Ergänzungen zur Quantenphysik

Mini-Einführung in Konzepte der Linearen Algebra

– ein Auszug aus dem Anhang A des Quantenmechanik-Buchs von Griffiths

Die lineare Algebra abstrahiert und verallgemeinert das Rechnen mit Vektoren wie solchen, denen wir in der Vektorgeometrie begegnet sind. Die Verallgemeinerung kann zwei Punkte umfassen:

i. Wir lassen zu, dass die Skalare *komplexe Zahlen* sind, und
ii. wir beschränken uns nicht mehr auf nur drei Dimensionen.

1 Vektorräume

Ein **Vektorraum** (oder kurz *Raum*) besteht aus einer Menge von **Vektoren** ($|\alpha\rangle$, $|\beta\rangle$, $|\gamma\rangle$, etc.) sowie einem Satz von **Skalaren** (a, b, c, etc.).[1] Kennzeichen eines Vektorraums ist, dass er unter zwei Operationen **abgeschlossen** ist: der *Vektoraddition* und der *skalaren Multiplikation*, die oft auch einfach als *Skalarmultiplikation* bezeichnet wird. Die Abgeschlossenheit bedeutet, dass diese Operationen immer wohldefiniert sind und nie aus dem Vektorraum herausführen – mit anderen Worten: Man kann zwei Vektoren immer addieren und einen Vektor immer mit einem Skalar multiplizieren, und das Ergebnis ist wieder ein Vektor des Vektorraums.

Vektoraddition: Die “Summe” zweier beliebiger Vektoren ist wieder ein Vektor:

$$|\alpha\rangle + |\beta\rangle = |\gamma\rangle \quad . \tag{1}$$

Die Vektoraddition ist **kommutativ**:

$$|\alpha\rangle + |\beta\rangle = |\beta\rangle + |\alpha\rangle \tag{2}$$

und **assoziativ**:

$$|\alpha\rangle + \big(|\beta\rangle + |\gamma\rangle\big) = \big(|\alpha\rangle + |\beta\rangle\big) + |\gamma\rangle \quad . \tag{3}$$

Es gibt einen **Nullvektor** $|0\rangle$ mit der Eigenschaft, dass für jeden Vektor $|\alpha\rangle$ gilt:[2]

$$|\alpha\rangle + |0\rangle = |\alpha\rangle \quad . \tag{4}$$

Und für jeden Vektor $|\alpha\rangle$ gibt es im Vektorraum einen zugehörigen **inversen Vektor** $|-\alpha\rangle$, für den gilt:[3]

$$|\alpha\rangle + |-\alpha\rangle = |0\rangle \quad . \tag{5}$$

Skalare Multiplikation: Das “Produkt” eines beliebigen Skalars mit einem beliebigen Vektor ist wieder ein Vektor:

$$a|\alpha\rangle = |\gamma\rangle \tag{6}$$

Die skalare Multiplikation ist **distributiv** bezüglich der Vektoraddition:

$$a\big(|\alpha\rangle + |\beta\rangle\big) = a|\alpha\rangle + a|\beta\rangle \tag{7}$$

[1]In unserem Zusammenhang werden die Skalare gewöhnliche komplexe Zahlen sein. Mathematiker können Ihnen auch etwas über Vektorräume mit noch exotischeren Bewohnern erzählen, doch solche Objekte spielen in der Quantenmechanik keine Rolle. Beachten Sie, dass α, β, γ, etc. (normalerweise) *keine* gewöhnlichen Zahlen sind; es handelt sich vielmehr um Namen (Bezeichnungen) wie “Charlie” oder “F43A-9GL” oder was Ihnen sonst noch einfallen könnte, um den fraglichen Vektor zu benennen.

[2]Es ist üblich, diesen Nullvektor ohne Klammer zu schreiben, wenn keine Missverständnisse möglich sind: $|0\rangle \to 0$.

