



universität
wien

DIPLOMARBEIT / DIPLOMA THESIS

Titel der Diplomarbeit / Title of the Diploma Thesis

**„Mathematische Bausteine zum Erlernen des Formalismus
der Quantentheorie“**

Das Starterpaket in die Quantenmechanik

verfasst von / submitted by

Michaela Miedler

angestrebter akademischer Grad / in partial fulfilment of the requirements for the degree of

Magistra der Naturwissenschaften (Mag. rer. nat.)

Wien, 2019 / Vienna, 2019

Studienkennzahl lt. Studienblatt /
degree programme code as it appears on
the student record sheet:

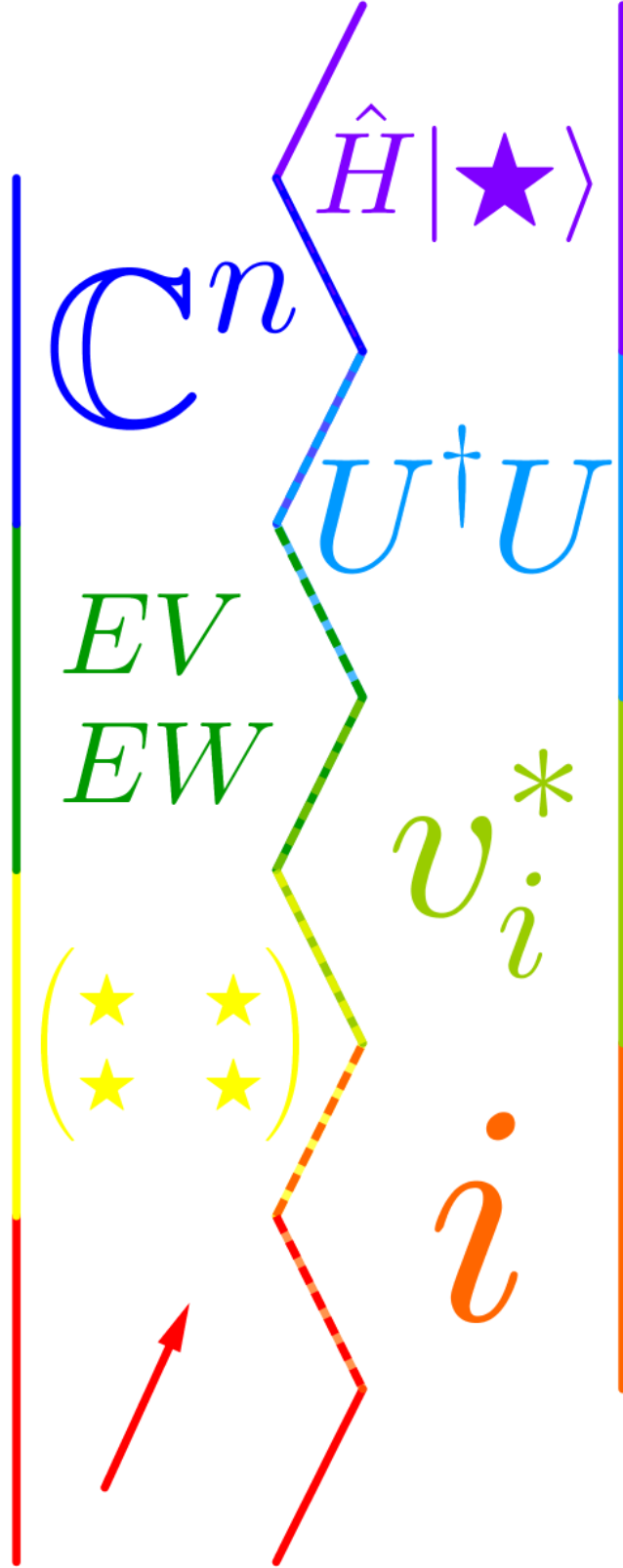
A 190 412 406

Studienrichtung lt. Studienblatt /
degree programme as it appears on
the student record sheet:

Lehramtsstudium UF Physik UF Mathematik

Betreut von / Supervisor:

Priv. Doz. Dr. Beatrix C. Hiesmayr



Zusammenfassung

Im Zuge dieser Diplomarbeit wurde untersucht, welche Probleme bei Studierenden des Lehramtsstudiums Physik an der Universität Wien beim Verständnis der Lehrveranstaltung zur Quantenmechanik aufgetreten sind. Diese Untersuchung hat ergeben, dass 60% der Studierenden fehlende mathematische Grundlagen angegeben haben. Um in Zukunft hier eine Hilfestellung zu gewährleisten, wurden „Bausteine zum Erlernen des Formalismus der Quantentheorie“ erstellt. Diese wurden bewusst so konzipiert, dass sie an das Schulwissen anknüpfen und stark motivieren, weshalb neue Abstraktionsstufen erforderlich sind, um Quantenobjekte und ihre Dynamik beschreiben zu können. Diese Bausteine sind sowohl textbasiert als auch interaktiv gestaltet und sollen das Selbststudium der Themen **Vektoren**, **Komplexe Zahlen**, **Matrizen**, **Komplexe Vektoren und Indexnotation**, **Eigenwerte und Eigenvektoren**, **Basiswechsel und Diagonalisierung**, **Hilberträume und Skalarprodukte** und **Dirac-Notation** kompakt ermöglichen.

Abstract

A survey which is included in the present diploma thesis shows that 60% of the student teachers of Physics at the University of Vienna have problems with the fundamental mathematical topics which are needed to understand theoretical quantum mechanics.

To support this students eight “Bausteine zum Erlernen des Formalismus der Quantentheorie” (blocks for learning the formalism of quantum theory) were created. The emphasis was put on the connection to students' previous knowledge (vectors and complex numbers) instead of mathematical completeness. These materials should enable the students to independently study the topics **vectors**, **complex numbers**, **matrices**, **complex vectors and index notation**, **eigenvalues and eigenvectors**, **basis change and diagonalisation**, **hilbert spaces and scalar products** und **Dirac notation** within a short period of time. The mathematical topics are physically, especially by quantum mechanics, motivated so students' immediately have a connection to the importance of this topics.

Danksagung

Zuallererst möchte ich meiner Betreuerin Frau Priv. Doz. Dr. Beatrix C. Hiesmayr danken, die mir, beginnend bei der Themenfindung, bei allen inhaltlichen und organisatorischen Fragen behilflich war. Ihr Wissen und ihre Erfahrung haben wesentlich zum Entstehen dieser Arbeit beigetragen.

Mein Dank gilt auch meinen Eltern Frau Helga Miedler, die diese Arbeit auch Korrektur gelesen hat, und Herrn Karl Miedler und meinem Freund Herrn Mag. Stephan Schmalzhofer dafür, dass sie mich immer in meinen Entscheidungen unterstützt haben. Meiner guten Freundin Frau Mag. Ceyda Bilgin danke ich für die Korrektur der englischen Teile dieser Arbeit.

Ich danke auch den Studierenden, die meine Bausteine getestet und evaluiert haben. Ihr Feedback hat mir sehr dabei geholfen die Bausteine zu verbessern.

Inhaltsverzeichnis

1	Motivation und Zielsetzung	1
2	Umfrage- und Prüfungsauswertung	3
2.1	Das Curriculum	3
2.1.1	Lehramtsstudium Diplom	3
2.1.2	Lehramtsstudium Bachelor of Education	3
2.2	Auswertung der Umfrage	4
2.2.1	Fragebogen	4
2.2.2	Auswertung einzelner Fragen	6
2.2.3	Beantwortung der Begriffsfragen	9
2.2.4	Inhalte, die in Erinnerung blieben	12
2.3	Auswertung der Prüfungsfragen	12
2.3.1	Impuls- und Ortsdarstellung	12
2.3.2	Dichtematrizen	15
2.3.3	Spektraldarstellung	16
2.4	Schlussfolgerungen aus den Auswertungen	18
3	Arbeitsmaterialien für Studierende	21
3.1	Bausteine	21
3.2	Behandelte Themen	21
3.3	Aufbau der Materialien	23
3.3.1	Titelblatt	23
3.3.2	Einstiegsbeispiele	23
3.3.3	Erklärender Text	24
3.3.4	Übungsaufgaben	25
3.4	Evaluation der Materialien durch Studierende	25
3.5	Interaktive Arbeitsmaterialien	27
3.5.1	Eigenwerte und Eigenvektoren finden	27
3.5.2	Figuren abbilden	29
	Anhang	33
	Zusammenfassung	148

Kapitel 1

Motivation und Zielsetzung

In meiner Diplomarbeit habe ich mich damit beschäftigt, welche Themen Lehramtsstudierenden des Unterrichtsfaches in der Vorlesung zur Theoretischen Physik mit dem Thema „Quantenmechanik“ besonders schwer gefallen sind und wo es Probleme gab. Diese Untersuchung beinhaltet eine Umfrage unter Studierenden, sowie eine Betrachtung besonders häufiger Fehler in Prüfungsarbeiten. Eine detaillierte Auswertung dieser Umfrage, wie auch der Prüfungsaufgaben sind in Kapitel 2 meiner Arbeit zu finden. Dabei wird auch darauf eingegangen, wie sich das Curriculum der entsprechenden Lehrveranstaltung durch die Umstellung vom Diplomstudium zum Bachelorstudium verändert hat.

Anschließend habe ich mir überlegt, wie man Abhilfe bei den auftretenden Problemen schaffen kann. Da sowohl in der Umfrage, als auch in den Prüfungen die mathematischen Grundlagen, welche für die Theoretische Physik notwendig sind, als grundlegendes Problem herausgestochen sind, habe ich Materialien entwickelt, die darauf abzielen Studierenden diese Hürde zu vereinfachen. Die sogenannten „Bausteine“ sollen so konzipiert sein, dass die Studierenden bei Themen abgeholt werden, die sie bereits aus der Schule kennen (beispielsweise Vektoren und komplexe Zahlen) und somit einen Einstieg in die mathematischen Themen finden, welche für die Quantenmechanik von Nöten sind. Es wurden Bausteine zu den acht hier aufgelisteten Themen verfasst:

- Vektoren
- Komplexe Zahlen
- Matrizen
- Komplexe Vektoren und Indexnotation
- Eigenwerte und Eigenvektoren

- [Matraxeigenschaften, Basiswechsel und Diagonalisierung \(„Familie Matrix“\)](#)
- [Hilberträume und Skalarprodukte](#)
- [Dirac-Notation](#)

Das Ziel der Bausteine ist, dass Studierende mit diesen selbstständig jene Mathematik erlernen können, die sie in der Vorlesung und den Übungen „Theoretische Physik III für das UF Physik“ benötigen. Wie bereits erwähnt, wiederholen und vertiefen die beiden ersten Bausteine Themen, die bereits aus der Schule bekannt sind beziehungsweise bekannt sein sollten. Ich habe bei der Erstellung auch darauf geachtet das Abstraktionsniveau kontinuierlich zu erhöhen. Mitunter aus diesem Grund sollte man die obenstehende Reihenfolge beachten und erst zum nächsten Baustein weiterspringen, nachdem man den Stoff des aktuellen verinnerlicht hat.

Die Materialien wurden während des Wintersemesters 2018/19 in der Lehrveranstaltung „Theoretische Physik III für das UF Physik“ im Zuge eines Tutoriums getestet und am Ende des Semesters von den Studierenden evaluiert.

Falls Sie mit diesen Materialien arbeiten, würde ich mich sehr über Kommentare jeglicher Art freuen. Bitte senden Sie diese an michaela.miedler@univie.ac.at. Die interaktiven Materialien, welche mit Hilfe von GeoGebra erstellt wurden, sind unter www.quantumparticlegroup.at/teaching zu finden.

Kapitel 2

Umfrage- und Prüfungsauswertung

2.1 Das Curriculum

2.1.1 Lehramtsstudium Diplom

Für das Diplomstudium Lehramt konnte man sich an der Universität Wien zuletzt im Studienjahr 2013/14 einschreiben. Der Formalismus der Quantentheorie wurde dabei in einer insgesamt sieben Semesterwochenstunden umfassenden Lehrveranstaltung namens „Theoretische Physik für das Lehramt L2 (Quantenmechanik und Statistische Physik)“ gelehrt. Diese bestand aus einer Vorlesung und einer Übung, welche für das fünfte Studiensemester vorgesehen waren.

Mathematische Grundlagen wurden in diesem Curriculum bereits im ersten Studienjahr in insgesamt drei Lehrveranstaltungen (Vorlesungen und Übungen) unterrichtet. All diese Veranstaltungen haben gemeinsam elf Semesterwochenstunden umfasst.

2.1.2 Lehramtsstudium Bachelor of Education

Die Lehrveranstaltung „Theoretische Physik III für UF: Quantenmechanik und Teilchenphysik; Math. Grundlagen“ umfasst eine Vorlesung sowie eine dazugehörige Übung. Diese werden zusammen mit acht ECTS-Punkten angegeben, was einem durchschnittlichen Arbeitsaufwand von 200 Stunden für die Studierenden entspricht. Im Curriculum werden die Modulziele wie folgt angegeben¹:

Studierende erwerben Grundkenntnisse des mathematischen Formalismus der Quantentheorie, der wichtigsten Quantenphänomene und des neuen Weltbildes: Zustand, Messung, Präparation, Observablen, Spin,

¹Curriculum für des BEd Studium Physik; http://www.univie.ac.at/mtb102/2015_2016/2015_2016_247.pdf (28.01.2018)

Polarisation, diskrete und kontinuierliche Quantentheorie, Schrödinger-Gleichung und einige Lösungen (harmonischer Oszillator, Wasserstoffatom,...), Heisenbergsche Unbestimmtheitsrelation, Stabilität der Materie, gemischte Zustände, Bellsche Ungleichungen, Quantenkryptographie, Quantencomputer, verschiedene Interpretationen; relativistische Formulierungen der Quantentheorie, Standardmodell, Teilchenerzeugungsprozesse; Hilbertraum, Matrizenrechnung, Eigenwerte, Eigenvektoren, Elemente der Wahrscheinlichkeitsrechnung, Fourierintegrale.

2.2 Auswertung der Umfrage

Die Umfrage wurde unter Lehramtsstudierenden durchgeführt, die bereits die Vorlesung sowie die Übungen zu „Theoretische Physik für das Lehramt L2 (Quantenmechanik und Statistische Physik)“ besucht haben. Es handelte sich dabei um jenes Semester, in dem der Lehrveranstaltungszyklus des alten Studienplans zum letzten Mal durchlaufen wurde. Der Fragebogen ist im Unterkapitel 2.2.1 zu finden. Die Umfrage wurde mit Hilfe der Website www.soscisurvey.de durchgeführt.

Es werden bei der Auswertung nur fachliche Angaben berücksichtigt. Jegliche Kommentare zu den Übungsgruppen, den Professoren sowie der Organisation der Lehrveranstaltung werden nicht berücksichtigt.

Die Umfrage wurde von 42 Personen abgeschlossen. Nicht komplett ausgefüllte Fragebögen werden berücksichtigt, sofern sie relevante Daten enthalten. Aus diesem Grund kann die Gesamtanzahl der Befragten bei den unterschiedlichen Fragen schwanken. Die ersten drei Fragen wurden dazu verwendet um mögliche Parameter zu untersuchen, die Einfluss auf die Angaben der Studierenden haben können. Diese drei Fragen wurden auf Anraten des Studienprogrammleiters, sowie des Dekans so anonym wie möglich gehalten, sodass es möglichst schwierig wäre auf die Identitäten der Befragten zu schließen.

Da größtenteils offene Fragen gestellt wurden, werden die einzelnen Antworten zusammengefasst. Dabei wird darauf geachtet alle Angaben zu berücksichtigen, sowie auftretende Probleme exakt herauszuarbeiten.

2.2.1 Fragebogen

1. Bist du bei der Prüfung am 27. April 2016 angetreten?
2. Hast du an einer der drei Übungsgruppen im Wintersemester 2015/16 teilgenommen?
3. Wie häufig hast du die Vorlesung besucht?

- (Fast) immer (100%-81%)
 - Oft (51%-80%)
 - Einmal in der Woche (50%)
 - Selten (49%-21%)
 - Sporadisch (20%-1%)
 - Nie (0%)
 - Nicht im WS15/16²
4. Findest du die Inhalte der Quantenmechanik interessant? Wenn ja, welche Inhalte interessieren dich besonders? (müssen nicht nur Inhalte der Vorlesung sein)
5. Welche Themen der Vorlesung sind dir besonders schwer gefallen und woran, glaubst du, hat das gelegen?
6. Hattest du Probleme mit den mathematischen Inhalten?
7. Was fällt dir zu folgenden Begriffen ein?
- Schrödinger-Gleichung
 - Dichtematrix
 - Unbestimmtheitsrelation
 - Superposition
 - Wasserstoffatom
 - Andere, deiner Meinung nach wichtige Begriffe
8. Welche Inhalte der Vorlesung sind dir besonders in Erinnerung geblieben?
- positiv
 - negativ
9. Wenn du etwas verändern könntest, was wäre das?
10. Hast du noch irgendwelche Gedanken/Ideen oder Sonstiges, die dir zur Verbesserung einfallen?

²Wenn diese Option ausgewählt wurde, sollte angegeben werden, in welchem Semester man die Vorlesung besucht hat, beziehungsweise bei welchem Professor, wie häufig man diese besucht hat und es wurde nach allgemeinen Anmerkungen gefragt.

