed{\langle b|\hat{A}|a\rangle = \langle a|\hat{A}^\dagger|b\rangle^*} \tag{I.52}$$

für alle Vektoren $|a\rangle$, $|b\rangle \in \mathscr{H}$ und Operatoren $\hat{A}$ ausdrücken lässt.

I.2.3 Produkt aus einem Ket und einem Bra

Seien $|a\rangle$ und $|b\rangle$ zwei Ket-Vektoren eines Hilbert-Raums $\mathscr{H}$ und $\langle b| \in \mathscr{H}^*$ der mit $|b\rangle$ assoziierte Bra.

Definition: Die Notation $|a\rangle\langle b|$ definiert einen Operator auf $\mathscr{H}$, der auf einen beliebigen Vektor $|c\rangle$ gemäß

$$|a\rangle\langle b|\big(|c\rangle\big) \equiv |a\rangle(\langle b|c\rangle) = (\langle b|c\rangle)|a\rangle \tag{I.53}$$

wirkt, wobei im zweiten bzw. dritten Glied die komplexe Zahl $\langle b|c\rangle$ rechts bzw. links vom Vektor $|a\rangle$ geschrieben wird.

Wenn man die Darstellungen von $|a\rangle$ bzw. $\langle b|$ als ein Spalten- bzw. Zeilenvektor betrachtet, so ergibt deren Matrixprodukt eine quadratische Matrix, die natürlich die Matrixdarstellung des Operators $|a\rangle\langle b|$ ist.

Mathematisch ist $|a\rangle\langle b|$ ein tensorielles Produkt.

(7) Somit sind im Allgemeinen $\langle\hat{A}a|b\rangle$ und $\langle a|\hat{A}b\rangle$ unterschiedlich — die Gleichheit für alle $|a\rangle, |b\rangle \in \mathscr{H}$ gilt genau dann, wenn $\hat{A}$ selbstadjungiert ist, $\hat{A} = \hat{A}^\dagger$.

Aus der Definition (I.53) folgt, dass der Kern des Operators $|a\rangle\langle b|$ aus dem zu $|b\rangle$ orthogonalen Unterraum von $\mathscr{H}$ besteht; Wiederum ist das Bild des Operators der durch $|a\rangle$ aufgespannte eindimensionale Unterraum, d.h. $|a\rangle\langle b|$ ist von Rang 1, wenn $|a\rangle$ nicht der Null-Vektor ist. Schließlich gilt unter hermiteschen Konjugation

$$\big(|a\rangle\langle b|\big)^\dagger = |b\rangle\langle a|. \tag{I.54}$$

Die Definition (I.53) des Operators $|a\rangle\langle b|$ ist auch der Ausgangspunkt einer nützlichen Rechenregel. Lässt man die Klammer weg von den zwei ersten, so sieht man, dass sich die Kombination $|a\rangle\langle b\,|c\rangle$ auf zwei Weisen interpretieren lässt, und zwar entweder als Wirkung eines Operators auf einen Ket, oder als Produkt aus einem Ket mit einer Zahl — wobei die Zahl problemlos links vom Ket geschrieben werden könnte:

$$|a\rangle\langle b\,|c\rangle = \begin{cases} |a\rangle\langle b|\big(|c\rangle\big) \\ |a\rangle\big(\langle b\,|c\rangle\big). \end{cases} \tag{I.55}$$

Diese Zweideutigkeit wird in der Bra-Ket-Notation ständig zu Nutze gemacht, denn beide Interpretationen bezeichnen konstruktionsgemäß das gleiche mathematische Objekt.

Ein zweites Beispiel der „verallgemeinerten Assoziativität“ der Bra-Ket-Notation betrifft den Ausdruck

$$\langle a_2\,|a_1\rangle\langle b_1\,|b_2\rangle.$$

Er könnte entweder als das Matrixelement des Rang-Eins-Operators $|a_1\rangle\langle b_1|$ zwischen den Vektoren $\langle a_2|$ und $|b_2\rangle$ angesehen werden, oder als das Produkt der Skalarprodukte $\langle a_2\,|a_1\rangle$ und $\langle b_1\,|b_2\rangle$. In beiden Fällen soll $\langle a_2\,|a_1\rangle\langle b_1\,|b_2\rangle$ eine komplexe Zahl sein, und die Definition (I.53) stellt sicher, dass beide Interpretationen die gleiche Zahl liefern

Projektoren

Ein wichtiger Sonderfall von Operatoren des Typs (I.53) ergibt sich, wenn $|b\rangle = |a\rangle$ und $|a\rangle$ auf 1 normiert ist. Dann ist

$$\hat{\mathcal{P}}_a \equiv |a\rangle\langle a| \tag{I.56}$$

der orthogonale Projektor auf die Richtung von $|a\rangle$, wie aus der oben angegebenen Wirkung des Operators auf Vektoren erkennbar ist.