[3]Das ist eine etwas merkwürdige Schreibweise, da α keine Zahl ist. Doch ich verwende hier einfach den Namen “–Charlie” für den inversen Vektor zum Vektor namens “Charlie”. Eine natürlichere Terminologie wird sich gleich ergeben.

und bezüglich der skalaren Addition:

$$(a+b)\big(|\alpha\rangle + |\beta\rangle\big) = a|\alpha\rangle + a|\beta\rangle \quad . \tag{8}$$

Außerdem ist sie **assoziativ** bezüglich der gewöhnlichen Multiplikation von Skalaren:

$$a\big(b|\alpha\rangle\big) = (ab)|\alpha\rangle \quad . \tag{9}$$

Die Multiplikation mit den Skalaren 0 und 1 hat den jeweils erwarteten Effekt:

$$0|\alpha\rangle = |0\rangle \qquad \text{und} \qquad 1|\alpha\rangle = |\alpha\rangle \quad . \tag{10}$$

Offenbar gilt $|\alpha\rangle = (-1)|\alpha\rangle$ (was wir einfacher als $-|\alpha\rangle$ schreiben).

Alle diese Aussagen sind weit weniger neu, als sie vielleicht aussehen – ich habe nur die vertrauten Regeln für den Umgang mit Vektoren in abstrakter Sprache zusammengefasst. Der Vorzug einer solchen Abstraktion liegt darin, dass wir damit unsere Kenntnisse und Intuition über das Verhalten gewöhnlicher Vektoren auch auf andere Systeme mit denselben formalen Eigenschaften anwenden können:

- Eine **Linearkombination** der Vektoren $|\alpha\rangle$, $|\beta\rangle$, $|\gamma\rangle$, etc. ist ein Ausdruck der Form

  $$a|\alpha\rangle + b|\beta\rangle + c|\gamma\rangle + \ldots \tag{11}$$

  Ein Vektor $|\lambda\rangle$ heißt **linear unabhängig** von der Menge $|\alpha\rangle$, $|\beta\rangle$, $|\gamma\rangle$, etc., wenn er sich nicht als Linearkombination aus ihnen schreiben lässt.

  Beispielsweise ist in drei Dimensionen der Einheitsvektor $\vec{e}_z$ linear unabhängig von $\vec{e}_x$ und $\vec{e}_y$, aber jeder Vektor in der x-y-Ebene ist linear abhängig von $\vec{e}_x$ und $\vec{e}_y$.

  In Erweiterung dieser Definition heißt eine *Menge* von Vektoren "linear unabhängig", wenn jeder einzelne von ihnen von den anderen linear unabhängig ist.

- Man sagt, eine Menge von Vektoren würde den Vektorraum **aufspannen**, wenn sich *jeder* Vektor dieses Vektorraums als Linearkombination der Elemente dieser Menge schreiben lässt.[4]

- Eine Menge von *linear unabhängigen* Vektoren, die einen Vektorraum aufspannen, heißt eine **Basis** dieses Vektorraums. Die Anzahl der Vektoren in einer beliebigen Basis wird als *Dimension* des Raums bezeichnet. Fürs erste werden wir annehmen, dass die Dimension n eine *endliche* Zahl ist.

- Bezüglich einer vorgegebenen Basis

  $$|e_1\rangle\,,\ |e_2\rangle\,,\ \ldots\,,|e_n\rangle \tag{12}$$

  lässt sich jeder beliebige Vektor

  $$|\alpha\rangle = a_1|e_1\rangle + a_2|e_2\rangle + \ldots + a_n|e_n\rangle \tag{13}$$

  eindeutig durch das (geordnete) n-Tupel seiner **Komponenten** a_1, a_2, ..., a_n darstellen:

  $$|\alpha\rangle \quad \longrightarrow \quad (a_1, a_2, \ldots, a_n) \qquad \text{resp.} \qquad |\alpha\rangle \quad \longrightarrow \quad \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ \vdots \\ a_n \end{pmatrix} \quad . \tag{14}$$

[4] Man bezeichnet eine Menge von Vektoren, die einen Vektorraum aufspannen, auch als **vollständig**; ich persönlich verwende dieses Wort allerdings nur für unendlich-dimensionale Vektorräume, bei denen ziemlich raffinierte Konvergenzprobleme auftreten können.