2.2.2 Auswertung einzelner Fragen

Häufigkeit des Vorlesungsbesuchs

Diese Frage wurde von 66 Studierenden beantwortet, davon haben 51 die Vorlesung im Wintersemester 2015/16 besucht. Die von ihnen angegebenen Häufigkeiten des Vorlesungsbesuchs sind in Abbildung 2.1³ dargestellt. Die Einteilung der Häufigkeit bezieht sich dabei auf die im Fragebogen (siehe 2.2.1) angegebenen Optionen. Von

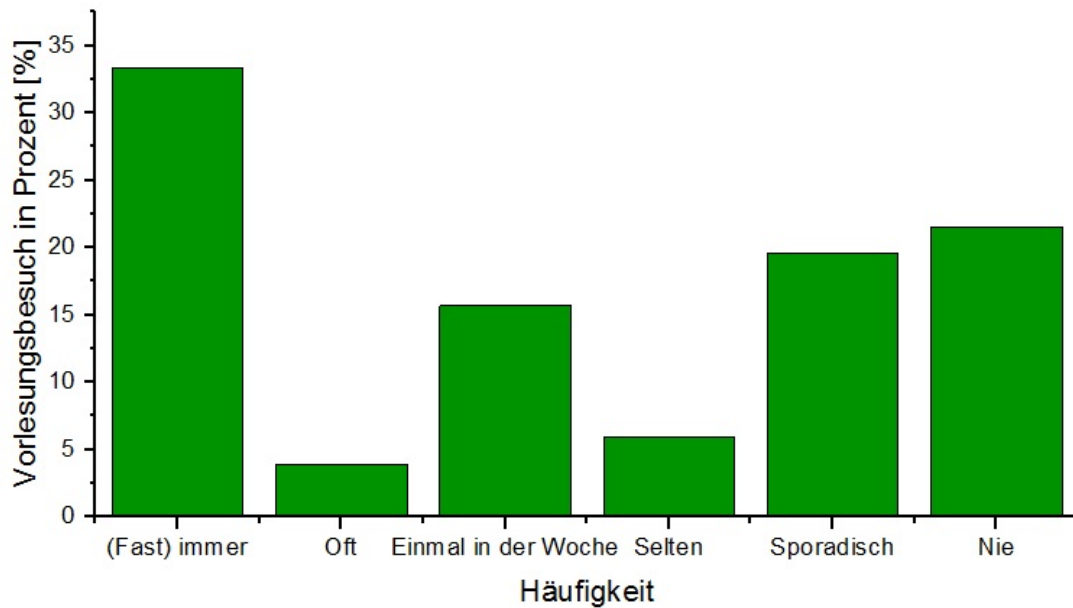


Abbildung 2.1: Hier ist zu sehen, wie häufig Studierende die Vorlesung im Wintersemester 2015/16 besucht haben.

den 66 Antworten auf diese Frage gab es auch 15 Studierende, welche die Vorlesung in einem anderen Semester besucht haben, jedoch teilweise die Prüfung zur Vorlesung bei einem der Termine im Wintersemester 2015/16 absolviert haben.

Interesse an Quantenmechanik

Dieser Punkt bezieht sich auf die vierte Frage des Fragenkatalogs in 2.2.1. Zu dieser Frage gaben 64 Studierende eine Antwort ab. Von diesen fanden 56 (87,5%) die Inhalte der Quantenmechanik interessant. In Tabelle 2.1 sind jene Inhalte angegeben, die von den Studierenden als besonders interessant bezeichnet wurden, sowie die Anzahl der Studierenden, die sich jeweils dafür ausgesprochen haben. Es gab auch

³Diese Grafik wurde mit OriginPro 2016 erstellt.

Inhalte	Anzahl
Quantenkryptographie	26
Verschränkung, Bellsche Ungleichung	13
Heisenbergsche Unbestimmtheitsrelation, Orts- und Impulszusammenhang	6
Schrödingergleichung	6
Atommodell, Wasserstoffatom, Orbitale, Aufbau der Materie	5
Spin	5
Polarisation	4
Comptonstreuung	3
Photoeffekt	3
Quantencomputer	3
Welle-Teilchen-Dualismus	3
Berechnen von Aufenthaltswahrscheinlichkeiten	2
Doppelspaltversuch	2
Formalismus	2
Quantenteleportation	2
Schrödingers Katze	2
Dekohärenz	1
Messprozesse	1
Predictability/Visibility	1
Reine und gemischte Zustände	1

Tabelle 2.1: Angaben zum Interesse von Studierenden

die Angabe „Alles“, diese wird hier nicht angegeben, da man dieser Antwort nicht entnehmen kann, welche Bereiche explizit gemeint sind.

Probleme beim Verständnis

Hier wird die fünfte Frage des Fragebogens aus Abschnitt 2.2.1 besprochen. Die Auswertung wurde, wie zu Beginn dieses Kapitels erläutert, durchgeführt.

Probleme mit den mathematischen Grundlagen

Um dies zu untersuchen, wurde eine eigene Frage erstellt (siehe Frage 6). Zu dieser Frage wurden 58 Stimmen abgegeben, davon hatten 35 Studierende Probleme mit den mathematischen Grundlagen und 23 haben dies nicht angegeben. Der Prozentsatz an Studierenden, die laut eigenen Angaben Probleme mit den mathematischen Grundlagen hatten, lag somit bei 60,3%.

Andere Schwierigkeiten

Zu dieser Frage haben sich 51 der TeilnehmerInnen der Umfrage geäußert. Da wie bei

einigen anderen Fragen freie Antworten möglich waren, waren hier eher qualitative statt quantitative Ergebnisse zu erwarten.

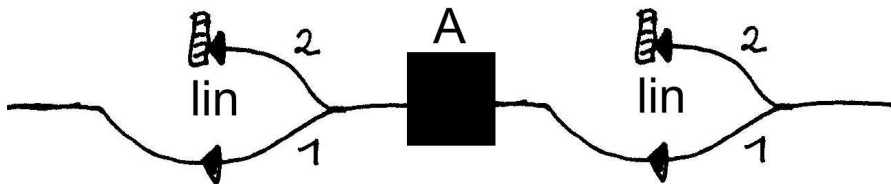
Wie bereits angegeben hatten viele Studierende Probleme mit den mathematischen Anforderungen und den neuen Formalismen. Sie gaben an, dass es unter anderem daran lag, dass sie die Vorlesung nicht besuchen konnten, beziehungsweise Schritte in Herleitungen und ähnlichem ausgelassen wurden. Hier wurden auch Gründe wie Zeitmangel und fehlende Grundlagen genannt. Andererseits wurde angegeben, dass mathematisch Triviales zu lange erklärt wurde und somit für Neues zu wenig Zeit blieb. Eng damit verbunden sind auch Probleme, welche die kontinuierliche Quantenmechanik betrifft, da Schwierigkeiten in diesen Bereichen mit mathematischen Unklarheiten verbunden waren.

Oft gab es Probleme Zusammenhänge nachzuvollziehen. Hier wurde einige Male die Schrödingergleichung genannt und angegeben, dass die Person nicht weiß, wofür diese benötigt wird, beziehungsweise, was sie aussagt.

Des Weiteren wurde angegeben, dass die nicht mit dem Alltagsverständnis vereinbare Quantenmechanik schwer vorstellbar ist.

Es wurden einige konkrete Themengebiete angegeben, hier ist hervorgegangen, dass besonders Beispiele, wie das folgende Probleme bereitet haben⁴:

Alice bekommt von ihrer Großmutter vier Quantenapparate A_k geschenkt ($k = 1, 2, 3, 4$). Sie testet jeden einzelnen mit der folgenden Anordnung



wobei sie alle möglichen H/V Projektoren links/rechts anwendet (4 Experimente pro Apparat A_k). Durch eine ausreichend lange Messreihe schließt sie auf die folgenden Wahrscheinlichkeiten

$$|\langle H|A_k|H\rangle|^2 = |\langle V|A_k|V\rangle|^2 = 1$$

$$|\langle H|A_k|V\rangle|^2 = |\langle V|A_k|H\rangle|^2 = 0.$$

Alle vier Apparate A_k ergeben also die selben Wahrscheinlichkeiten für diese Basiswahl. Anschließend entfernt sie die linearen Projektoren und

⁴Hiesmayr, Beatrix; Präsenzübungen zur Vorlesung „Theoretische Physik für das Lehramt L2“ (2015)

schaltet vor und nach dem Apparat einen rechtsdrehenden Projektor und bestimmt die folgende Wahrscheinlichkeit

$$|\langle R|A_k|R\rangle|^2 = p_k .$$

Für Apparat A_1 ist $p_1 = 0$, für A_2 ist $p_2 = \frac{1}{2}$, für A_3 ist $p_3 = \frac{3}{4}$ und für A_4 ist $p_4 = 1$.

- Geben Sie die Operatoren A_k in der zirkular Basisdarstellung an (Tipp: Allgemein rechnen und dann für die verschiedenen Apparate einsetzen).
- Schreiben Sie die Operatoren A_k in der bra/ket Schreibweise in der H/V Basis an.
- Welchen Output Zustand erhält man, falls man ein Photon präpariert im Zustand $|H\alpha\rangle$ mit $\alpha = 45^\circ$ ($\equiv | + 45^\circ$) hinein schickt.

Damit verbunden gaben die Studierenden Basistransformationen als schwierig an. Einige Angaben gab es auch zur „Statistischen Physik“, welche im zweiten Teil der Vorlesung behandelt wurde. Hier wurde angegeben, dass es Probleme gab, da der Stoff nicht mehr in den Übungen behandelt wurde. Dieses Problem wurde im neuen Curriculum dadurch gelöst, dass die beiden Teile der Lehrveranstaltung „L2“ (Quantenmechanik und Statistische Physik) in zwei separate Lehrveranstaltungen mit eigenen Übungen unterteilt wurde.

2.2.3 Beantwortung der Begriffsfragen

Schrödinger-Gleichung

Die Antworten der Studierenden gingen hier sehr weit auseinander und es wurden sehr viele Assoziationen genannt, auf die im Folgenden eingegangen wird. Die Frage wurde von 38 TeilnehmerInnen beantwortet. Die Zahlen in Klammern beschreiben dabei, von wie vielen StudentInnen diese oder eine ähnliche/äquivalente Antwort stammt.

Die Schrödinger-Gleichung wurde als Universalgleichung (4) bezeichnet und etwas genauer als Bewegungsgleichung (5). Dabei wurde erkannt, dass sie ähnlich den Newtonschen Gleichungen fungiert und die Dynamik eines Systems beschreibt (1). Eng damit verbunden steht auch die Aussage, dass die Schrödinger-Gleichung etwas mit der zeitlichen Entwicklung eines Zustands zu tun hat (6). Auch Begriffe wie Energie (2), Operator beziehungsweise Hamilton-Operator (5) wurden genannt. Ebenso wurden Begriffe angesprochen, die auf die mathematische Beschreibung der Schrödinger-Gleichung hindeuten. Auf die Formel $i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi = H\psi$ wurde sieben Mal hingewiesen, dabei blieb besonders das reduzierte Plank'sche Wirkungsquantum \hbar

und die Wellenfunktion ψ in Erinnerung. Die Wellenfunktion und die Wellengleichung selbst wurde auch einige Male angegeben.

Dichtematrix

Dieses Feld wurde 35 Mal ausgefüllt. In 14 dieser Antworten wurde der Begriff „Zustand“ genannt. Es wurde hierbei einerseits angegeben, dass die Dichtematrix das allgemeinste (mathematische) Objekt zur Beschreibung eines Zustands ist und andererseits, dass sie dazu verwendet werden kann um reine und gemischte Zustände zu unterscheiden.

Die drei Eigenschaften, die auf eine Dichtematrix zutreffen wurden mehrfach genannt. Dabei wurde am häufigsten angegeben, dass die $\text{Tr}(\rho) = 1$ sein muss (meist wurde nur der Begriff „Spur“ genannt). Die Hermitezität und Positivität wurden ebenfalls genannt.

Im Zusammenhang mit diesem Begriff wurde auch „Blochkugel“, „Paulimatrizen“ und „Aufenthaltswahrscheinlichkeit“ angeführt.

Von sieben Studierenden wurden Antworten gegeben, die darauf hinweisen, dass es Probleme im Verständnis gab, beziehungsweise sie es nicht als wichtig ansehen. Dabei hat nur einer der sieben angegeben die Vorlesung „(Fast) immer“ besucht zu haben.

Unbestimmtheitsrelation

Auf diese Frage wurden 38 Antworten gegeben. Dabei wurde 20 Mal explizit die Messgenauigkeit bei korrelierten Größen angesprochen. Am häufigsten wurde die Unbestimmtheit zwischen Ort und Impuls erwähnt. Von acht Studierenden wurde angegeben, dass es sich hierbei um ein Naturgesetz handelt und nicht durch die Messung begründet ist. Hier ist allerdings schwer einzuschätzen, wie die anderen zwölf Angaben zu werten sind, da es sich um ein freies Textfeld handelt. Einige Male wurde die Unbestimmtheitsrelation zwischen Zeit und Energie angegeben.

Die Schranke $\frac{\hbar}{2}$ für zwei komplementäre Observablen wurde drei Mal explizit genannt, dabei wurde allerdings öfter auf das Wesen der korrelierten Messgrößen allgemein hingewiesen. Meist wurde wie oben erwähnt die Orts-Impuls-Unbestimmtheit angesprochen, jedoch kam in den Antworten auch die Unbestimmtheit zwischen Zeit und Energie vor. Der Kommutator wurde jedoch nur ein einziges Mal erwähnt.

In fünf Antworten wurde nur angeführt, dass es sich um einen Zusammenhang zwischen Ort und Impuls beziehungsweise zwischen Energie und Zeit handelt.

Einige Studierende (5) nannten nur den Namen „Heisenberg“, der als Begründer der Unbestimmtheitsrelation gilt. Es wurden auch oft der Begriff „Unschärferelation“ angegeben, welcher häufig synonym verwendet wird.

Superposition

Auch auf diese Frage gab es 38 Antworten. Dabei war in 18 davon der Begriff „Überlagerung“ zu finden. Auch auf den mathematischen Ausdruck der „Linearkombination“ wurde eingegangen. Auch einige daraus resultierende Aussagen und Anwendungen wurden genannt.

In zehn der Antworten wurde ebenfalls die in der Quantenphysik relevante Überlagerung von Zuständen genannt. Das speziell reine Zustände überlagert werden, war in zwei Antworten zu finden. Auch andere Formen der Superposition wurden erwähnt, beispielsweise die von Wellen(funktionen). Einige Male (2) wurde angemerkt, dass sich die beiden überlagernden Zustände nicht gegenseitig behindern dürfen.

In sieben der Fragebögen wurde das gleichzeitige Vorhandensein zweier Zustände angeführt. Dabei wurde erwähnt, dass bis zur Messung zwei Werte existieren und erst bei der Messung zufällig einer der beiden ausgewählt wird (Doppelspalt).

Des Weiteren wurde auch das mathematische Kalkül der Addition zweier Lösungen angegeben, sowie die Begriffe „(orthogonale) Basis“ und „Vektorraum“ genannt.

Es wurden Verbindungen zu Schrödingers Katze, Kommutatoren, Erwartungswerten und den Winkelfunktionen \cos und \sin gezogen.

Wasserstoffatom

Diese Frage wurde von 36 Studierenden beantwortet. Dabei wurde in sechs der Antworten nur auf chemische Eigenschaften hingewiesen, beispielsweise auf das Formelzeichen „H“. Neun der Befragten wiesen lediglich auf die Komplexität des Themas hin.

In 13 der Antworten fand sich eine Anmerkung zu den in der Vorlesung angestellten Berechnungen. Dabei wurden beispielsweise Dinge wie *Warum fällt das Elektron nicht in den Kern?* und *Anwendung der Schrödingergleichung* genannt. Außerdem wurde erwähnt, dass das Wasserstoffatom das kleinste und somit das am einfachsten zu berechnende ist, sowie jenes bei dem die Schrödingergleichung analytisch lösbar ist. Der häufigste Begriff (7) der genannt wurde war „Bohrscher Radius“ beziehungsweise „Bohrsches Modell“. Andere häufig vorkommende Begriffe waren „Aufenthaltswahrscheinlichkeit“ und „Schrödingergleichung“.

Andere wichtige Begriffe

Dieses Feld wurde 28 Mal ausgefüllt. Dabei waren die folgenden Begriffe sehr häufig: Pauli-Matrizen (7), Verschränkung (6), Zustand (5), Quantenkryptographie (4) und Spektralzerlegung (3). Alle anderen genannten Begriffe kamen nur ein oder zwei Mal vor.

2.2.4 Inhalte, die in Erinnerung blieben

Hier wurden sowohl bei der positiven als auch der negativen Option 37 Antworten abgegeben, von denen einige auf die Organisation beziehungsweise Durchführung der Vorlesung und der Übungsgruppen bezogen waren und hier nicht erwähnt werden.

Inhaltlich wurden die ersten Kapitel als positiv wahrgenommen, dabei ging es um allgemeine Grundlagen, die Dirac-Notation und Quantenkryptographie. Vor allem die letztere wurde sehr häufig genannt. Die späteren Kapitel der „L2-Vorlesung“ wurden oft als negativ angeführt. Hier wurde sowohl die kontinuierliche Quantenmechanik als auch die Interferenz-Erscheinungen angegeben.

Mathematische Formalismen wurden sowohl positiv, als auch negativ aufgefasst. Die Bra-Ket-Schreibweise und alles damit verbundene wurde eher positiv aufgenommen. Negativ hingegen wurden Herleitungen und lange Berechnungen mit Hilfe der Analysis betrachtet, wobei häufig der Begriff „Schrödingergleichung“ genannt wurde. Hier zeichnet sich ebenfalls der Trend ab, der im letzten Absatz beschrieben wurde.

Die im zweiten Teil der Lehrveranstaltung behandelte Statistische Physik wurde sowohl positiv, als auch negativ aufgefasst.

2.3 Auswertung der Prüfungsfragen

Es wurden hier die Arbeiten des 4. Prüfungstermins der Vorlesung „Theoretische Physik für das Lehramt L2 (Quantenmechanik und Statistische Physik)“ vom 4. Juli 2016 zur Auswertung herangezogen. Es handelt sich dabei um 45 anonymisierte Prüfungsbögen.

2.3.1 Impuls- und Ortsdarstellung

Prüfungsfrage

Hier wurden zwei voneinander getrennte Prüfungsfragen betrachtet.

1. Wie lautet der Hamiltonian für ein freies Teilchen im zweidimensionalen Raum? Geben Sie die darstellungsunabhängige Form, die Orts- und die Impulsdarstellung des Hamiltonians an.
2. Durch welche Transformation sind Impuls- und Ortsdarstellung miteinander verbunden? Welche mathematische Eigenschaften erfüllt diese Transformation?