Dabei lässt sich die charakteristische Eigenschaft $\hat{\mathcal{P}}_a^2 = \hat{\mathcal{P}}_a$ von Projektoren als

$$(|a\rangle\langle a|)^2 = |a\rangle\langle a\,|a\rangle\langle a| = |a\rangle\langle a|$$

schreiben, wobei die Normierungsbedingung $\langle a\,|a\rangle = 1$ benutzt wurde: dies stellt ein weiteres Beispiel für die Assoziativität der Bra-Ket-Notation dar.

Bemerkungen:

∗ Falls $|a\rangle$ nicht normiert ist, lautet der orthogonale Projektor auf die Richtung von $|a\rangle$ einfach

$$\hat{\mathcal{P}}_a \equiv \frac{|a\rangle\langle a|}{\langle a\,|a\rangle}. \tag{I.57}$$

∗ Seien zwei normierte Vektoren $|a\rangle$ und $|a'\rangle$, die sich nur um einen Phasenfaktor unterscheiden: $|a'\rangle = \mathrm{e}^{\mathrm{i}\delta}|a\rangle$ mit $\delta \in \mathbb{R}$. Wegen $\langle a'| = \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\delta}\langle a|$ [Gl. (I.41)] sind die assoziierten Projektoren gleich: $|a\rangle\langle a| = |a'\rangle\langle a'|$.

Allgemeiner ist der orthogonale Projektor auf den N'-dimensionalen Unterraum, der durch N' paarweise orthogonale normierte Vektoren $|a_1\rangle, \ldots, |a_{N'}\rangle$ aufgespannt wird, durch

$$\hat{\mathcal{P}} \equiv \sum_{n=1}^{N'} |a_n\rangle\langle a_n| \tag{I.58}$$

gegeben. Wenn N' gleich der Dimension N des Hilbert-Raums $\mathscr{H}$ ist, so dass die Vektoren $\{|a_n\rangle\}$

eine Orthonormalbasis von $\mathscr{H}$ bilden, ergibt sich die *Vollständigkeitsrelation*

$$\boxed{\hat{\mathbb{1}}_{\mathscr{H}} = \sum_{n=1}^{N} |a_n\rangle\langle a_n|,} \tag{I.59}$$

weil der Projektor auf den ganzen Raum $\mathscr{H}$ der Identitätsoperator $\hat{\mathbb{1}}_{\mathscr{H}}$ des Raums ist.

I.2.4 Spektraldarstellung eines hermiteschen Operators

Sei $\hat{A}$ ein linearer Operator auf einem Hilbert-Raum $\mathscr{H}$. Die Beziehung [vgl. (I.8)], die ausdrückt, dass ein Vektor $|a_n\rangle \in \mathscr{H}$ mit $|a_n\rangle \neq |\varnothing\rangle$ Eigenvektor zu $\hat{A}$ mit dem Eigenwert $a_n \in \mathbb{C}$ ist, lautet in der Bra-Ket-Notation

$$\hat{A}|a_n\rangle = a_n|a_n\rangle. \tag{I.60a}$$

Unter hermiteschen Konjugation transformiert sich diese Beziehung in eine Eigenwertgleichung im Dualraum $\mathscr{H}^*$:

$$\langle a_n|\hat{A}^\dagger = a_n^*\langle a_n| \tag{I.60b}$$

mit dem adjungierten Operator $\hat{A}^\dagger$.

Betrachte man nur einen hermiteschen Operator, d.h. $\hat{A}^\dagger = \hat{A}$. In diesem Fall gelten die zwei folgenden wichtigen Resultate:

Die Eigenwerte eines hermiteschen Operators sind reell. (I.61a)

und

Die Eigenvektoren eines hermiteschen Operators zu verschiedenen Eigenwerten sind orthogonal zueinander. (I.61b)

Diese Ergebnisse folgen problemlos aus den Gleichungen (I.60). Seien nämlich a_m, a_n zwei Eigenwerte und $|a_m\rangle$, $|a_n\rangle$ zugehörige Eigenvektoren. Multipliziert man Gl. (I.60a) links mit $\langle a_m|$ und , so kommt

$$\langle a_m|\hat{A}|a_n\rangle = a_n\langle a_m|a_n\rangle. \tag{I.62a}$$

Wiederum gibt das Skalarprodukt aus Gl. (I.60b), ausgedrückt für a_m^* und $\langle a_m|$, und $|a_n\rangle$

$$\langle a_m|\hat{A}^\dagger|a_n\rangle = a_m^*\langle a_m|a_n\rangle. \tag{I.62b}$$

Zusammen führen diese beiden Beziehungen zu

$$\langle a_m|\hat{A} - \hat{A}^\dagger|a_n\rangle = (a_n - a_m^*)\langle a_m|a_n\rangle. \tag{I.63}$$

Sei nun angenommen, dass $\hat{A}$ hermitesch ist: dann ist der Term auf der linken Seite Null. Betrachte man zuerst den Fall $|a_m\rangle = |a_n\rangle$ — und dementsprechend $a_m = a_n$. Dann ist $\langle a_n|a_n\rangle$ auf der rechten Seite von Gl. (I.63) ungleich Null, so dass die Differenz $a_n - a_n^*$ verschwinden muss, was genau die Reellwertigkeit von a_n, d.h. die Eigenschaft (I.61a), ausdrückt. Wiederum soll im Fall $a_m \neq a_n$ das Skalarprodukt $\langle a_m|a_n\rangle$ Null sein, was der Eigenschaft (I.61b) entspricht.

