3. Elemente der linearen Algebra

3.1. Vektoren/Dirac Schreibweise

Größe durch eine reelle Zahl charakterisiert → Skalar (Masse, Temperatur, Energie, …)

Größen, zu deren Charakterisierung mehr als eine reelle (komplexe) Zahl erforderlich ist, und zwischen denen bestimmte Rechenoperationen vereinbart wurden, heißen Vektoren (Geschwindigkeit, Kraft, Feldstärken, …).

Vektoren im dreidimensionalen Ortsraum ($\mathbb{R}^3$) sind dabei lediglich ein - wenn auch sehr wichtiger - Spezialfall.

Darstellung von Vektoren durch Linearkombination von Basisvektoren $\vec{e}_i$:

$\vec{a} = a_1\vec{e}_1 + a_2\vec{e}_2 + ... + a_n\vec{e}_n$ (in $\mathbb{R}^3$: $\vec{i}$, $\vec{j}$, $\vec{k}$)

$\vec{a} = (a_1, a_2, a_3, ..., a_n)$ Zeilenvektor — äquivalent, je nach Anwendung

$$\vec{a} = \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ a_3 \\ ... \\ a_n \end{pmatrix}$$ Spaltenvektor

Kenntnis der Grundrechenoperationen mit Vektoren wird vorausgesetzt (Schule, Tutorium, Übung).

Lineare Unabhängigkeit von Vektoren

Ein Satz von Vektoren $\vec{u}_i$ mit $i = 1, …, n$ heißt linear unabhängig, wenn die Linearkombination

$$\sum_{i=1}^{n} \lambda_i \vec{u}_i = \vec{0} \text{ nur für } \lambda_1 = \lambda_2 = \lambda_3 = ... = \lambda_n = 0,$$

andernfalls linear abhängig.

Kein Vektor eines linear unabhängigen Satzes lässt sich als Linearkombination der anderen Vektoren ausdrücken.

Ein Vektorraum hat die Dimension n, wenn es maximal n linear unabhängige Vektoren gibt. Jedes System von n linear unabhängigen Vektoren $\vec{u}_i$, $i = 1, …, n$ im n-dimensionalen Vektorraum bildet eine Basis.

→ beliebiger Vektor in diesem Vektorraum ausdrückbar durch $\vec{a} = \sum_{i=1}^{n} a_i \vec{u}_i$

günstig sind Einheitsvektoren $\vec{e}_i = \dfrac{\vec{u}_i}{|\vec{u}_i|}$

die $\vec{u}_i$ und somit $\vec{e}_i$ sind nicht notwendigerweise orthogonal

→ Schmidtsches Orthogonalisierungsverfahren (→ Literatur)

Einschub: Dirac-Schreibweise

Vektor ausdrückbar als Linearkombination von Basisvektoren.

Wellenfunktion ausdrückbar als Linearkombination von Eigenfunktionen.

⇒ Quantenmechanik weiter formalisierbar, indem die Wellenfunktionen als Vektoren in einem abstrakten Vektorraum (gebildet aus den Eigenfunktionen) mit unendlich vielen Dimensionen (HILBERT-Raum) aufgefasst werden (→ Literatur). Integralmanipulationen im Ortsraum lassen sich dann auf algebraische Manipulationen mit Hilbert-Vektoren zurückführen.

Daraus resultiert auch eine vorteilhafte Schreibweise:

$\psi_n \longrightarrow |\psi_n\rangle$ oder auch $|n\rangle$ (ket-Vektor)

$\psi_n^* \longrightarrow \langle\psi_n|$ oder auch $\langle n|$ (bra-Vektor)

$\int \psi_n^* \psi_m \, d\tau \longrightarrow \langle n|m\rangle$ (bra-ket → bracket)

$\int \psi_n^* \hat{A} \psi_m \, d\tau \longrightarrow \langle n|\hat{A}|m\rangle$

$d\tau = dq_1 dq_2 ... dq_n$ ist eine gebräuchliche Abkürzung und umfasst alle (relevanten) Ortskoordinaten und meint Integration über den gesamten Ortsraum.

Im Folgenden eindimensional ($d\tau = dx$ und Integration für $-\infty \leq x \leq \infty$):

Orthonormalitätsbedingung:

$$\left.\int_{-\infty}^{\infty} \psi_n^*(x)\psi_m(x)dx = \begin{cases} 1 & \text{für } n = m \\ 0 & \text{für } n \neq m \end{cases}\right\} \Rightarrow \langle n|m\rangle = \delta_{nm}$$

Eigenwertgleichung:

$$\hat{A}\psi = a\psi \qquad \Rightarrow \hat{A}|\psi\rangle = a|\psi\rangle$$

Hermitezitätsbedingung für Operator $\hat{A}$:

$$\int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(x)\hat{A}\phi(x)dx = \int_{-\infty}^{\infty} \phi(x)\hat{A}^*\psi^*(x)dx \qquad \Rightarrow \langle\psi|\hat{A}|\phi\rangle = \langle\phi|\hat{A}|\psi\rangle^*$$

Erwartungswert:

$$\langle a\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(x)\hat{A}\psi(x)dx \qquad \Rightarrow \langle a\rangle = \langle\psi|\hat{A}|\psi\rangle$$