Beantwortung der Fragen

1. Der Hamiltonian eines freien Teilchens in der darstellungsunabhängigen Form kann geschrieben werden durch

$$\hat{H} = \frac{\hat{\vec{p}}^2}{2m} \quad (2.1)$$

In Impulsdarstellung hat der Hamiltonian des freien Teilchens die folgende Form:

$$H = \frac{\vec{p}^2}{2m} = \frac{p_x^2 + p_y^2}{2m} \quad (2.2)$$

Um diesen Hamiltonian nun in Ortsdarstellung anzugeben benötigt man den Zusammenhang $p = -i\hbar \frac{d}{dx}$. Da hier allerdings der Hamiltonian für den zweidimensionalen Raum gefragt wird benötigt man anstelle der eindimensionalen Ableitung $\frac{\partial}{\partial x}$ den zweidimensionalen Laplace-Operator $\Delta = \left(\frac{\partial^2}{\partial x_1^2} + \frac{\partial^2}{\partial x_2^2} \right)$. Der gefragte Hamiltonian sieht nun folgendermaßen aus:

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta = -\frac{\hbar^2}{2m} \cdot \left(\frac{\partial^2}{\partial x_1^2} + \frac{\partial^2}{\partial x_2^2} \right) = -\frac{\hbar^2}{2m} \cdot \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} \right) \quad (2.3)$$

2. Die Impuls- und Ortswellenfunktion sind über die Fouriertransformation miteinander verbunden. In drei Dimensionen kann diese geschrieben werden durch

$$\psi(\vec{x}) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{\frac{3}{2}}} \int_{\mathbb{R}^3} d^3p \tilde{\psi}(\vec{p}) e^{\frac{i}{\hbar}\vec{p}\cdot\vec{x}} \quad (2.4)$$

$$\tilde{\psi}(\vec{p}) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{\frac{3}{2}}} \int_{\mathbb{R}^3} d^3x \psi(\vec{x}) e^{-\frac{i}{\hbar}\vec{p}\cdot\vec{x}} \quad (2.5)$$

Diese Abbildung hat unter anderem die folgenden Eigenschaften:

- Unitarität: Eine Abbildung wird unitär genannt, wenn sie das Skalarprodukt erhält.
- Linearität

$$\mathcal{F}[f_1 + f_2] = \mathcal{F}[f_1] + \mathcal{F}[f_2] \quad (2.6)$$

$$\mathcal{F}[\alpha f] = \alpha \mathcal{F}[f] \quad (2.7)$$

- Invertierbarkeit

Lösungen der Studierenden

1. Bei dieser Frage traten einige Fehler auf, die auf verschiedene Missverständnisse zurückzuführen sind. Nur eine der 45 Personen hat diese Frage nicht beantwortet.

- **Potenzial:** In zwei Ausarbeitungen wurde der Hamiltonian in folgender Form angegeben:

$$H = \frac{\vec{p}^2}{2m} + V \quad (2.8)$$

In einer der beiden wurde allerdings nur die darstellungsunabhängige Form mit einem solchen Potential angegeben. In der zweiten Antwort wurde nur ein Ausdruck wie in (2.8) zu sehen angegeben.

Das Problem hier ist möglicherweise, dass die Aussage eines Hamiltonians nicht verstanden wurde, beziehungsweise die Studierenden nicht erkannt haben, welche Energien für ein freies Teilchen entscheidend sind. Mit anderen Worten, sie wissen nicht worum es sich bei einem freien Teilchen handelt.

- **Dimension des Laplace-Operators:** In 14 der 44 Beantwortungen wurde der Laplace-Operator in drei Dimensionen angegeben und nicht in zwei, wie von der Prüfungsfrage gefordert. In den anderen Antworten wurde oft auch nur der Laplace-Operator allgemein angeschrieben und nicht in seine Komponenten zerteilt. Lediglich fünf Personen haben den Laplace-Operator in zwei Dimensionen aufgespalten.

- **Formalismus:** In zwei der Prüfungen war die Formulierung der darstellungsunabhängigen Form im Gegensatz zur Impulsdarstellung unklar. Dabei ist zu beachten, dass die darstellungsunabhängige Form durch ein „Dacherl“ gekennzeichnet wird.

Ein weiteres Problem im Formalismus stellen die partiellen Differentiale dar. Ein Großteil der Studierenden hat im Formalismus die Schreibweisen $\frac{d}{dx}$ und $\frac{\partial}{\partial x}$ verwechselt.

Oft wurden auch Vektorpfeile über dem Impuls nicht angeführt.

- **Darstellungsunabhängige Form:** Bei vier der Prüfungsbögen wurde die darstellungsunabhängige Form nicht durch einen Hamiltonian beschrieben, der den Impuls beinhaltet. Dabei wurde einmal folgende Formel angegeben

$$H = E_{\text{kin}} = \frac{\hbar^2 \vec{k}^2}{2m} \quad (2.9)$$

und bei den drei anderen die stationäre Schrödingergleichung

$$\hat{H}\psi(\vec{r}) = E\psi(\vec{r}). \quad (2.10)$$

Die Studierenden kennen hier womöglich den Begriff der darstellungsunabhängigen Form nicht.

2.3.2 Dichtematrizen

Prüfungsfrage

Es sind die Matrizen

$$A = \begin{pmatrix} \frac{1}{3} & 0 \\ 0 & \frac{2}{3} \end{pmatrix} \quad B = \begin{pmatrix} \frac{1}{4} & -i \\ i & \frac{3}{4} \end{pmatrix} \quad C = \begin{pmatrix} 1 & \frac{i}{\sqrt{3}} \\ \frac{i}{\sqrt{3}} & 0 \end{pmatrix} \quad (2.11)$$

gegeben. Die Studierenden sollen bestimmen, welche dieser Matrizen einen physikalischen Zustand beschreiben. Diese Entscheidung soll auch begründet werden.

Beantwortung der Fragen

Damit eine Matrix ρ einen physikalisch relevanten Zustand beschreiben kann, muss sie die drei nachstehenden Bedingungen erfüllen.

1. **Normiertheit** $\text{Tr}\rho = 1$. Die Spur (Summe der Hauptdiagonalelemente) der Matrix ist gleichbedeutend mit der Gesamtwahrscheinlichkeit und muss somit stets 1 ergeben.
2. **Hermitizität** $\rho = \rho^\dagger$. Daraus folgt, dass alle Eigenwerte reell sind.
3. **Positivität** $\langle \phi | \rho | \phi \rangle \geq 0$. Diese Forderung ist gleichbedeutend damit, dass alle Eigenwerte positiv oder Null sind.

Durch Überprüfen dieser Forderungen kommt man zu dem Ergebnis, dass es sich lediglich bei der Matrix A um einen physikalischen Zustand handelt. Die Matrix C verletzt die Hermitizität, was man daran erkennt, dass die Nebendiagonalelemente nicht komplex-konjugiert zueinander sind. Die Matrix B hat einen negativen Eigenwert und verletzt somit die Positivität.

Lösungen der Studierenden

Diese Frage wurde außer von einem von allen Studierenden beantwortet. Von 14 Studierenden wurde die Frage richtig beantwortet, wobei bei einer dieser Antworten die Hermitizität von A nicht direkt gezeigt wurde.

Die anderen Studierenden haben teilweise sehr unterschiedliche Antworten gegeben, die im Folgenden zusammengefasst werden.

- In sieben Prüfungen wurden zwar die drei geforderten Eigenschaften angegeben, jedoch die Rechnungen nicht durchgeführt um herauszufinden, welche Eigenschaften auf welche Matrizen zutreffen.
- Eng mit dem ersten Punkt verbunden ist, dass in einigen Prüfungen nur Teile der Eigenschaften nachgerechnet wurden. In vier Arbeiten wurde die Positivität nicht gezeigt, in drei weiteren kam es zu Rechenfehlern bei den Eigenwerten. Hier sieht man, dass manchen Studierenden anscheinend das Berechnen von Eigenwerten sehr schwer fällt, beziehungsweise sie dieses gar nicht beherrschen.
- In einigen Arbeiten wurde direkt oder indirekt Hermitizität mit Unitarität verwechselt. Dabei meint direkt, dass bei der Forderung nach Hermitizität $\rho^\dagger = \rho^{-1}$ angegeben wurde beziehungsweise nachgerechnet wurde ob $\rho^\dagger \rho = \mathbb{1}$ erfüllt ist. Mit indirekt ist gemeint, dass die Studierenden den Matrizen B und C Eigenschaften zugeordnet haben, die auf einen solchen Fehler hinweisen.
- In einer Arbeit wurden die Eigenschaften Unitarität, Invertierbarkeit und Positivität angegeben. In einer weiteren wurde gefordert, dass ρ invertierbar und unitär ist. Außerdem wurde hier verlangt, dass eine Dichtematrix die Gruppeneigenschaften erfüllen muss. Die letzte Forderung ist besonders problematisch, da hier das Verständnis der Gruppe an sich fehlt. Die Gruppeneigenschaften können im Allgemeinen nicht für einzelne Matrizen angegeben werden. Möglicherweise ist diese Aussage auch wie im nächsten Punkt beschrieben zu verstehen.
- In drei Aufgaben wurde zusätzlich zu den drei richtigen Eigenschaften angegeben, dass die 2×2 -Matrizen invertierbar und unitär sein müssen und ebenso die Gruppeneigenschaften erfüllen.
- In zwei Arbeiten wurde versucht die Normiertheit durch die Bedingung $\text{Tr}\rho^2 = 1$ zu überprüfen. Diese Forderung trifft auf reine Zustände zu. Daher stammt der Fehler womöglich aus einer Verwechslung der beiden Forderungen.

In dieser Aufgabe wird, wie auch in der nächsten klar, dass einige Studierende Probleme mit den Inhalten der Linearen Algebra haben, die die mathematische Grundlage der Quantenmechanik ist.

2.3.3 Spektraldarstellung

Prüfungsfrage

Die Spektraldarstellung des Operators

$$\hat{A} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \quad (2.12)$$

soll bestimmt und die dahinter liegende Physik erklärt werden.

Beantwortung der Fragen

Für die Spektraldarstellung dieser Matrix müssen einerseits die Eigenwerte λ_1 und λ_2 bestimmt werden, andererseits müssen ebenso die Eigenvektoren \vec{v}_1 und \vec{v}_2 berechnet werden. Der Operator \hat{A} hat in Spektraldarstellung dann die Form

$$\hat{A} = \lambda_1 |v_1\rangle \langle v_1| + \lambda_2 |v_2\rangle \langle v_2|. \quad (2.13)$$

Für die Matrix A ergeben sich die Eigenwerte 1 und -1 und die Eigenvektoren der Standardbasis, wodurch man sie in Spektraldarstellung folgendermaßen schreiben kann:

$$\hat{A} = 1 \begin{pmatrix} 1 & \\ & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 \end{pmatrix} - 1 \begin{pmatrix} 0 & \\ & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & 1 \end{pmatrix} \quad (2.14)$$

Die Eigenwerte geben die Messwerte des Systems an. In diesem Fall kann das System also die Messwerte 1 und -1 annehmen. Die Eigenvektoren geben den zugehörigen Zustand des Systems nach der Messung an.

Lösungen der Studierenden

In der Auswertung dieser Frage wird großteils auf die rechnerische Komponente Rücksicht genommen. Das hat den Grund, dass einige Studierende den Operator \hat{A} (richtigerweise) als Pauli-Matrix σ_z interpretiert haben und die Frage des physikalischen Hintergrunds auf diese bezogen haben, anstelle ihn auf die Spektraldarstellung zu beziehen.

Die Spektralzerlegung wurde von 29 Studierenden korrekt durchgeführt. Hierbei traten jedoch einige Ungenauigkeiten auf, die im Folgenden diskutiert werden.

- Die Schreibweise der Dirac-Notation wurde zweimal falsch aufgefasst. Dabei wurde einmal der Eigenwert durch $|a_n\rangle$ geschrieben und im anderen Fall der Eigenvektor $(1 \ 0)^T$ in den Ket geschrieben und auch darin transponiert. Dieser Fehler deutet darauf hin, dass die Dirac-Notation den betreffenden Studierenden nicht klar ist.
- Einmal wurden nur die Eigenwerte und Eigenvektoren berechnet, jedoch die Spektraldarstellung nicht angegeben. In einer anderen Arbeit wurden lediglich die Eigenwerte berechnet.

Wie in der letzten Aufgabe ist die Berechnung der Eigenvektoren hier das größte Problem. Teilweise wurden falsche Eigenvektoren ohne Rechenweg angegeben, woraus keine Schlussfolgerung gezogen werden kann. Hier wird exemplarisch einer der

Rechenwege angegeben, den einige Studierende so oder so ähnlich eingeschlagen haben. Die Eigenwerte wurden hier meist korrekt berechnet. Diese Lösung geht von der Eigenwertgleichung $Av = \lambda v$ aus. Aus dieser wurde für den Eigenwert $\lambda = 1$ versucht der Eigenvektor auf folgende Weise zu bestimmen:

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} v_x \\ v_y \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} v_x \\ v_y \end{pmatrix} \quad (2.15)$$

Aus dieser Gleichung wurde korrekt abgeleitet, dass

$$\begin{pmatrix} v_x \\ -v_y \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} v_x \\ v_y \end{pmatrix} \quad (2.16)$$

gilt. Es wurden nun die Gleichungen $v_x = v_x$ und $-v_y = v_y$ abgeleitet. Das Problem war dabei nun, dass aus diesen Gleichungen falsche Schlussfolgerungen gezogen wurden. Beispielsweise, dass es sich hier nur um einen Rechenfehler handeln kann. Andere Studierende hatten Schwierigkeiten damit die erhaltenen Eigenvektoren korrekt zu normieren. In einer Prüfung wurde der Nullvektor als Eigenvektor angegeben.

2.4 Schlussfolgerungen aus den Auswertungen

Sowohl aus der Umfrage als auch aus der Auswertung der Prüfungsfragen erkennt man, dass die Studierenden oft Probleme mit mathematischen Konzepten haben. Knapp zwei Drittel haben dies auch in der Umfrage angegeben. In den Prüfungen erkennt man, dass oft das in der Vorlesung präsentierte Beispiel gelernt wird und kleine Veränderungen der Angabe eine Hürde darstellen. Ein Beispiel dafür ist in Abschnitt 2.3.1 zu sehen. Hier wird zur Beantwortung der Frage der zweidimensionale Laplace-Operator benötigt. Anstelle dieses wurde von etwa einem Drittel der Studierenden der dreidimensionale Laplace-Operator angegeben.

Ein weiterer Punkt, der auffällt ist, dass einige Studierende die Berechnung von Eigenwerten und Eigenvektoren nicht durchgeführt haben oder massive Fehler dabei gemacht haben. Dies wird auch klar, da eine bestimmte Übungsaufgabe einige Male in der Umfrage genannt wurde, diese ist im Abschnitt 2.2.2 dieser Arbeit abgedruckt. In dieser Aufgabe muss ein Basiswechsel durchgeführt werden um sie zu lösen.

Auffällig ist, dass knapp 90% die Inhalte der Quantenmechanik als interessant angegeben haben. Dabei wurde die „Quantenkryptographie“ als eines der interessantesten Themen angeführt. Dieses Thema wurde in der Vorlesung des Wintersemester 2015/16 sehr anschaulich unterrichtet. Dabei wurde auf das BB84- und das Ekert-Protokoll eingegangen.

Alles in Allem macht die Situation den Anschein als wären fehlende mathematische Grundlagen das wesentliche Problem, weshalb diese Vorlesung als eine der schwierigsten im Lehramtsstudium Physik gilt.

Kapitel 3

Arbeitsmaterialien für Studierende

3.1 Bausteine

Der Name „Bausteine“ stammt von meiner Betreuerin Frau Priv. Doz. Dr. Beatrix C. Hiesmayr. Ich finde ihn allerdings auch sehr passend, da man sich beim Erlernen neuer Themen viel leichter tut, wenn man ein solides Fundament aufgebaut hat. Mein Ziel ist es, den Studierenden das Baumaterial für ein solches Fundament mit auf den Weg zu geben.

3.2 Behandelte Themen

Die insgesamt acht Bausteine behandeln grundlegende mathematische Themen, welche für die Quantenmechanik-Vorlesung im Lehramtsstudium benötigt werden. Im Zentrum stehen dabei die Themen der Linearen Algebra.

Diese sind im Anhang dieser Diplomarbeit zu finden, beziehungsweise unter www.quantumparticlegroup.at/teaching abrufbar. Die empfohlene Reihenfolge ist nicht bindend und die Bausteine wurden so konzipiert, dass ein jeder für sich selbst steht. Man kann also einzelne Bausteine überspringen. Jedoch ist vor allem jenen Studierenden, die sich auf Grund der mathematischen Tiefe Sorgen machen, empfohlen in der angegebenen Reihenfolge vorzugehen. Diese Reihenfolge bietet den Vorteil, dass kaum Begriffe als bekannt vorausgesetzt werden und vor allem in den ersten Bausteinen einige bekannte Passagen vorkommen werden, was ein erstes Erfolgserlebnis bieten soll.

Im Nachstehenden wird die empfohlene Reihenfolge angegeben und die darin behandelten Themen kurz zusammengefasst.

1. **Vektoren:** In diesem Baustein werden die Rechengesetze zuerst für zweidimensionale und anschließend für höherdimensionale Vektoren behandelt. Am Ende wird der Begriff „Vektorraum“ eingeführt.

2. **Komplexe Zahlen:** Hier werden die komplexen Zahlen ausgehend, von den Lösungsfällen quadratischer Gleichungen behandelt. Danach werden die Rechengesetze entwickelt und mit jenen für Vektoren verglichen. Zum Schluss richtet sich der Blick auf die Polardarstellung und ihre Vorteile, sowie Nachteile.
3. **Matrizen:** Dies ist womöglich das erste Thema, dass komplett neu ist. Matrizen werden unter dem Gesichtspunkt der Abbildungen eingeführt. Anschließend werden ihre Rechengesetze definiert und auf die wichtigen Begriffe „Invertierbarkeit“ und „Orthogonalität“ hingewiesen.
4. **Komplexe Vektoren und Indexnotation:** Dieser Baustein führt das Konzept der komplexen Zahlen als Grundkörper eines Vektorraums ein. Hier lernen die Studierenden den \mathbb{C}^2 mit seinem Skalarprodukt kennen. Zum Schluss wird der wichtige Begriff „Unitarität“ eingeführt. Im zweiten Teil dieses Bausteins wird die in der Physik häufig verwendete Indexnotation behandelt.
5. **Eigenwerte und Eigenvektoren:** Ziel dieses Bausteins ist es die geometrische Bedeutung der Eigenwertgleichung zu verstehen. Dazu werden einige charakteristische Beispiele des \mathbb{R}^2 behandelt. Dieser Baustein kann interaktiv erarbeitet werden. Die verwendeten Applets werden später gezeigt. Nachdem eine Vorstellung von Eigenwerten und Eigenvektoren erarbeitet wurde, wird gezeigt, wie man diese berechnen kann und der Begriff „Eigenraum“ behandelt. Eigenwertgleichungen sind zentrale Elemente der Quantenmechanik, weshalb es sehr wichtig ist, dass die Studierenden den Umgang mit diesen beherrschen.
6. **Familie Matrix:** In diesem Baustein werden die wichtigsten Matriceigenschaften, wie beispielsweise die Projektion, behandelt. Ein wichtiges Konzept, das hier erlernt werden soll ist das Diagonalisieren. Dieses wird dann verwendet um Funktionen auf Matrizen anzuwenden.
7. **Hilberträume:** Vom sechsten zu diesem Baustein ist wohl der größte Abstraktionsschritt nötig. Hier wird der Hilbertraum eingeführt. Anschließend werden die reellen Polynome vom Grad ≤ 2 als Beispiel für einen Vektorraum behandelt und deren Skalarprodukt diskutiert. Dieses dient als Beispiel der axiomatischen Definition eines solchen. Auch der Begriff „Dualraum“ wird hier, jedoch ohne Definition, eingeführt.
8. **Bra-Ket-Formalismus:** Der letzte Baustein behandelt den Dirac-Formalismus. Dieser wird hier zuerst für den Vektorraum \mathbb{C}^2 eingeführt um seine Vorzüge kennenzulernen. Mit Hilfe des im letzten Bausteins erworbenen Wissens werden diese Konzepte verallgemeinert bis die Reise bei der stationären Schrödingergleichung endet.