Oft ist es einfacher, mit den Komponenten anstelle mit den abstrakten Vektoren selbst zu arbeiten. Um Vektoren zu addieren, addiert man einfach die entsprechenden Komponenten:

$$|\alpha\rangle + |\beta\rangle \quad \longleftrightarrow \quad \begin{pmatrix} a_1 + b_1 \\ a_2 + b_2 \\ \vdots \\ a_n + b_n \end{pmatrix} \quad . \tag{15}$$

Zur Multiplikation mit einem Skalar multipliziert man jede einzelne Komponente:

$$c|\alpha\rangle \quad \longleftrightarrow \quad \begin{pmatrix} ca_1 \\ ca_2 \\ \vdots \\ ca_n \end{pmatrix} \quad . \tag{16}$$

Der Nullvektor wird durch eine Kette von Nullen dargestellt:

$$|0\rangle \quad \longleftrightarrow \quad \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix} \quad . \tag{17}$$

und bei den Komponenten des inversen Vektors verändert man das jeweilige Vorzeichen:

$$|-\alpha\rangle \quad \longleftrightarrow \quad \begin{pmatrix} -a_1 \\ -a_2 \\ \vdots \\ -a_n \end{pmatrix} \quad . \tag{18}$$

Der einzige echte *Nachteil* beim Arbeiten mit Komponenten liegt darin, *dass man sich immer auf eine bestimmte Basis beziehen muss* und dass dieselbe Vektormanipulation in einer anderen Basis völlig anders aussehen kann.

2 Innere Produkte

In drei Dimensionen begegnen wir zwei Arten von Vektorprodukten: dem Punktprodukt (= Skalarprodukt) und dem Kreuzprodukt (= Vektorprodukt). Das letztere lässt sich nicht in natürlicher Weise auf n-dimensionale Vektorräume erweitern, das erste aber sehr wohl; in diesem Zusammenhang wird es als **inneres Produkt** bezeichnet. Das innere Produkt von zwei Vektoren $|\alpha\rangle$ und $|\beta\rangle$ ist eine komplexe Zahl, die wir als $\langle\alpha|\beta\rangle$ schreiben und die die folgenden Eigenschaften aufweist:

$$\langle\beta|\alpha\rangle = \langle\alpha|\beta\rangle^* \tag{19}$$

$$\langle\alpha|\alpha\rangle \geq 0 \qquad \text{und} \qquad \langle\alpha|\alpha\rangle = 0 \quad \Leftrightarrow \quad \alpha = |0\rangle \tag{20}$$

$$\langle\alpha|\big(b|\beta\rangle + c|\gamma\rangle\big) = b\langle\alpha|\beta\rangle + c\langle\alpha|\gamma\rangle \tag{21}$$

Abgesehen von der Verallgemeinerung auf komplexe Zahlen beschreiben diese Axiome einfach nur die vertrauten Eigenschaften des Punkt- resp. Skalarprodukts. Wenn für einen Vektorraum ein inneres Produkt definiert ist, spricht man von einem **Vektorraum mit einem inneren Produkt**.

Weil das innere Produkt eines beliebigen Vektors mit sich selbst eine nichtnegative Zahl ist, ist dessen Wurzel *reell* – wir nennen dies die **Norm** des Vektors:

$$||\alpha|| := \sqrt{\langle\alpha|\alpha\rangle} \quad . \tag{22}$$

Der Begriff der Norm verallgemeinert die "Länge". Ein **Einheitsvektor** (d. h. ein Vektor mit der Norm 1) heißt normiert (eigentlich sollte es "normal" heißen, aber dieser Begriff ist erstens für Vektoren senkrecht zu einer Fläche reserviert und könnte außerdem zu sehr nach einer menschlichen Eigenschaft klingen). Zwei Vektoren, deren inneres Produkt null ist, heißen orthogonal (eine Verallgemeinerung des Begriffs "senkrecht"). Eine Menge von paarweise orthogonalen normierten Vektoren, also mit

$$\langle \alpha_i | \alpha_j \rangle = \delta_{ij} \quad , \tag{23}$$

heißt eine **orthonormale** Menge. Es ist immer möglich und fast immer bequemer, eine **Orthonormalbasis** (= orthonormale Menge als Basis des Vektorraums) festzulegen. In diesem Fall kann man das innere Produkt von zwei Vektoren einfach mithilfe ihrer Komponenten ausdrücken:

$$\langle \alpha | \beta \rangle = a_1^* b_1 + a_2^* b_2 + \ldots + a_n^* b_n \quad . \tag{24}$$

Die (quadrierte) Norm wird dann zu

$$\langle \alpha | \alpha \rangle = |a_1|^2 + |a_2|^2 + \ldots |a_3|^2 \tag{25}$$

und die Komponenten selbst sind (bezüglich der Basis mit den Basisvektoren $|e_i\rangle$)

$$a_i = \langle e_i | \alpha \rangle \quad . \tag{26}$$

(Diese Aussagen verallgemeinern die vertrauten Gleichungen $\vec{a} \cdot \vec{b} = a_x b_x + a_y b_y + a_z b_z$, $|\vec{a}|^2 = a_x^2 + a_y^2 + a_z^2$ und $a_x = \vec{e}_x \cdot \vec{a}$, $a_y = \vec{e}_y \cdot \vec{a}$, $a_z = \vec{e}_z \cdot \vec{a}$ für die dreidimensionale Orthonormalbasis $\vec{e}_x$, $\vec{e}_y$ und $\vec{e}_z$.)