Bemerkungen:

$*$ Die Resultate (I.61) nehmen implizit an, dass der erwähnte hermitesche Operator überhaupt Eigenwerte hat. Im Fall eines endlichdimensionalen Hilbert-Raums $\mathscr{H}$ kann man beweisen, dass jeder hermitesche Operator $\hat{A}$ Eigenwerte hat.[8] Aus der Eigenschaft (I.61b) folgt dann die Diagonalisierbarkeit des Operators anhand einer unitären Matrix.

[8] Die Idee ist, dass das charakteristische Polynom (I.9) ein Polynom(!) mit komplexen Koeffizienten ist, das laut dem Fundamentalsatz der Algebra mindestens eine Wurzel in $\mathbb{C}$ — in der Tat, in $\mathbb{R}$ — haben muss.

$*$ Addiert man die Gl. (I.62a) und (I.62b), so ergibt sich $\langle a_m|\hat{A}+\hat{A}^\dagger|a_n\rangle = (a_n + a_m^*)\langle a_m|a_n\rangle$, wobei das Matrixelement auf der linken Seite nun für einen antihermiteschen Operator Null ist. Dann findet man mit $|a_m\rangle = |a_n\rangle$, dass $a_n + a_n^*$ verschwinden soll, d.h. dass a_n rein imaginär ist:

Die Eigenwerte eines antihermiteschen Operators sind rein imaginär. (I.64)

Wiederum gibt $a_m \neq a_n$ erneut die Orthogonalität der Eigenvektoren zu verschiedenen Eigenwerten, wie bei hermiteschen Operatoren.

Sei $\hat{A}$ ein hermitescher Operator auf einem endlichdimensionalen Hilbert-Raum. Die endlich vielen Eigenwerte von $\hat{A}$ seien mit $\{a_n\}$ bezeichnet, wobei $a_m \neq a_n$ für $m \neq n$. Einige dieser Eigenwerte könnten entartet sein: die Dimension $g(n) \geq 1$ des Eigenraums $\mathscr{H}_{a_n}$ zum Eigenwert a_n heißt *Entartungsgrad* des Eigenwerts, wobei $g(n)$ eigentlich bedeutet, dass der Eigenwert nicht entartet ist. Sei $\{|a_n, r\rangle\}$ mit $r = 1, \ldots, g(n)$ eine Orthonormalbasis von $\mathscr{H}_{a_n}$.

Auf dem Eigenraum $\mathscr{H}_{a_n}$ ist die Einschränkung $\hat{A}|_{\mathscr{H}_{a_n}}$ des Operators $\hat{A}$ proportional zur Einschränkung des Identitätsoperators: $\hat{A}|_{\mathscr{H}_{a_n}} = a_n\hat{\mathbb{1}}|_{\mathscr{H}_{a_n}}$. Wiederum lässt sich diese Einschränkung der Identität anhand der Vollständigkeitsrelation (I.59) im Eigenraum als

$$\hat{\mathbb{1}}|_{\mathscr{H}_{a_n}} = \sum_{r=1}^{g(n)} |a_n, r\rangle\langle a_n, r|$$

schreiben. Daraus folgert man, dass der hermitesche Operator $\hat{A}$ durch seine Eigenwerte und eine Orthonormalbasis seiner Eigenvektoren als die *Spektraldarstellung*

$$\boxed{\hat{A} = \sum_n \sum_{r=1}^{g(n)} a_n |a_n, r\rangle\langle a_n, r|} \tag{I.65}$$

ausgedrückt werden kann.

Ausgehend von dieser Spektraldarstellung findet man, dass für einen hermiteschen Operator $\hat{A}$

$$\langle a|\hat{A}|a\rangle \in \mathbb{R} \quad \text{für jeden } |a\rangle \in \mathscr{H}. \tag{I.66}$$

Die Spektraldarstellung und die Linearität des Skalarprodukts geben nämlich

$$\langle a|\hat{A}|a\rangle = \langle a|\sum_n \sum_{r=1}^{g(n)} a_n|a_n,r\rangle\langle a_n,r|a\rangle = \sum_n \sum_{r=1}^{g(n)} a_n\langle a|a_n,r\rangle\langle a_n,r|a\rangle = \sum_n \sum_{r=1}^{g(n)} a_n\big|\langle a_n,r|a\rangle\big|^2,$$

was mit der Reellwertigkeit (I.61a) der Eigenwerte a_n — und natürlich auch der Betragsquadrate $|\langle a_n,r|a\rangle|^2$ — das gesuchte Ergebnis ergibt. □

Bemerkung: Mit einem ähnlichen Beweis zeigt man, dass im Fall eines antihermiteschen Operators $\hat{A}$ das diagonale Matrixelement $\langle a|\hat{A}|a\rangle$ für jeden $|a\rangle$ rein imaginär ist.