3.3 Aufbau der Materialien

Die Materialien sind so konzipiert, dass die Studierenden bei der bereits aus der Schule bekannten Vektorrechnung abgeholt werden. Auch die komplexen Zahlen sind womöglich bereits aus der Schule bekannt. Beide dieser Bausteine sind jedoch so konzipiert, dass man sie auch ohne Vorkenntnisse verstehen kann. Die restlichen Bausteine behandeln Themen, die üblicherweise erst an der Universität unterrichtet werden.

Die Bausteine sind so konzipiert, dass der Leser beziehungsweise die Leserin direkt angesprochen werden. Oft werden auch Fragen gestellt, die den Lesefluss durch eine kurze Nachdenkpause unterbrechen sollen. Das soll verhindern, dass man den Text einfach überfliegt und dabei die wichtigen Punkte übersieht.

Jeder Baustein besteht aus vier Teilen.

3.3.1 Titelblatt

Am Deckblatt des Bausteins werden kurz Informationen darüber gegeben, weshalb dieses Thema für die Quantenmechanik beziehungsweise auch für andere Themen der Physik wichtig ist. Es soll als Motivation dienen und den Studierenden ermöglichen das Thema einzuordnen.

Falls es zu einem bestimmten Baustein interaktive Ergänzungen gibt, so werden die Hyperlinks zu diesen ebenfalls am Deckblatt angegeben.

3.3.2 Einstiegsbeispiele

Die Einstiegsbeispiele erfüllen mehrere Zwecke, die im Folgenden erklärt werden.

- Sie sollen die Studierenden an bereits gelernte Inhalte erinnern, die in diesem Baustein behandelt werden. Dies gilt vor allem für jene Themen, die bereits aus der Schule bekannt sein sollten. In späteren Bausteinen werden in den Einstiegsbeispielen auch relevante Aufgaben aus vorherigen Bausteinen behandelt.
- Sie sollen die Studierenden an ihrem derzeitigen Wissensstand abholen. So sehen sie, wo ihre Probleme liegen und können während des Durcharbeitens des Bausteins diese Fragen abklären und versuchen die noch offenen Punkte der Einstiegsbeispiele zu beantworten.
- Diese Aufgaben sind oft auch als Rechentraining gedacht, damit man wieder an das händische Rechnen gewöhnt wird.

- Manche der Aufgaben in diesem Abschnitt sollen als Motivation verstanden werden um zu zeigen, welche Themen nach dem Lesen des Bausteins kein Problem mehr sein sollten.
- In den letzten Bausteinen, die abstraktere Themen behandeln, sind auch Aufgaben gegeben, welche die Studierenden gedanklich auf diesen Baustein vorbereiten sollen.

Es empfiehlt sich, diese Aufgaben bereits durchzuarbeiten, bevor man den erklärenden Text liest. Falls man bei einer Aufgabe nicht mehr weiter weiß, kann man sich beispielsweise Fragen notieren und anschließend versuchen, diese mit Hilfe des erklärenden Textes zu beantworten.

3.3.3 Erklärender Text

Hier wird auf durchschnittlich zehn Seiten versucht, die vor allem für die Quantenmechanik wichtigen Themen der Linearen Algebra zu erklären. Im Gegensatz zu den meisten gängigen Lehrbüchern wird sehr viel Wert auf praktische Beispiele und Vergleiche gelegt. Anstelle einer beweislastigen Beschreibung sollen Plausibilitätsargumente und Motivationen gebracht werden, warum angeführte Sätze und Definitionen Sinn machen. Dadurch sollen auch Studierende, die sich etwas vor Mathematik „fürchten“, ermutigt werden, sich mit den neuen Themen auseinanderzusetzen.

Oft wird zuerst eine Definition gegeben und anschließend versucht eine Vorstellung dazu zu konstruieren. Viele Themen werden exemplarisch für den \mathbb{R}^2 beziehungsweise den \mathbb{C}^2 behandelt, anstelle allgemeine Vektorräume zugrunde zu legen. Dies hat einerseits den Vorteil den mathematisch weniger erfahrenen Studierenden eine Hand zu reichen. Andererseits soll dadurch möglichst gut auf die zugehörige Vorlesung vorbereitet werden, in der zunächst vor allem der \mathbb{C}^2 wichtig ist.

Es soll auch nicht nur beispielsweise das reine Berechnen von Eigenwerten erklärt werden, sondern auch diskutiert werden, welche Bedeutung diese haben und wenn möglich veranschaulicht werden. Wenn immer es möglich ist werden Skizzen gegeben, um anschauliche Vorstellungen zu generieren.

Jenen Lesern und Leserinnen dieser Bausteine, die sich für die formalen Beweise interessieren oder auch dafür, wie man die gegebenen Themen der Linearen Algebra auf allgemeine Vektorräume beispielsweise ausweiten kann, sei ein entsprechendes Lehrbuch empfohlen. In Fußnoten werden oft Verallgemeinerungen oder Ergänzungen gegeben, die zum Weiterlesen animieren sollen. Wer allerdings ein reines „Theoretische Physik - Starterpaket“ sucht muss sich nicht weiter mit diesen Themen befassen.

3.3.4 Übungsaufgaben

Wie der Name bereits sagt, sind diese Aufgaben als Übungsaufgaben konzipiert. Sie sollen die Themen festigen, die im entsprechenden Baustein behandelt wurden. Oft sieht man erst, was man noch nicht verstanden hat, wenn man Rechenaufgaben zu diesen Themen löst oder wenn man den Inhalt konkret anwenden soll. Auch hier soll wieder die Rechenfertigkeit trainiert werden.

Manche Übungsaufgaben werden bereits im erklärenden Text zitiert. Diese enthalten meist kurze Beweise für eine Aussage oder sollen die Studierenden dazu animieren selbst über eine Fragestellung nachzudenken, bevor sie im Baustein weiterlesen. In diesen Situationen empfiehlt es sich, das Lesen zu unterbrechen und sich mit der entsprechenden Aufgabe zu befassen.

3.4 Evaluation der Materialien durch Studierende

Drei Studierende haben sich bereit erklärt die ersten sechs Bausteine zu testen und zu evaluieren. Aus Gründen der Anonymität werden die Studierenden Alice, Bob und Charly genannt.

Das Interview bestand aus sechs Fragen, die teilweise auch Unterfragen hatten.

1. **Hatten Sie Probleme mit den mathematischen Voraussetzungen in der Lehrveranstaltung „Theoretische Physik III für UF: Quantenmechanik und Teilchenphysik; Math. Grundlagen“?**

Diese Frage wurde von allen drei Studierenden mit *Ja* beantwortet.

- a. **Falls ja: Können Sie spezifische Themen nennen, die Ihnen Schwierigkeiten bereitet haben?**

Alice: *Umformen von Gleichungen, Vektor- und Matrixrechnung*

Bob: *Generell fehlten viele Grundlagen, die in der Lehrveranstaltung „Einführung in die physikalischen Rechenmethoden“ nicht behandelt werden. Das Fehlen der Lehrveranstaltungen „Analysis“ und „Lineare Algebra“ im Bachelor-Studienplan (Lehramt) bringt für das Verstehen der weiterführenden Lehrveranstaltungen in Physik jedenfalls Einschränkungen.*

Charly: *Rechnen mit Matrizen (z. B. Diagonalisieren), Eigenwerte und Eigenfunktionen, Dirac'sche Deltafunktion*

- b. **Falls ja: Haben die Bausteine dazu beigetragen diese Schwierigkeiten zu lösen?**

Alice: *Ja, sie haben definitiv dazu beigetragen, dass ich einiges besser verstanden habe.*

Bob: *Ja, auf jeden Fall!*

Charly: *Beim Rechnen mit Matrizen haben die Bausteine sehr gut geholfen, einen ersten Einblick zu bekommen (vor allem, da man im Studium zuvor noch nicht wirklich damit konfrontiert wurde). Das Diagonalisieren einer Matrix wurde mir anhand der Bausteine nicht klar, dies wurde aber im Tutorium sehr verständlich erklärt.*

2. **Fanden Sie den Aufbau der Bausteine für das eigenständige Erarbeiten der Themen zweckmäßig/ausreichend?**

Falls nein: Welche zusätzlichen Unterlagen würden Sie sich für die eigenständige Erarbeitung der Themen wünschen?

Alice: *Ich fand sie ausreichend, obwohl das tiefere Verständnis, meiner Meinung nach, erst wirklich aufkommt, wenn man einmal mit jemandem drüber geredet hat und ein Beispiel löst.*

Bob: *Ja!*

Charly: *Prinzipiell ja, jedoch eher zum Wiederholen von Themen, wie zum Beispiel Vektorrechnung oder Rechnen mit komplexen Zahlen. Für Fragen direkt zur VO T3 waren die Bausteine für mich nicht ausreichend.*

Zum Thema Eigenwerte und (vor allem) Eigenfunktionen wäre ein weiterer Baustein, denke ich auch sehr hilfreich und eventuell zu den Postulaten der Quantenmechanik.

3. **Gibt es ein oder mehrere konkrete Themen, die Sie durch das Arbeiten mit den Bausteinen besonders gut verstanden haben?**

Alice: *Vektoren (vor allem durch die optische Anschauungsmöglichkeit in den Bausteinen).*

Bob: *Matrizenrechnung, komplexe Vektoren*

Charly: *Es war auf jeden Fall hilfreich zur Wiederholung des Schulstoffes. Wenn ich mich richtig erinnere, gab es einen Baustein, wo Eigenwerte von Matrizen berechnet wurden. Jedenfalls habe ich die Eigenwertprobleme von Matrizen nach dem Tutorium verstanden und hatte keine Probleme mehr damit.*

4. **Gibt es Punkte, an denen Sie der erklärende Text verwirrt hat/Sie diesen nicht nachvollziehen konnten? Was hätte Ihnen hier geholfen?**

Alice: *Beim Baustein „Eigenwerte und Eigenvektoren“ hätte es mir geholfen, wenn alle Fälle (Eigenwert, Eigenvektor und Eigenraum) zuerst anhand einer Matrix diskutiert werden und anschließend die weiteren Matrizen besprochen. Die zusammenfassenden Kästchen waren sehr hilfreich, jedoch hätte es mir sehr geholfen, wenn die zu diesen gehörenden Rechenaufgaben gekennzeichnet*

wären.

Charly: *Nein, ich denke, dass der Text sehr gut nachvollziehbar war. Einzig aus dem Baustein zum Diagonalisieren einer Matrix wurde ich nicht schlau.*

5. **Zu welchen mathematischen Themen würden Sie sich einen weiteren Baustein wünschen?**

Alice: *Ich würde mir mehr Bezug zu den Rechnungen aus der Vorlesung und den Übungen wünschen (z.B. Formalismus).*

Charly: *Integrieren, als Wiederholung aus der Schule.*

Vielleicht wäre auch die Reihenentwicklung, Fourier Transformation und Delta-Distribution hilfreich - eben Dinge, die für die Vorlesung gebraucht werden, jedoch dessen Hintergrundwissen als Nicht-Mathe-Student im Lehramt für einige Studierende einfach nicht greifbar ist.

6. **Sonstige Anmerkungen**

Alice: *Ich fand es gut, dass von einem fachlichen Standpunkt aus versucht wurde, diese Themen für Studierende verständlich zu erklären.*

Bob: *Sehr guter Aufbau der Bausteine!*

Charly: *Generell finde ich, dass die Bausteine eine sehr gute und willkommene Ergänzung zur Vorlesung sind, jedoch das Tutorium nicht ersetzen. Gerade den Einstieg erleichtern sie ungemein und bringen die Studierenden auf ein annähernd gleiches Level, sodass im Tutorium Zeit bleibt, die komplizierteren Themen zu behandeln. Da ich selbst jede Tutoriumseinheit besucht habe und mir diese Einheiten sehr beim Verständnis geholfen haben, fände ich es sehr, sehr schade, wenn das Tutorium in Zukunft nicht mehr angeboten wird!*

3.5 Interaktive Arbeitsmaterialien

Einige Bausteine werden durch interaktive Materialien unterstützt, welche im Folgenden vorgestellt werden. Diese wurden mit Hilfe des Programms GeoGebra entwickelt. Dieses Programm wurde ausgewählt, da es bereits seit einigen Jahren in vielen österreichischen Schulen verwendet wird und daher viele Studierende bereits damit vertraut sind. Des Weiteren ist das Programm frei zugänglich.

3.5.1 Eigenwerte und Eigenvektoren finden

Das Programm ist Teil des Bausteins „Eigenwerte und Eigenvektoren. Dort werden fünf Abbildungen im \mathbb{R}^2 exemplarisch behandelt. Diese sind durch fünf entsprechende Matrizen gegeben. Alle diese Matrizen können in der Schaltfläche rechts ausgewählt werden (siehe roter Kasten in Abbildung 3.1). Als Hilfestellung kann für die Matrix

E auch die angegebene Gerade $f(x) = 2x$ angezeigt werden.

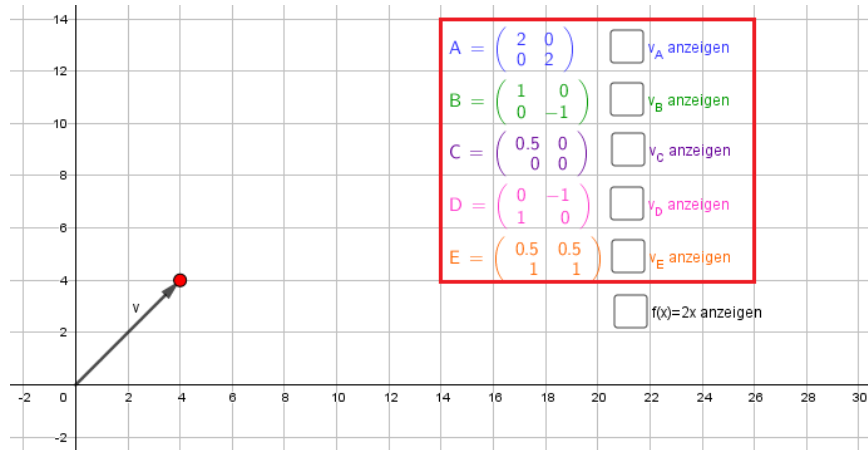


Abbildung 3.1: Auswahlsicht im Programm „Eigenwerte und Eigenvektoren“

Durch Auswählen einer Matrix wird zum Vektor v jener Vektor angezeigt, der entsteht, wenn die ausgewählte Matrix auf den Vektor v angewandt wird. Dies ist in Abbildung 3.2 für die Matrix E gezeigt. Der abgebildete Vektor trägt den Namen der zugehörigen Matrix als Index.

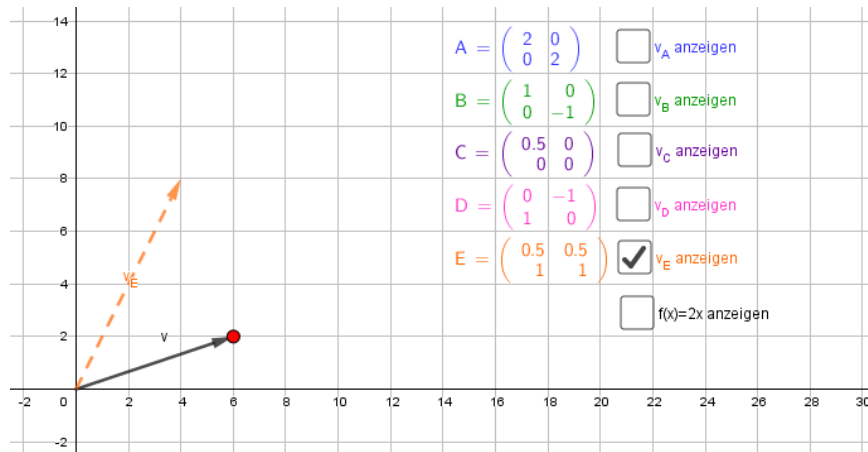


Abbildung 3.2: Hier ist zu sehen, wie der Vektor v durch die Matrix E abgebildet wird.

Aufgabe der Studierenden ist es nun durch Variation des Vektors v herauszufinden, welche Eigenwerte und Eigenvektoren die Matrizen besitzen. Um den Vektor v zu

verändern bewegt man den roten Punkt an seiner Spitze. Die Studierenden sollen Positionen von v finden an denen der abgebildete Vektor (anti-)parallel zu v ist (Eigenvektoren). Anschließend sollen sie schätzen oder messen um welchen Faktor v durch die Abbildung gestreckt oder verkürzt wird (Eigenwert). Eine passende Lösung für die Matrix E ist in Abbildung 3.3 gezeigt.