Von nun an werden wir, wenn nicht anders angegeben, immer mit Orthonormalbasen arbeiten.

3 Lineare Transformationen und Matrizen

Stellen Sie sich vor, Sie würden jeden Vektor (im dreidimensionalen Raum) mit 17 multiplizieren oder jeden Vektor um $39°$ um die z-Achse drehen oder jeden Vektor an der x-y-Ebene spiegeln. Alle diese Manipulationen sind Beispiele für **lineare Transformationen**. Eine lineare Transformation[5] $\widehat{T}$ nimmt jeden Vektor und "transformiert" ihn in einen anderen Vektor $|\alpha\rangle \to |\alpha'\rangle = \widehat{T}|\alpha\rangle$, sofern diese Operation *linear* ist, was bedeutet:

$$\widehat{T}\big(a|\alpha\rangle + b|\beta\rangle\big) = a\big(\widehat{T}|\alpha\rangle + \widehat{T}|\beta\rangle\big) \quad . \tag{27}$$

für beliebige Vektoren $|\alpha\rangle$ und $|\beta\rangle$ und beliebige Skalare a und b.

Bemerkung: Wir (A. Gertsch und das EF, nicht etwa D.J. Griffiths) beschränken uns ab hier auf einen zweidimensionalen Vektorraum, sodass der Formalismus etwas übersichtlicher bleibt.

Wenn wir wissen, was eine spezielle lineare Transformation mit einem Satz von *Basisvektoren* anstellt, können wir leicht herausfinden, wie sie auf einen beliebigen Vektor wirkt. Nehmen wir beispielsweise

$$\widehat{T}|e_1\rangle = T_{11}|e_1\rangle + T_{21}|e_2\rangle$$
$$\widehat{T}|e_2\rangle = T_{12}|e_1\rangle + T_{22}|e_2\rangle$$

an. Wenn $|\alpha\rangle$ ein beliebiger Vektor

$$|\alpha\rangle = a_1|e_1\rangle + a_2|e_2\rangle \tag{28}$$

[5] Ich werde alle linearen Transformationen mit einem Dach $\widehat{}$ kennzeichnen. Das steht nicht im Widerspruch zu meiner Konvention im Rest des Buchs, alle Operatoren mit einem Dach zu schreiben, denn – wie wir sehen werden – *sind* quantenmechanische Operatoren lineare Transformationen!

ist, dann gilt:

$$\begin{aligned}\widehat{T}|\alpha\rangle &= \widehat{T}\big(a_1|e_1\rangle + a_2|e_2\rangle\big) = a_1\widehat{T}|e_1\rangle + a_2\widehat{T}|e_2\rangle \\ &= a_1\big(T_{11}|e_1\rangle + T_{21}|e_2\rangle\big) + a_2\big(T_{12}|e_1\rangle + T_{22}|e_2\rangle\big) \\ &= (a_1T_{11} + a_2T_{12})|e_1\rangle + (a_1T_{21} + a_2T_{22})|e_2\rangle\end{aligned}$$

Offenbar überführt $\widehat{T}$ einen Vektor mit den Komponenten a_1, a_2 in einen Vektor mit den Komponenten

$$a_1' = a_1T_{11} + a_2T_{12} \quad \text{und} \quad a_2' = a_1T_{21} + a_2T_{22} \quad . \tag{29}$$

Offenbar ist die lineare Transformation $\widehat{T}$ (bezüglich einer gegeben Basis) durch die 2^2 (resp. allgemein n^2) Elemente T_{ij} genauso eindeutig charakterisiert wie der Vektor $|\alpha\rangle$ (bezüglich derselben Basis) durch die 2 (resp. n) Komponenten a_i:

$$\widehat{T} \quad \longleftrightarrow \quad (T_{11}, T_{12}, T_{21}, T_{22}) \tag{30}$$