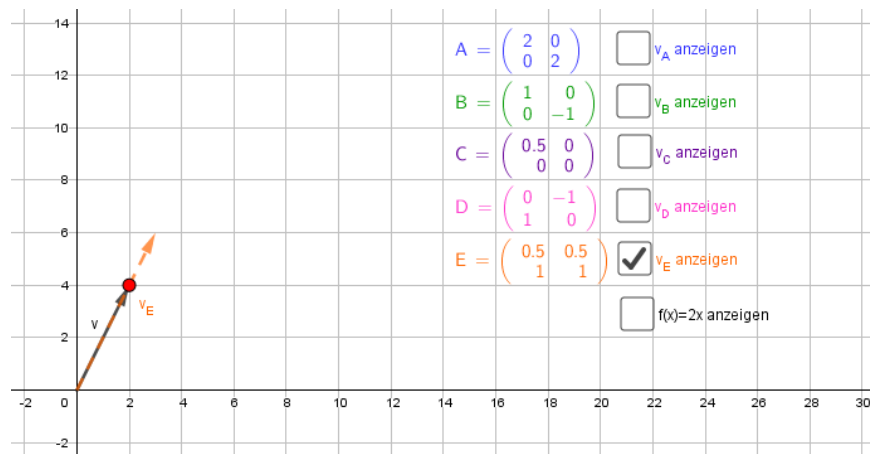


Abbildung 3.3: In dieser Graphik entspricht v einem Eigenvektor von v_E .

3.5.2 Figuren abbilden

Dieses Programm gehört ebenfalls zum Baustein „Eigenwerte“ und Eigenvektoren. Hier können die Studierenden selbst eine Abbildung in Form einer Matrix ausprobieren. Diese Matrix muss in der Form

$$\left\{ \{a_{11}, a_{12}\}, \{a_{21}, a_{22}\} \right\}$$

angegeben sein (siehe roter Kasten in Abbildung 3.4). Nachdem eine Abbildung definiert wurde, wird diese automatisch auf den Vektor v angewandt und der abgebildete Vektor v_M entsteht. Wie im zuletzt vorgestellten Programm kann der Vektor v wieder mit Hilfe des roten Punktes an seiner Spitze variiert werden.

Durch setzen des Häkchens bei „Spur ein“ kann man eine beliebige Figur (Trajektorie) einzeichnen indem man den Vektor v variiert und sieht, wie dieser durch die definierte Abbildung verändert wird.

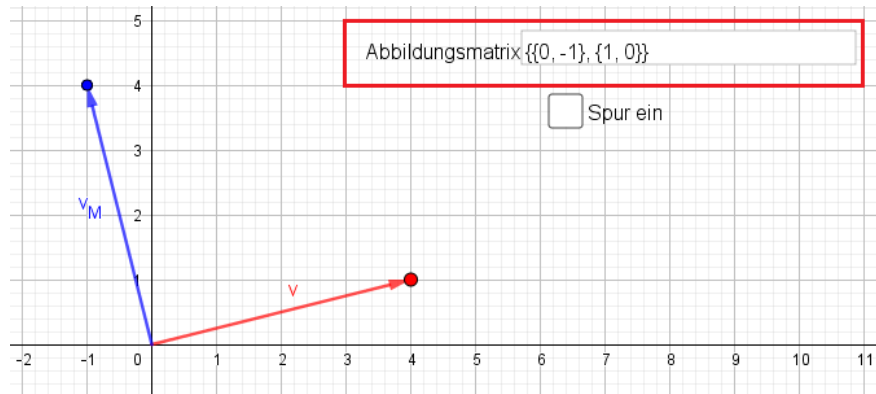


Abbildung 3.4: Die Studierenden können hier selbst Abbildungen definieren.

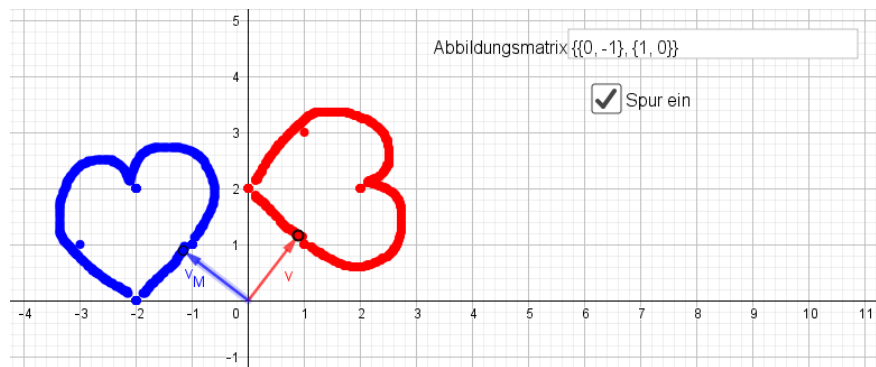
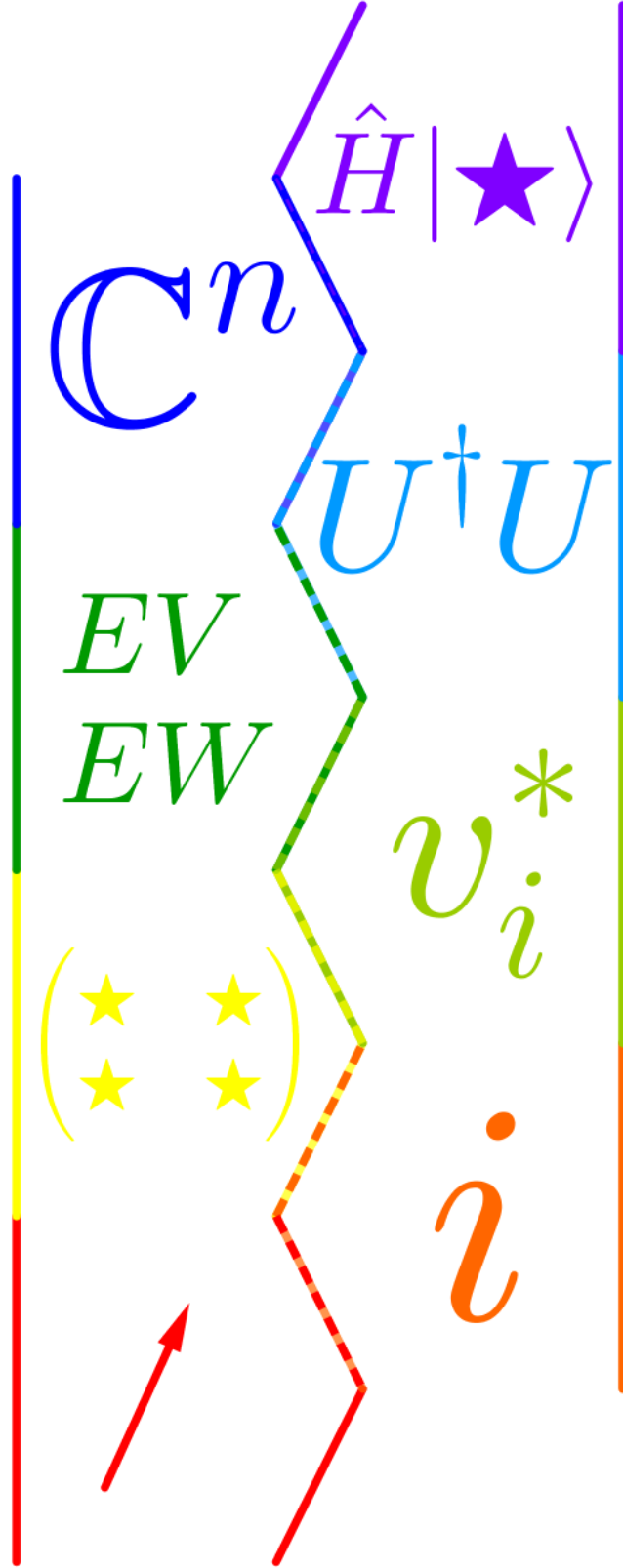


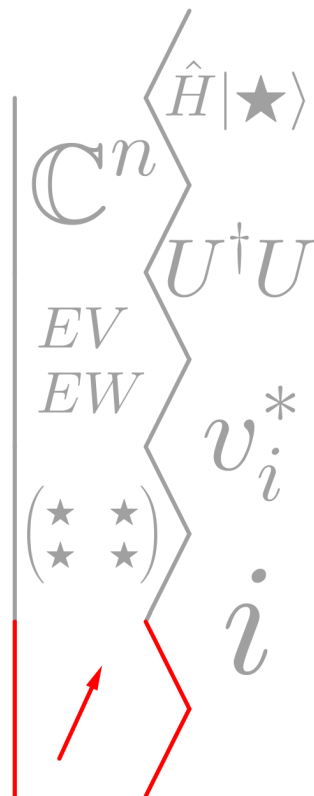
Abbildung 3.5: Durch Setzen des Häkchens „Spur ein“ kann die Spur der Vektoren v und v_M gezeichnet werden.



Anhang

Vektoren

18. März 2019



In der Physik gibt es nicht nur skalare Größen, wie beispielsweise die Masse, die allein durch ihre Größe beschrieben werden. Es gibt auch Größen, die richtungsabhängig sind und genau diesen wollen wir uns in diesem Baustein widmen. Eine für uns wichtige Größe ist beispielsweise der Impuls. Wir werden in diesem Baustein allerdings im Rahmen der klassischen Mechanik bleiben, da wir für die Quantenmechanik über den Tellerrand der reellen Zahlen blicken müssen.

Einstiegsbeispiele



- E1 Gegeben sind die beiden Vektoren $\vec{a} = \begin{pmatrix} 3 \\ 4 \end{pmatrix}$ und $\vec{b} = \begin{pmatrix} 1 \\ -7 \end{pmatrix}$. Berechnen Sie die Summe(n) und die Differenz(en) der beiden Vektoren. Für welche dieser Operationen gilt das Kommutativgesetz? Schreiben Sie die Rechengesetze für Vektoren allgemein an.
- E2 Berechnen Sie das Skalarprodukt der beiden Vektoren aus Aufgabe E1.
- E3 Berechnen Sie das Kreuzprodukt $\vec{v}_1 \times \vec{v}_2$ der Vektoren $\vec{v}_1 = \begin{pmatrix} 1 \\ 2 \\ 3 \end{pmatrix}$ und $\vec{v}_2 = \begin{pmatrix} 2 \\ 3 \\ -4 \end{pmatrix}$. Vergleichen Sie dieses mit $\vec{v}_2 \times \vec{v}_1$. Was fällt Ihnen dabei auf?
- E4 Berechnen Sie den Betrag des Vektors \vec{a} aus Aufgabe E1.
- E5 Stellen Sie einen Vektor zwischen den beiden Punkten $P(1|4)$ und $Q(-3|-2)$ auf.

1 Vektoren in zwei Dimensionen

Um uns einen ersten Eindruck zu verschaffen, wie man mit Vektoren umgeht, wollen wir uns der Einfachheit halber zuerst auf zwei Dimensionen beschränken. Das schöne daran ist, dass wir alle Rechenregeln, die wir hier kennenlernen auch auf drei oder ganz allgemein auf höhere Dimensionen ausweiten können.

Ein Vektor im Zweidimensionalen wird durch zwei reelle Zahlen beschrieben, wobei die erste den Wert der Größe in x-Richtung und die zweite den Wert der Größe in y-Richtung beschreibt. Geht man beispielsweise 3 Meter nach rechts und 2 Meter nach vorne kann man dies (bei geeigneter Wahl des Koordinatensystems) durch folgenden Vektor beschreiben:

$$\vec{v} = \begin{pmatrix} 3 \\ 2 \end{pmatrix}$$

Der Vektor \vec{v} wählt dabei allerdings den direkten Weg, wie in Abbildung 1 zu sehen.

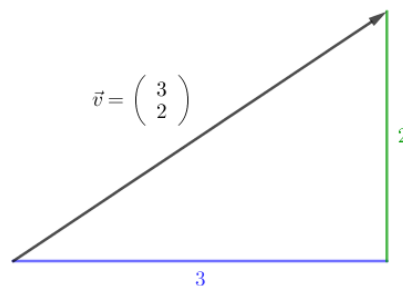


Abbildung 1: Hier ist der Vektor \vec{v} dargestellt.

Doch wie lange ist dieser Weg? Um das herauszufinden, können wir den Satz des Pythagoras anwenden. Die Länge eines Vektors ist eine sehr wichtige Eigenschaft, die uns noch oft in verschiedenen Facetten begegnen wird, wobei man nicht immer von einer Länge sprechen kann. Daher wollen wir einen allgemeineren Begriff wählen.

Der Betrag eines Vektors $\vec{v} = \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix}$ kann in kartesischen Koordinaten^a mit Hilfe des Pythagoräischen Lehrsatzes bestimmt werden



$$|\vec{v}| = v = \sqrt{x^2 + y^2}$$

^aDas Koordinatensystem, welches Sie bereits aus der Schule kennen.

Wir haben nun eine Möglichkeit gefunden zwei Vektoren miteinander zu vergleichen. Wollen wir beispielsweise die Impulse¹ zweier Teilchen vergleichen, so können wir ihre Beträge vergleichen. Ähnliches gilt auch für die Stärke einer Kraft. Wird eine Kraft mit 25 N angegeben, bedeutet dies, dass der Betrag des Kraftvektors $F = |\vec{F}| = 25 \text{ N}$ ist. Eine solche Kraft kann auch mit einem negativen Vorzeichen versehen werden. Dieses wird dazu verwendet um eine Kraft von ihrer Gegenkraft zu unterscheiden, beziehungsweise ganz allgemein ihre Richtung anzugeben.

Nun wollen wir uns ansehen, was passiert, wenn an einem Körper zwei oder mehr Kräfte angreifen. Auch diesen Fall wollen wir anhand eines Beispiels verdeutlichen, siehe dazu Abbildung 2a. Auf den Körper greifen nun die Kräfte \vec{F}_1 und \vec{F}_2 an. Um die Gesamtkraft auf diesen Körper zu bestimmen, liegt es nahe beide Kräfte zu addieren. Da die beiden Kräfte allerdings nicht in dieselbe Richtung zeigen, reicht es leider nicht aus die Beträge zu addieren. Wir werden später noch genauer an einem Beispiel sehen, warum dies nicht funktioniert (Ü1). Wie meist in der Physik sind physikalische Größen nicht ortsgebunden, darum kommt uns die Eigenschaft entgegen, dass Vektoren im Raum verschoben werden können. Zwei Vektoren können somit als ident bezeichnet werden, wenn sowohl ihre x-Koordinate als auch ihre y-Koordinate gleich sind.

Zwei Vektoren sind ident, wenn sie gleich lang, gleich gerichtet und gleich orientiert sind.



- Die Länge eines Vektors wird über seinen Betrag bestimmt.
- Die Richtung eines Vektors wird durch seine Koordinaten angegeben.
- Auch die Orientierung kann aus den Koordinaten abgelesen werden. Sie gibt an, ob ein Vektor beispielsweise nach rechts oder links zeigt. Wenn man in jeder Koordinate das Vorzeichen ändert, so ändert man auch die Orientierung des Vektors.

Kommen wir zurück zur Addition zweier Vektoren. Vektoren können addiert werden, indem man sie aneinander hängt, wie in Abbildung 2b zu sehen.

In Abbildung 2b können wir die Koordinaten des Kraftvektors \vec{F}_{ges} ablesen:

$$\vec{F}_{\text{ges}} = \begin{pmatrix} 9 \\ 4 \end{pmatrix}$$

¹Der Impuls ist richtungsabhängig und somit eine vektorielle Größe.

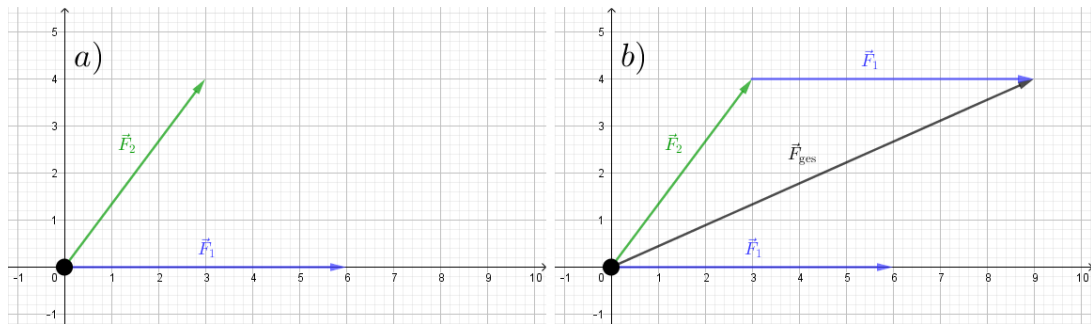


Abbildung 2: a) Zwei Kräfte greifen an einen Körper an. b) Zwei Kräfte werden durch Aneinanderhängen addiert, dabei wird der Kraftvektor \vec{F}_1 verschoben.

Man erkennt, dass sich die x-Koordinate, sowie die y-Koordinate der Gesamtkraft \vec{F}_{ges} aus den Koordinaten der beiden Kräfte \vec{F}_1 und \vec{F}_2 zusammensetzen. Wir wollen nun allgemein die Addition zweier Vektoren anschreiben.

Zwei Vektoren $\vec{v}_1 = \begin{pmatrix} x_1 \\ y_1 \end{pmatrix}$ und $\vec{v}_2 = \begin{pmatrix} x_2 \\ y_2 \end{pmatrix}$ werden folgendermaßen
 $\langle \rangle$ addiert:

$$\vec{v}_1 + \vec{v}_2 = \begin{pmatrix} x_1 \\ y_1 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} x_2 \\ y_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} x_1 + x_2 \\ y_1 + y_2 \end{pmatrix}$$

Die Subtraktion funktioniert analog:

$\langle \rangle$

$$\vec{v}_1 - \vec{v}_2 = \begin{pmatrix} x_1 \\ y_1 \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} x_2 \\ y_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} x_1 - x_2 \\ y_1 - y_2 \end{pmatrix}$$

Wir kennen nun die Addition und Subtraktion von Vektoren. Für die Multiplikation wollen wir uns erinnern, welche physikalischen Zusammenhänge mit Hilfe von Formeln beschrieben werden, die sowohl Vektoren als auch Multiplikationen enthalten. Die beiden nachstehenden sollten bereits aus der Schule bekannt sein, stehen jedoch nur exemplarisch für viele andere.

1. $\vec{p} = m \cdot \vec{v}$ (Impuls = Masse · Geschwindigkeit)
2. $W = \vec{F} \cdot \vec{s}$ (Arbeit = Kraft · Weg)

Man erkennt, dass es sich hier wohl um zwei verschiedene Arten der Multiplikation handeln muss. Im ersten Fall multiplizieren wir einen Vektor mit einer Zahl (einem

Skalar) und erhalten wiederum einen Vektor. Im zweiten Fall hingegen multiplizieren wir zwei Vektoren und erhalten einen Skalar.

Beginnen wir unsere Betrachtung mit dem ersten Fall: Je größer die Masse eines Körpers und je größer seine Geschwindigkeit, desto größer auch sein Impuls. Die Geschwindigkeit ist, ebenso wie der Impuls richtungsabhängig und beide Größen wirken in dieselbe Richtung, nämlich in Bewegungsrichtung des betrachteten Körpers. Die Masse hingegen ist von der Bewegungsrichtung unabhängig, sie darf somit auch mathematisch keine Richtung bevorzugen. Aus diesen Überlegungen heraus erscheint das folgende Rechengesetz durchaus sinnvoll.

Multipliziert man einen Vektor \vec{v} mit einer reellen Zahl c , so erhält man einen Vektor \vec{w} . Es gilt:

$$\left| \right\rangle \quad \vec{w} = c \cdot \vec{v} = c \cdot \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} c \cdot x \\ c \cdot y \end{pmatrix} \quad (1)$$

Diese Art der Multiplikation wird skalare Multiplikation genannt.

Wir wollen uns nun auch ansehen, wie man die Multiplikation eines Skalars mit einem Vektor graphisch verstehen kann. Aus Gleichung (1) sehen wir, dass jede Komponente des Vektors mit dem Skalar c multipliziert wird. Für die grafische Umsetzung betrachten wir den Vektor $\vec{v} = \begin{pmatrix} 2 \\ -1 \end{pmatrix}$. Wir wollen diesen Vektor nun mit der Zahl $c = 3$ multiplizieren.

$$3 \cdot \begin{pmatrix} 2 \\ -1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 6 \\ -3 \end{pmatrix}$$

Sowohl die x-Koordinate als auch die y-Koordinate wurden verdreifacht. In Abbildung 3 ist der Vektor \vec{v} , sowie der Vektor $3 \cdot \vec{v}$ zu sehen. Man erkennt in der Graphik auch, dass man eine Verdreifachung auch durch $\vec{v} + \vec{v} + \vec{v}$ erhalten könnte. Eine Eigenschaft, die bereits von der Multiplikation reeller Zahlen bekannt ist.

Kommen wir noch einmal zum Impuls zurück. Wir haben gesehen, dass die Multiplikation eines Vektors mit einem Skalar nur seinen Betrag, jedoch nicht seine Richtung oder Orientierung ändert. Das passt sehr gut zu unseren Anfangsüberlegungen, dass die Masse keine Richtungsänderung der Bewegung verursachen soll. Dieses Rechengesetz ist somit gut mit unserer Alltagsvorstellung verträglich.

Anmerkung 1: Bei der Multiplikation eines Vektors mit einem Skalar steht der Vektor üblicherweise auf der rechten Seite.

Anmerkung 2: Wir haben gesehen, dass es (zumindest) zwei Arten der Multiplikati-

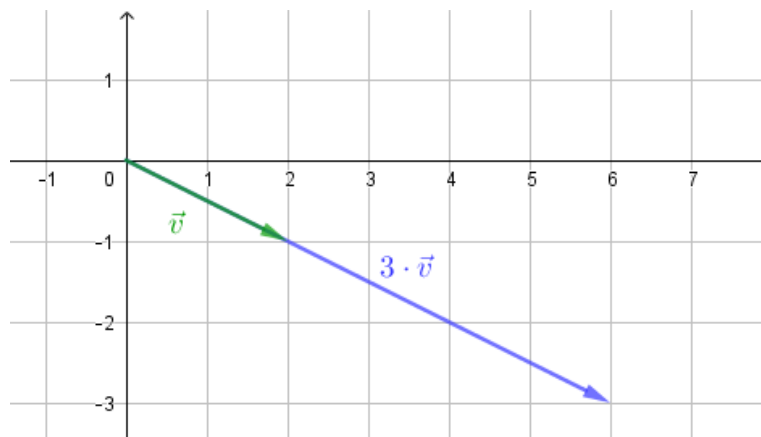


Abbildung 3: Hier ist zu sehen, dass ein Vektor, durch Multiplikation mit der Zahl 3 seine Länge verdreifacht. Die Richtung, sowie die Orientierung des Vektors bleiben unverändert.

on von Vektoren gibt. Da wir die Division meist als Umkehrung der Multiplikation verstehen, tun wir uns schwer eine Division für Vektoren zu definieren. Will man trotzdem bei bekannter Masse vom Impuls eines Körpers auf dessen Geschwindigkeit schließen, kann man den Kehrwert der Masse mit dem Impuls multiplizieren:

$$\frac{1}{m} \cdot \vec{p} = \vec{v}$$

Als Division im eigentlichen Sinne sollte man dies allerdings nicht auffassen.

Kommen wir nun zum zweiten Fall der Multiplikation. Da dieser Fall für uns sehr wichtig und auch weitreichend ist, wollen wir ihm hier ein eigenes Kapitel widmen.

2 Das Standardskalarprodukt für zweidimensionale Vektoren

In diesem Kapitel wollen wir uns der Frage annehmen, wie man zwei Vektoren miteinander multiplizieren kann. Wir haben zuvor bereits das Beispiel der Arbeit angeführt. Auch in der Quantenmechanik wird das Skalarprodukt eine wichtige Rolle bei der Berechnung von Wahrscheinlichkeiten spielen - dazu jedoch mehr in den Bausteinen „Komplexe Vektoren“ und „Hilberträume“.

Auch in diesem Fall gilt, je größer der zurückgelegte Weg und je größer die Kraft desto größer auch die verrichtete Arbeit. Wir müssen uns zuallererst überlegen, in

welchen Fällen wir überhaupt (physikalische) Arbeit verrichten und ob diese nur von der Stärke der Kraft und der Länge des Wegs abhängt. Aus dem Alltag und der Schulphysik wissen wir, dass dies nicht der Fall ist. Beispielsweise wird keine physikalische Arbeit verrichtet, wenn eine schwere Kiste innerhalb eines Stockwerks getragen wird. Trägt man sie allerdings gleich weit eine Rampe hoch, so wird Arbeit verrichtet. Wir erkennen, dass die Arbeit auch von der Richtung der Bewegung (und der Kraft) abhängt. Dazu sehen wir uns die beiden Fälle in Abbildung 4 an.

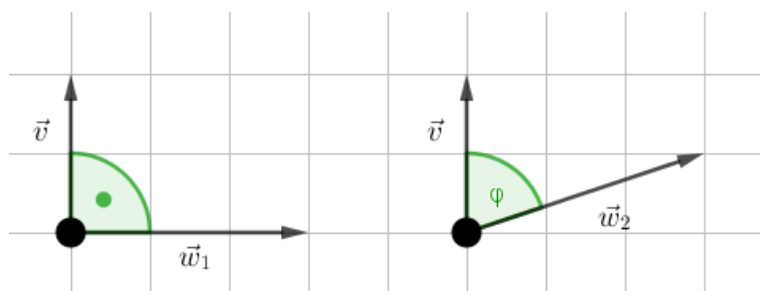


Abbildung 4: (links) Zwei Vektoren stehen im rechten Winkel zueinander. (rechts) Die beiden Vektoren schließen einen spitzen Winkel miteinander ein.

Der linke Fall in Abbildung 4 entspricht unserem Beispiel, wenn wir eine Kiste über eine gerade Fläche tragen. Den rechten Fall können wir mit unserer Überlegung vergleichen, in dem wir die Kiste eine Rampe hoch tragen. Je steiler eine solche Rampe ist, desto mehr Arbeit werden wir verrichten. Wichtig ist dabei, dass der zurückgelegte Weg immer gleich bleibt. Die meiste Arbeit werden wir daher genau dann verrichten, wenn dir die Kiste senkrecht nach oben heben. Diesen Überlegungen zufolge, würden wir sagen, dass die verrichtete Arbeit vom Winkel abhängt, den der Kraftvektor und der Wegvektor miteinander einschließen. Am größten ist sie, wenn der eingeschlossene Winkel $\varphi = 0$ beträgt und sie verschwindet, wenn er $\frac{\pi}{2}$ annimmt. Aus dem Baustein „Funktionen“ kennen wir eine Winkelfunktion, die uns genau dieses Verhalten liefert, die Kosinusfunktion.

Das Skalarprodukt zweier Vektoren \vec{v} und \vec{w} kann mit Hilfe des eingeschlossenen Winkels φ berechnet werden.

$$\vec{v} \cdot \vec{w} = |\vec{v}| \cdot |\vec{w}| \cdot \cos(\varphi)$$

Aus dieser Formel können wir auch den folgenden sehr wichtigen Zusammenhang ableiten, indem wir das Skalarprodukt eines Vektors mit sich selbst bilden. Der Winkel

zwischen einem Vektor mit sich selbst beträgt logischerweise $\varphi = 0$.

Man kann den Betrag eines Vektors mit Hilfe des Skalarprodukts berechnen.

| / >

$$\vec{v} \cdot \vec{v} = |\vec{v}| \cdot |\vec{v}| \cdot \underbrace{(\cos 0)}_{=1} = |\vec{v}|^2$$

Das Skalarprodukt eines Vektors mit sich selbst ist gleich seinem Betragsquadrat.

Da es händisch oft sehr unpraktisch ist mit Winkelfunktionen zu arbeiten, gibt es für kartesische Koordinaten auch eine weitere Möglichkeit das Skalarprodukt zu berechnen.

Das Skalarprodukt zweier Vektoren $\vec{v} = \begin{pmatrix} v_x \\ v_y \end{pmatrix}$ und $\vec{w} = \begin{pmatrix} w_x \\ w_y \end{pmatrix}$ kann

| / >

folgendermaßen berechnet werden:

$$\vec{v} \cdot \vec{w} = v_x \cdot w_x + v_y \cdot w_y$$

Anmerkung 3: Auch hier ist es nicht möglich eine sinnvolle Division zu definieren.

3 Vektoren in drei oder mehr Dimensionen

Wir wollen nun eine Dimension höher gehen. Dabei wollen wir gleich mit einer guten Nachricht beginnen. Alles was wir in den letzten beiden Kapiteln besprochen haben funktioniert für drei (und mehr) Dimensionen genauso. Beispielsweise die Addition:

$$\vec{v} + \vec{w} = \begin{pmatrix} v_x \\ v_y \\ v_z \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} w_x \\ w_y \\ w_z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} v_x + w_x \\ v_y + w_y \\ v_z + w_z \end{pmatrix}$$

Es gibt noch eine dritte „Art“, wie man Vektoren miteinander „multiplizieren“ kann, das so genannte Kreuzprodukt. Wir kennen es bereits vom Drehmoment oder der Lorentzkraft. Es werden zwei Vektoren so miteinander verbunden, dass man einen Vektor erhält. In der Mathematik wird es meist dazu verwendet um im \mathbb{R}^3 einen Vektor zu finden, der auf zwei vorgegebene Vektoren normal steht.

Das Kreuzprodukt zweier Vektoren $\vec{x} = \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix}$ und $\vec{y} = \begin{pmatrix} y_1 \\ y_2 \\ y_3 \end{pmatrix}$ ist

gegeben durch:

$\left| \begin{array}{c} / \\ \backslash \end{array} \right\rangle$

$$\vec{z} = \vec{x} \times \vec{y} = \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix} \times \begin{pmatrix} y_1 \\ y_2 \\ y_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} x_2 \cdot y_3 - x_3 \cdot y_2 \\ x_3 \cdot y_1 - x_1 \cdot y_3 \\ x_1 \cdot y_2 - x_2 \cdot y_1 \end{pmatrix}$$

Der Vektor \vec{z} steht senkrecht sowohl auf \vec{x} , als auch auf \vec{y} .

Bis jetzt haben wir Vektoren immer als Spalte angeschrieben. Das müssen wir allerdings nicht so machen. Es würde an der Mathematik nichts ändern, wenn wir anstelle dieser Spaltenvektoren, Zeilenvektoren verwenden würden. Darauf werden wir später noch einmal zu sprechen kommen und dabei sehen, dass beide wichtig für uns sind.

4 Der Vektorraum - Auch Vektoren brauchen ein Zuhause

In diesem Abschnitt beschäftigen wir uns mit reellen Vektorräumen. Das bedeutet, dass die Skalare, die wir zur Beschreibung unseres Vektorraums benötigen reelle Zahlen sind. Wie uns der Name bereits sagt, brauchen wir auch Vektoren um einen Vektorraum zu beschreiben. Im Rahmen der linearen Algebra ist der Vektorraum weitaus wichtiger als die Vektoren selbst und die Vektoren werden lediglich als seine Elemente betrachtet. Im Laufe der nächsten Bausteine werden wir noch weitere dieser Vektorräume kennenlernen.

Der Einfachheit halber beginnen wir unsere Beschreibung mit dem Vektorraum \mathbb{R}^2 - der Raum der zweidimensionalen Vektoren. In den vorherigen Kapiteln haben wir bereits darüber gesprochen welche Erwartungen wir, von der Physik kommend, an Vektoren stellen:

1. Wir wollen Vektoren addieren können. Das haben wir gebraucht um beispielsweise einen Körper zu beschreiben auf den mehrere Kräfte wirken. In Aufgabe [Ü7] haben Sie sich womöglich keine Gedanken gemacht, in welcher Reihenfolge Sie die Vektoren addieren. Das ist auch vollkommen in Ordnung. Wir wollen schließlich keine Kraft einer anderen gegenüber bevorzugen.
2. Wir wollen auch, dass die Addition kommutativ ist. Es soll egal sein, ob wir

zuerst drei Schritte nach links gehen und danach zwei Schritte nach vorne oder umgekehrt.

3. In der Physik kann es durchaus vorkommen, dass eine Größe verschwindet. Beispielsweise wenn sich ein Körper nicht bewegt, wollen wir seine Geschwindigkeit mit $\vec{v} = \vec{0} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix}$ angeben. Ein solcher Vektor wird Nullvektor genannt. Wird er zu einem anderen Vektor addiert, so ändert er diesen nicht.
4. Wenn wir uns das dritte Newtonsche Axiom² genauer ansehen, wollen wir auch, dass es zu jedem Vektor einen gleich langen und gleich gerichteten Vektor gibt, der allerdings entgegengesetzt orientiert ist. Wir haben bereits gesehen, dass ein solcher Vektor durch die Vertauschung aller Vorzeichen entsteht ($-\vec{v}$). Die beiden Vektoren addiert sollen den Nullvektor ergeben.

Diese Dinge erscheinen womöglich sehr trivial, werden uns allerdings dabei helfen die Definition des Vektorraums zu verstehen. Auch für die Skalare, die im Vektorraum mit den Vektoren zusammenleben, wollen wir einige Regeln aufstellen.

5. Wir haben gesehen, dass die Multiplikation eines Vektors mit einem Skalar μ dazu führt, dass der Vektor um den Faktor μ verlängert wird. Wenn wir den erhaltenen Vektor auch mit einem zweiten Skalar λ multiplizieren, soll es keinen Unterschied machen in welcher Reihenfolge wir das tun. Es soll egal sein, ob wir die Geschwindigkeit beispielsweise zuerst verdoppeln und anschließend verdreifachen oder ob wir sie sofort versechsfachen.
6. Die Multiplikation mit der Zahl 1 lässt einen Vektor unverändert. Wir werden noch öfter darauf stoßen, dass die Zahl 1 eine gewisse Sonderstellung eingeräumt bekommt.
7. Man soll keinen Unterschied erkennen, ob man zwei Vektoren erst addiert und danach mit einer Zahl multipliziert oder umgekehrt.
8. Stellen wir uns vor ein Körper besteht aus zwei Einzelteilen m_1 und m_2 , die man wie zwei Legosteine zusammenbauen kann und wieder von einander trennen. Für den Gesamtimpuls \vec{p} soll es unerheblich sein, ob wir die Impulse der beiden Einzelteile betrachten und anschließend addieren, oder ob wir den Impuls des Gesamtsystems betrachten.

Wir möchten Vektoren addieren und mit Skalaren multiplizieren und zusätzlich, dass diese acht Bedingungen erfüllt sind und genau diese Wünsche machen einen Vektorraum aus.

²„Jede Kraft besitzt eine Gegenkraft“.

Die Menge \mathbb{R}^2 mit zwei Verknüpfungen (Addition $+$ und skalare Multiplikation \cdot) heißt Vektorraum, wenn die folgenden acht Axiome erfüllt sind:

1. Für alle Vektoren $\vec{x}, \vec{y}, \vec{z} \in \mathbb{R}^2$ gilt $(\vec{x} + \vec{y}) + \vec{z} = \vec{x} + (\vec{y} + \vec{z})$ (Assoziativgesetz)
2. Für alle Vektoren \vec{x} und $\vec{y} \in \mathbb{R}^2$ gilt $\vec{x} + \vec{y} = \vec{y} + \vec{x}$ (Kommutativgesetz)
3. Es existiert ein Nullvektor $\vec{0} \in \mathbb{R}^2$, für den gilt $\vec{0} + \vec{x} = \vec{x}$. Das muss für alle $\vec{x} \in \mathbb{R}^2$ gelten.
4. Zu jedem $\vec{x} \in \mathbb{R}^2$ gibt es ein Element $-\vec{x} \in \mathbb{R}^2$, sodass $\vec{x} + (-\vec{x}) = \vec{0}$ gilt (inverses Element).
5. Für alle $\lambda, \mu \in \mathbb{R}$ und alle $\vec{x} \in \mathbb{R}^2$ gilt $\lambda \cdot (\mu \cdot \vec{x}) = (\lambda\mu) \cdot \vec{x}$.
6. Für alle \vec{x} gilt $1 \cdot \vec{x} = \vec{x}$ (neutrales Element).
7. Für alle $\lambda \in \mathbb{R}$ und alle $\vec{x}, \vec{y} \in \mathbb{R}^2$ gilt $\lambda \cdot (\vec{x} + \vec{y}) = \lambda \cdot \vec{x} + \lambda \cdot \vec{y}$.
8. Für alle $\lambda, \mu \in \mathbb{R}$ und alle $\vec{x} \in \mathbb{R}^2$ gilt $(\lambda + \mu) \cdot \vec{x} = \lambda \cdot \vec{x} + \mu \cdot \vec{x}$.

Auch diese Definition können wir beliebig auf höherdimensionale Räume ausweiten.

Eine wichtige Sache fehlt uns leider noch. Wir können in unserem Vektorraum noch keine Längen (und Winkel) messen. Dafür müssen wir noch ein Skalarprodukt³ hinzufügen. Ein Vektorraum wie wir ihn oben beschrieben haben mit einem Skalarprodukt heißt „Euklidischer Vektorraum“.

Am Ende dieses Bausteins wollen wir noch zwei sehr wichtige Begriffe behandeln:

1. die Basis
2. die Linearkombination

Wir haben unsere Reise durch den Baustein Vektoren damit begonnen, dass wir einen Vektor aus seiner x-Komponente und seiner y-Komponente zusammengesetzt haben. Diese Komponente wollen wir nun durch so genannte „Einheitsvektoren“ beschreiben.

³Wir verwenden das Standardskalarprodukt wie in Kapitel 2 dieses Bausteins angegeben.

Für die x-Komponente ist dies ein Vektor der Länge 1, der in Richtung der x-Achse zeigt:

$$\vec{e}_x = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad (2)$$

In unserem Beispiel mit dem wir begonnen haben, würde er aussagen: „Gehe einen Meter nach rechts.“ Analog würde der Einheitsvektor in y-Richtung

$$\vec{e}_y = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \quad (3)$$

besagen: „Gehe einen Meter nach vorne.“ Aus diesen beiden Vorschriften kann man eine Person nun in jede Richtung schicken. Links und zurück würden in diesem Fall durch negative Zahlen ausgedrückt werden. Dazu ein Beispiel:

Gehe 5 Meter nach links und 3 Meter nach vorne.

Diese Anweisung kann mit Hilfe von (2) und (3) schreiben als

$$\vec{v} = -5 \cdot \vec{e}_x + 3 \cdot \vec{e}_y = -5 \cdot \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} + 3 \cdot \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -5 \\ 3 \end{pmatrix}$$

Eine solche Zerlegung wird Linearkombination genannt. Jeder Vektor $\vec{v} \in \mathbb{R}^2$ lässt sich eindeutig als Linearkombination der Vektoren \vec{e}_x und \vec{e}_y schreiben.

Wir nennen die Menge

$\{ \}$

$$B = \left\{ \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \right\}$$

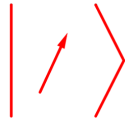
eine Basis des Vektorraums \mathbb{R}^2 , da man jeden Vektor $\vec{v} \in \mathbb{R}^2$ eindeutig als Linearkombination der Elemente aus B schreiben kann.

Um den zweidimensionalen Raum zu beschreiben brauchen wir nur zwei Basisvektoren. Für den dreidimensionalen Raum benötigen wir schon drei Vektoren (links/rechts, vor/zurück, hinauf/hinunter). Für vier Dimensionen brauchen wir vier Basisvektoren usw.

Die Menge B ist im Übrigen nicht die einzige Basis für den \mathbb{R}^2 . Man kann sich beliebige zwei Vektoren, die nicht parallel sind, aussuchen und diese als Basis verwenden. Die von uns gewählte Basis B ist eine sogenannte „Orthonormalbasis“. Das Wort „Orthonormalbasis“ setzt sich aus drei Begriffen zusammen:

- Orthogonal: Das bedeutet, dass die Vektoren der Menge B , die Basisvektoren, alle aufeinander normal stehen.
- Normiert: Alle Basisvektoren sind normiert, sie haben die Länge 1.
- Basis

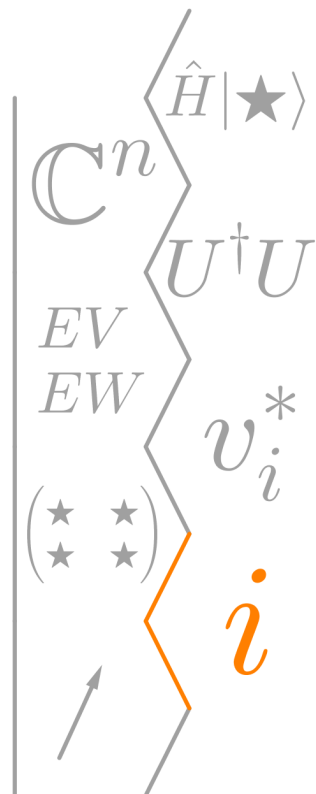
Übungsaufgaben



- Ü1 Gegeben sind die beiden Vektoren $\vec{a} = \begin{pmatrix} 3 \\ -4 \end{pmatrix}$ und $\vec{b} = -\vec{a}$.
- Berechnen Sie die Beträge der beiden Vektoren und addieren Sie diese Beträge miteinander.
 - Addieren Sie die beiden Vektoren \vec{a} und \vec{b} . Berechnen Sie den Betrag des resultierenden Vektors.
 - Vergleichen Sie die Ergebnisse von (a) und (b) miteinander.
- Ü2 (Dreiecksungleichung) Gegeben sind die beiden Vektoren $\vec{v} = \begin{pmatrix} 5 \\ 12 \end{pmatrix}$ und $\vec{w} = \begin{pmatrix} 4 \\ 3 \end{pmatrix}$.
- Berechnen Sie $|\vec{v}| + |\vec{w}|$.
 - Berechnen Sie $|\vec{v} + \vec{w}|$.
 - Welches der beiden Ergebnisse ist größer? Versuchen Sie die Aufgaben (a) und (b) graphisch zu veranschaulichen.
- Ü3 Für die Hubarbeit haben Sie in der Schule die Formel $W = m \cdot g \cdot h$ gelernt. Warum kann man hier auch ohne Berücksichtigung der Vektorrechnung (insbesondere des Skalarprodukts) auf das richtige Ergebnis kommen?
- Ü4 Überprüfen Sie, ob das Skalarprodukt für zweidimensionale Vektoren kommutativ ist. Beginnen Sie dabei anhand eines Beispiels und versuchen Sie Ihre Vermutung anschließend allgemein zu zeigen.
- Ü5 Überprüfen Sie, ob das Kreuzprodukt kommutativ ist. Beginnen Sie dabei anhand eines Beispiels und versuchen Sie Ihre Vermutung anschließend allgemein zu zeigen.
- Ü6 Addieren Sie die Vektoren $\vec{a} = \begin{pmatrix} 7 \\ -1 \end{pmatrix}$, $\vec{b} = \begin{pmatrix} -3 \\ 2 \end{pmatrix}$ und $\vec{c} = \begin{pmatrix} 1 \\ 4 \end{pmatrix}$ sowohl graphisch als auch rechnerisch miteinander.

Komplexe Zahlen

18. März 2019



Wenn wir die Welt um uns betrachten macht es im ersten Moment womöglich wenig Sinn die reellen Zahlen zu erweitern. Alle Messgrößen sind reellwertig, oft sogar nur positiv.

Wir werden allerdings bereits in der diskreten Quantenmechanik sehen, dass die komplexen Zahlen sehr weit gefächerte Anwendungen haben. Beispielsweise um zusätzlich zu linear polarisiertem Licht auch die zirkuläre Polarisation von Licht beschreiben zu können.

Einstiegsbeispiele



E1 Gegeben seien die komplexen Zahlen $a = 3 + 4i$ und $b = 1 - 7i$. Berechnen Sie:

- a. $a + b$
- b. $a - b$
- c. $a \cdot b$
- d. $\frac{a}{b}$

E2 Geben Sie die Zahl $z = 3 + 4i$ mit Hilfe der Eulerformel an.

E3 Bestimmen Sie die komplex Konjugierte, sowie den Betrag der Zahl $z = 3 + 4i$.

E4 Wie sieht die komplexe Zahl $z = \sqrt{2} \cdot e^{i \cdot \frac{\pi}{4}}$ in algebraischer Form aus?

1 Von der quadratischen Gleichung zu den komplexen Zahlen

Bereits in der Schule lernt man das Lösen quadratischer Gleichungen und wie dieses mit den Nullstellen einer quadratischen Funktion zusammenhängen.

Wir betrachten dafür die Funktion $f(x) = x^2 + c$, wobei $c \in \mathbb{R}$. Konkret wollen wir uns ansehen, wo die Nullstellen dieser Funktion liegen. Dafür werden wir exemplarisch einen Blick auf die Funktionsgleichungen für $c = -1$, $c = 0$ und $c = 1$ werfen. In Abbildung 1 sind die zugehörigen Funktionsgraphen zu sehen.

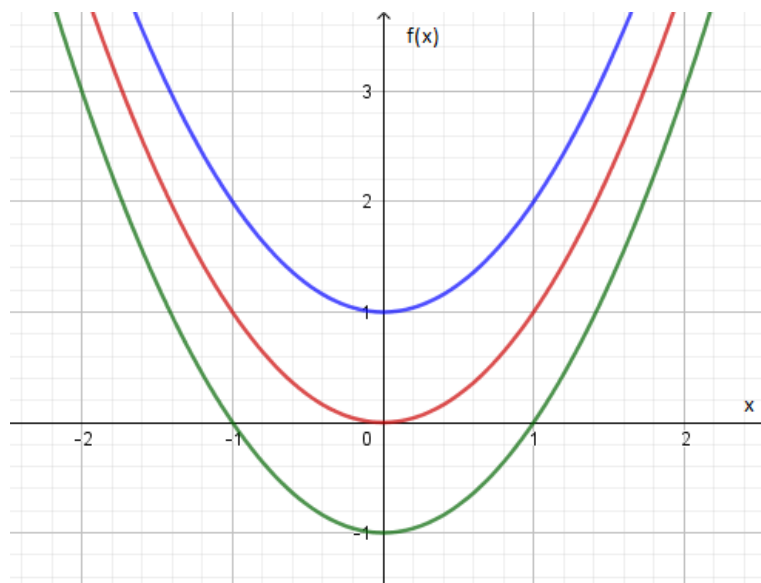


Abbildung 1: Hier sind die Funktionsgraphen der Funktionen $f(x) = x^2 + c$ für $c = -1$ (grün), $c = 0$ (rot) und $c = 1$ (blau) zu sehen.

Man erkennt deutlich, dass man die Anzahl der Nullstellen an der x-Achse in drei Fälle unterteilen kann. Nämlich

- **Zwei Nullstellen:** Ist $c < 0$, so liegt der Funktionsgraph auf jeden Fall zum Teil unterhalb der horizontalen Achse. Er schneidet diese zwei Mal.
- **Eine Nullstelle:** Ist $c = 0$, so liegt der Scheitelpunkt genau auf der horizontalen Achse. Der Funktionsgraph hat somit genau einen Schnittpunkt mit dieser Achse.
- **Keine Nullstelle:** Ist $c > 0$, so liegt der gesamte Funktionsgraph oberhalb der horizontalen Achse. Er schneidet sie nie und hat somit keine Nullstellen.

Im nächsten Schritt wollen wir uns ansehen, wie man diese Nullstellen rechnerisch bestimmen kann. Wir bleiben bei unserem Beispiel von oben und beginnen mit dem Fall $c = -1$. Um die Nullstelle zu berechnen setzen wir die Funktion gleich Null:

$$x^2 - 1 = 0$$

Durch Umformen dieser Gleichung erhält man $x = \pm 1$.

Dieses Ergebnis stimmt mit den Nullstellen, die man in Abbildung 1 ablesen kann überein.

Nun wollen wir den zweiten Fall betrachten, nämlich $c = 0$. Um die Nullstelle zu berechnen müssen wir die Funktion auch hier Null setzen und erhalten:

$$x^2 = 0$$

Wir wissen, dass nur $x = 0$ diese Gleichung erfüllt. Auch dies stimmt mit den abgelesenen Nullstellen aus Abbildung 1 überein.

Jetzt fehlt noch der letzte Fall und dieser ist mit Abstand der interessanteste. Versuchen wir die Nullstelle unserer Funktion für $c = 1$ zu berechnen.

$$x^2 + 1 = 0$$

Als erstes formen wir diese Gleichung folgendermaßen um:

$$x^2 = -1$$

Wir wollen uns die Frage stellen, ob es eine Zahl gibt, deren Quadrat -1 ergibt. Mit anderen Worten gesagt, wollen wir die Wurzel der negativen Zahl -1 ziehen. Jedoch kennen wir aus dem Bereich der reellen Zahlen keine solche Zahl, die das erfüllt. Auch aus Abbildung 1 ist keine Nullstelle ersichtlich. Mathematisch gesehen spricht allerdings nichts dagegen eine solche Zahl zu definieren und genau das wollen wir nun auch tun¹.

Wir definieren die imaginäre Einheit i , sodass gilt:

$$i^2 = -1$$

$\langle i \mid$

Die komplexen Lösungen der Gleichung $x^2 = -1$ sind somit $x = \pm i$. Es ist leicht zu sehen, dass auch $(-i)^2 = -1$ ergibt. Zuvor wollen wir uns ganz allgemein ansehen, wie man mit diesen „neuen“ Zahlen rechnen kann.

¹Man kann einige Argumente finden, warum man beispielsweise nicht durch 0 dividieren darf. Ein solches Argument findet man allerdings für die Wurzeln negativer Zahlen nicht. Daher kann man versuchen dieses Problem zu lösen.

2 Rechenregeln für komplexe Zahlen

Bevor wir beginnen mit komplexen Zahlen zu rechnen, sehen wir uns an, wie diese ganz allgemein aussehen können. Dazu werden wir nun zwei weitere quadratische Gleichungen lösen.

1. $x^2 + 4 = 0$

2. $x^2 - 2x + 5 = 0$

Wir beginnen mit der ersten Gleichung. Um diese Gleichung zu lösen, formen wir sie zuerst einmal um:

$$x^2 = -4$$

Wir suchen eine Zahl deren Quadrat -4 ergibt. Dabei hilft es uns, wenn wir die Zahl -4 als Multiplikation $4 \cdot (-1)$ schreiben. Durch partielles Wurzelziehen² erhält man $\pm 2 \cdot i$. Wir sehen somit, dass man die imaginäre Einheit mit einer reellen Zahl multiplizieren kann.

Widmen wir uns nun der zweiten Gleichung. Um diese zu lösen, hilft es uns in die Lösungsformel der quadratischen Gleichung³ einzusetzen

$$x_{1,2} = -\frac{-2}{2} \pm \sqrt{\frac{(-2)^2}{4} - 5} = 1 \pm \sqrt{-4} = 1 \pm 2i$$

Aus diesem Ergebnis sehen wir, dass es auch sein kann, dass im Allgemeinen eine komplexe Zahl auch einen reellen Teil haben kann.

Eine komplexe Zahl z besteht aus einem Realteil a und einem Imaginärteil b . Dabei gilt $a, b \in \mathbb{R}$

$\langle i \mid$

$$z = a + ib$$

Wir haben gesehen, dass wir eine komplexe Zahl mit Hilfe zweier reeller Zahlen beschreiben können. Man kann somit auch sagen, dass die komplexen Zahlen \mathbb{C} dem Raum der zweidimensionalen Vektoren \mathbb{R}^2 entsprechen. Dazu später mehr.

Die Rechengesetze für komplexe Zahlen sind denkbar einfach definiert. Beginnen wir

² $\sqrt{a \cdot b} = \sqrt{a} \cdot \sqrt{b}$

³Eine quadratische Gleichung $x^2 + px + q = 0$ kann durch die folgende Lösungsformel gelöst werden:

$$x_{1,2} = -\frac{p}{2} \pm \sqrt{\frac{p^2}{4} - q}$$

mit der Addition und Subtraktion. Dabei gilt, dass man die Realteile addiert/subtrahiert, sowie die Imaginärteile:

Addition und Subtraktion zweier komplexer Zahlen:

$$\begin{aligned}(a_1 + b_1i) + (a_2 + b_2i) &= (a_1 + a_2) + (b_1 + b_2)i \\ (a_1 + b_1i) - (a_2 + b_2i) &= (a_1 - a_2) + (b_1 - b_2)i\end{aligned}$$

⟨ i |

Für die Multiplikation verwenden wir dieselben Rechenregeln, die auch für das Ausmultiplizieren von Klammern gelten, müssen dabei allerdings berücksichtigen, dass $i^2 = -1$ gilt:

$$(a_1 + b_1i) \cdot (a_2 + b_2i) = a_1a_2 + a_1b_2i + a_2b_1i + b_1b_2i^2$$

Nun fassen wir die Realteile, sowie die Imaginärteile zusammen und erhalten:

Multiplikation zweier komplexer Zahlen:

$$(a_1 + b_1i) \cdot (a_2 + b_2i) = (a_1a_2 - b_1b_2) + (a_1b_2 + a_2b_1)i$$

⟨ i |

Die Division fehlt noch.

$$\frac{a_1 + b_1i}{a_2 + b_2i} = ? \quad (1)$$

Dazu werden wir einen Trick verwenden. Wichtig ist, dass der Nenner im Endeffekt reell wird, er die imaginäre Einheit also nicht mehr enthält. Für diesen Trick werfen wir einen Blick auf die dritte Binomische Formel für reelle Zahlen x und y :

$$(x + y) \cdot (x - y) = x^2 + xy - xy - y^2 = x^2 - y^2$$

Wir sehen, dass die gemischten Terme wegfallen. Durch Vergleich mit der Multiplikation sehen wir, dass diese gemischten Terme genau jene waren, die den Imaginärteil ergeben. Versuchen wir nun dieses Wissen auf die Multiplikation von komplexen Zahlen anzuwenden:

$$(a + bi) \cdot (a - bi) = a^2 + abi - abi - b^2i^2 = a^2 + b^2 \quad (2)$$

Da $a, b \in \mathbb{R}$ gilt, erhalten wir aus der Multiplikation dieser beiden komplexen Zahlen ein reelles Ergebnis und genau diese Eigenschaft hilft uns für das Auflösen einer

Division. Wir erweitern den Bruch aus (1) nun folgendermaßen:

$$\frac{a_1 + b_1 i}{a_2 + b_2 i} = \frac{(a_1 + b_1 i) \cdot (a_2 - b_2 i)}{(a_2 + b_2 i) \cdot (a_2 - b_2 i)}$$

Wenn man sowohl den Zähler als auch den Nenner ausmultipliziert erhält man:

$$\frac{a_1 + b_1 i}{a_2 + b_2 i} = \frac{a_1 a_2 + b_1 b_2}{a^2 + b^2} + \frac{a_1 b_2 + a_2 b_1}{a^2 + b^2} i$$

Im Teil *Übungsbeispiele* werden die Rechenregeln anhand von Beispielen veranschaulicht.

Die Zahl $(a - bi)$, die wir zum Lösen der Division verwendet haben, wird uns noch öfter begegnen und daher wollen wir ihr einen Namen geben.

Zu einer komplexen Zahl $z = a + bi$ nennen wir die Zahl $z^* = a - bi$ die ⟨ i | komplex konjugierte Zahl.

3 Geometrische Interpretation und was man daraus lernen kann

Wir haben bereits gesehen, dass wir die komplexen Zahlen \mathbb{C} mit den zweidimensionalen Vektoren des \mathbb{R}^2 vergleichen können. Eine komplexe Zahl kann als Punkt in der Ebene aufgefasst werden, wobei der Realteil die x-Koordinate und der Imaginärteil die y-Koordinate angibt (siehe Abbildung 2).

Wenn wir zurückdenken welche Eigenschaften wir den Vektoren zugeordnet haben, können wir uns überlegen, ob manche auch auf die komplexen Zahlen übertragen werden können. Wir wollen hier den Betrag anführen. Dieser wurde bei den Vektoren über den Satz des Pythagoras eingeführt. Zur Erinnerung: Ein Vektor $\vec{v} = (x \ y)^T$ hat den Betrag $|\vec{v}| = \sqrt{x^2 + y^2}$. Dieser Betrag beschreibt genau die Länge des Vektors.

Da eine komplexe Zahl einem Punkt in der Ebene entspricht, werden wir den Betrag, wie auch bei den reellen Zahlen, als Abstand vom Ursprung definieren. Aus Abbildung 2 sehen wir, dass dieser Abstand genau der Länge des Vektors entspricht, der zu diesem Punkt zeigt.

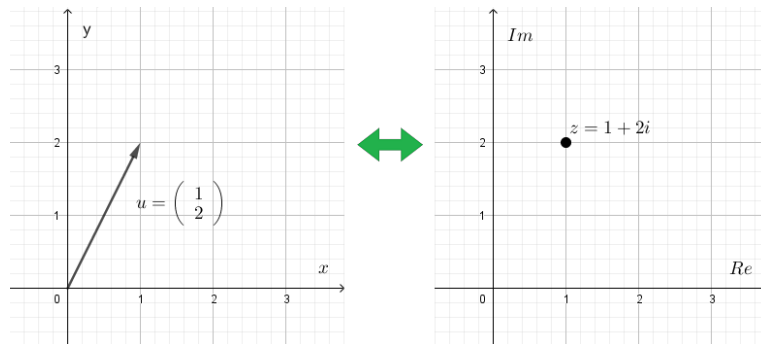


Abbildung 2: Hier sieht man wie eine Vektor (links) und eine komplexe Zahl (rechts) in der zweidimensionalen Ebene dargestellt werden können.

Der Betrag einer komplexen Zahl $z = a + bi$ kann folgendermaßen berechnet werden:

$$|z| = \sqrt{a^2 + b^2}$$

$\langle i |$

Durch Vergleich mit Gleichung (2) sehen wir, dass auch der folgende Zusammenhang gilt, der uns auch bei der Bra-Ket-Notation wieder begegnen wird:

Der Betrag einer komplexen Zahl kann auch mit Hilfe der komplex konjugierten berechnet werden.

$$z^* z = a^2 + b^2 = |z|^2$$

$\langle i |$

4 Eine andere Art der Darstellung, sowie ihre Vor- und Nachteile

Im Baustein „Koordinatensysteme und -transformationen“ haben wir die Polardarstellung von Vektoren bereits kennengelernt. Auch eine komplexe Zahl können wir in einer solchen Darstellung angeben. Wir werden sehen, dass wir in der Quantenmechanik oft komplexe Zahlen brauchen, deren Betrag $|z| = 1$ ist. Diese Eigenschaft können wir mithilfe der sogenannten Polardarstellung sehr leicht fordern.

Ein Vektor $\vec{v} = (x \ y)^T$ wird in Polarkoordinaten durch seinen Betrag und den Winkel, den er mit der positiven x-Achse einschließt beschrieben. Genau so werden wir auch die Polardarstellung der komplexen Zahl $z = a + bi$ angeben.

Eine komplexe Zahl $z = a + bi$ kann in Polardarstellung durch ihren Betrag $|z| \in \mathbb{R}^+$ und $\varphi \in [0; 2\pi)$ angegeben werden, wobei $\varphi = \arg(z)$ durch die sogenannte Argumentfunktion^a gegeben ist.

$\langle i |$

^aDieser Winkel kann allerdings am leichtesten anhand von geometrischen Überlegungen am Einheitskreis ermittelt werden - vergleiche Abbildung 3.

Mit Hilfe der Polardarstellung einer komplexen Zahl kann man auch eine Verbindung zwischen den trigonometrischen Funktionen \sin und \cos und der komplexen Exponentialfunktion herstellen. Dieser Zusammenhang wird nach seinem Entdecker Leonhard Euler auch Eulerformel genannt und kann über eine Taylorreihenentwicklung für $e^{i\varphi}$ begründet werden.

$$e^{i\varphi} = \cos(\varphi) + i \sin(\varphi)$$

(3) $\langle i |$

Um zu verdeutlichen was dieser Zusammenhang über komplexe Zahlen aussagt, wollen wir uns die komplexen Zahlen ansehen, die auf dem Einheitskreis⁴ liegen.

In Abbildung 3 ist eine dieser komplexen Zahlen dargestellt. Man erkennt, dass ihr Realteil dem Kosinus des Winkels φ entspricht und ihr Imaginärteil dem Sinus des Winkels φ . Dies entspricht genau der rechten Seite von Gleichung 3.

Mit Hilfe dieser Darstellung ist es nun sehr schnell möglich eine komplexe Zahl zu finden, deren Betrag 1 ist. Jede Zahl, die am Einheitskreis liegt erfüllt diese Bedingung. Aus Gleichung (3) erkennen wir, dass wir einen solche Zahl als $e^{i\varphi}$ schreiben können.

Man kann jede komplexe Zahl in nachstehender Form angeben:

$$z = |z| \cdot e^{i\varphi}$$

$\langle i |$

Bei dieser Schreibweise ist allerdings Vorsicht geboten, denn sie ist nicht eindeutig. Die algebraische Form einer komplexen Zahl basiert auf kartesischen Koordinaten. Durch unsere Erfahrung wissen wir, dass es zu jedem Punkt nur genau eine Möglichkeit gibt ihn anzugeben, nämlich über seine x - und seine y -Koordinate.

⁴Unter einem Einheitskreis versteht man einen Kreis mit Radius $r = 1$, dessen Mittelpunkt im Ursprung liegt.

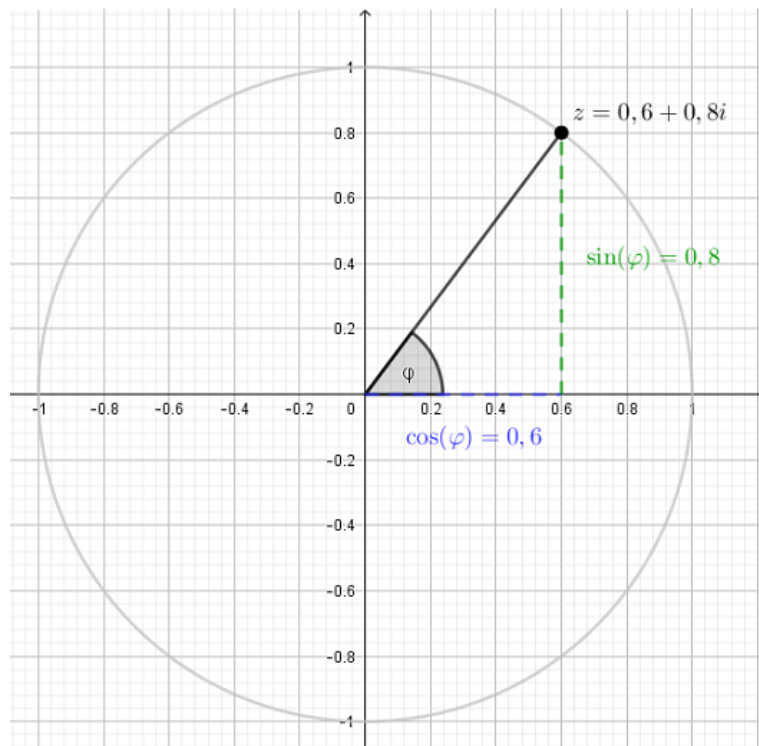


Abbildung 3: Hier wurde die komplexe Zahl $z = 0,6 + 0,8i$ auf dem Einheitskreis dargestellt.

Hingegen wird eine komplexe Zahl in Polarkoordinaten durch ihren Betrag und den Winkel mit der positiven x-Achse beschrieben. Da für jeden Winkel $\varphi = \varphi + 2\pi n$ gilt, gilt auch für eine komplexe Zahl $z = |z| \cdot e^{i\varphi} = |z| \cdot e^{i(\varphi+2\pi n)}$ mit $n \in \mathbb{Z}$. Wenn wir den Winkel φ nicht auf das Intervall $[0; 2\pi)$ einschränken, ist die Polardarstellung nicht eindeutig.

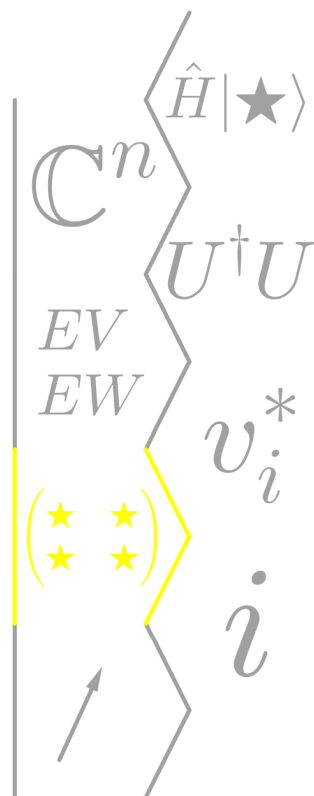
Übungsaufgaben



- Ü1 a. Wie viele reelle Zahlen gibt es, deren Betrag 1 ist?
b. Wie viele komplexe Zahlen gibt es, deren Betrag 1 ist?
c. Was ist die geometrische Bedeutung des Betrags?
- Ü2 Finden Sie zumindest eine Lösung für die Gleichung $e^x = -1$ und begründen Sie Ihre Überlegung. Gibt es weitere Lösungen und wie könnten diese aussehen?
- Ü3 Wie sieht die komplexe Zahl $z = \sqrt{2} \cdot e^{i \cdot \frac{\pi}{4}}$ in algebraischer Form aus? Ist die von Ihnen angegebene Lösung die einzig mögliche? Falls nein, welche gibt es noch?
- Ü4 Schreiben Sie die komplexe Zahl $z = 4 + 3i$ in Polarkoordinaten an. Ist die von Ihnen angegebene Lösung die einzig mögliche? Falls nein, welche gibt es noch?
- Ü5 Was passiert, wenn man eine komplexe Zahl zwei mal komplex konjugiert?

Matrizen

18. März 2019



Matrizen werden in der Mathematik und der Physik oft dazu verwendet Abbildung, wie beispielsweise Drehungen oder Spiegelungen zu beschreiben. In der Quantenmechanik werden Sie Matrizen benötigen um Operatoren darstellen zu können.

Einstiegsbeispiele



E1 Addieren Sie die Matrizen $A = \begin{pmatrix} 1 & -1 \\ 0 & 2 \end{pmatrix}$ und $B = \begin{pmatrix} 0 & 4 \\ -5 & 1 \end{pmatrix}$ miteinander.

E2 Überprüfen Sie anhand der Matrizen aus Aufgabe E1 ob die Matrixmultiplikation im Allgemeinen kommutativ ist.

E3 Spiegeln Sie den Vektor $\begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix}$ um die x-Achse.

E4 Drehen Sie den Vektor $\begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}$ um $\frac{\pi}{2}$ gegen den Uhrzeigersinn.

1 Abbildungen im \mathbb{R}^2

Zum Einstieg, wollen wir mit einem Beispiel beginnen um zu sehen, wie die mathematische Beschreibung einer Abbildung funktioniert. Dazu beginnen wir mit unserer Standardbasis im \mathbb{R}^2

$$B = \{\vec{e}_1, \vec{e}_2\} = \left\{ \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \right\}.$$

Wir wollen die beiden Vektoren dieser Basis nun um einen Winkel α gegen den Uhrzeigersinn drehen (man könnte auch sagen wir drehen die gesamte Basis). Zur Veranschaulichung dient Abbildung 1.

Wir sehen, dass unsere Basis aus insgesamt vier reellen Zahlen besteht (zwei je Vektor). Klarerweise brauchen wir auch für die Beschreibung der beiden neuen Vektoren vier Zahlen. Wir wollen uns nun die Koordinaten der neuen Vektoren überlegen. Be-

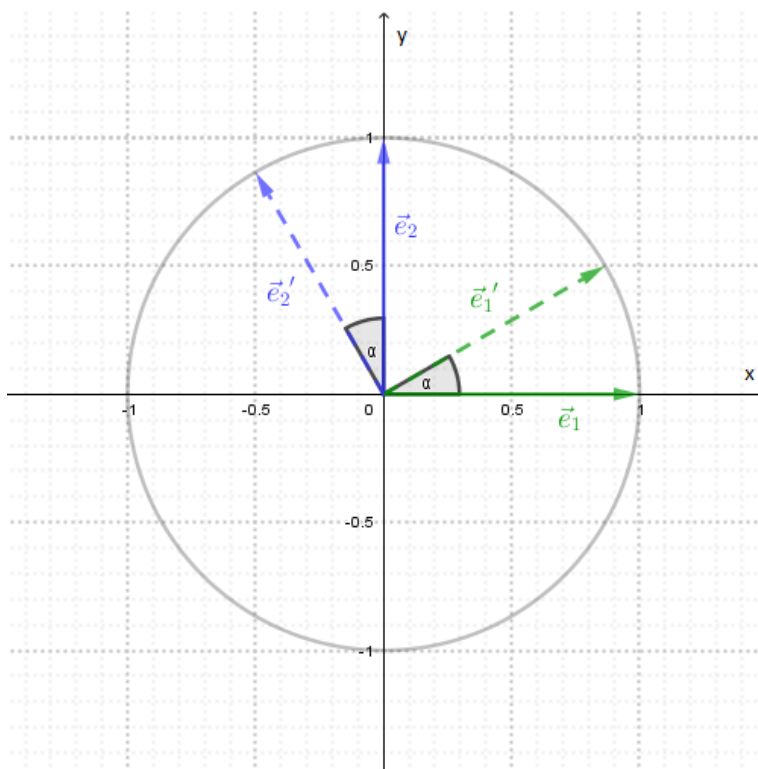


Abbildung 1: In dieser Abbildung sind die beiden Basisvektoren (durchgezogen) und die um α gedrehten Basisvektoren (strichliert) gezeichnet.

ginnen wir mit dem um α gedrehten Vektors \vec{e}_1 - nennen wir ihn \vec{e}_1' . Aus Kenntnis

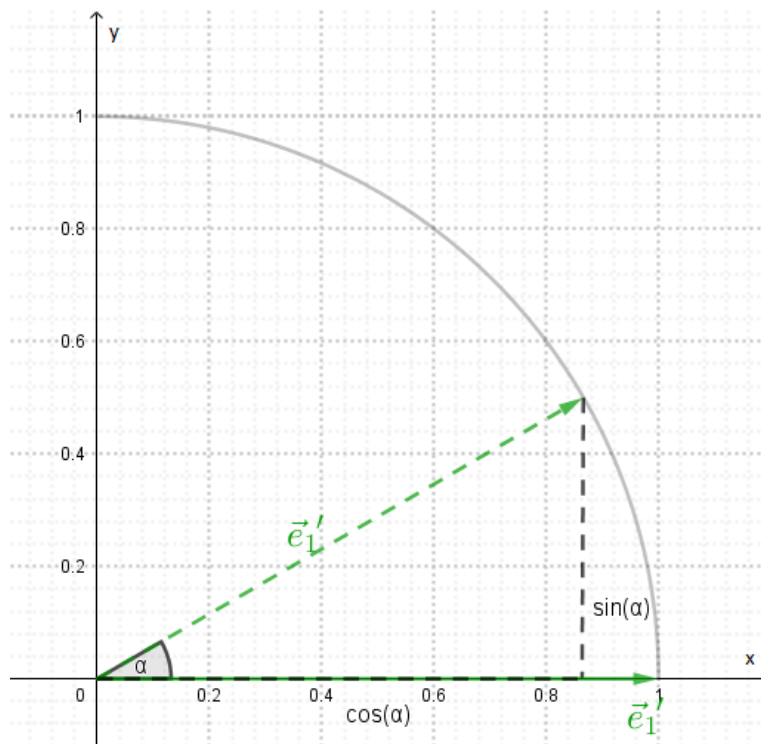


Abbildung 2: Die Koordinaten des um α gedrehten Basisvektors \vec{e}'_1 können aus der Kenntnis des Einheitskreises gewonnen werden.

des Einheitskreises und Abbildung 2 sehen wir, dass sich nachstehender Vektor ergibt:

$$\vec{e}_1' = \begin{pmatrix} \cos \alpha \\ \sin \alpha \end{pmatrix}$$

Um die Koordinaten des Vektors \vec{e}_2' zu bestimmen ist etwas mehr Arbeit nötig, da der Winkel α mit der senkrechten Achse eingeschlossen wird und somit nicht direkt aus dem Einheitskreis folgt.

Betrachtet man Abbildung 1 sieht man, dass die beiden Vektoren \vec{e}_1' und \vec{e}_2' aufeinander normal stehen¹. Aus der Schule wissen wir, wie man im \mathbb{R}^2 einen Normalvektor bilden kann². Die Vorschrift lautet: „Vertausche die beiden Koordinaten und ändere ein Vorzeichen.“ Wir brauchen uns daher nur noch zu überlegen, welches Vorzeichen wir ändern müssen um das gewünschte Ergebnis zu erhalten. Die y-Koordinate beider Vektoren liegt im positiven Bereich des Koordinatensystems. Daher müssen sie auch beide ein positives Vorzeichen besitzen. Die x-Koordinate des Vektors \vec{e}_2' ist allerdings negativ. Wir bekommen somit folgendes Ergebnis für den Vektor \vec{e}_2' :

$$\vec{e}_2' = \begin{pmatrix} -\sin \alpha \\ \cos \alpha \end{pmatrix}$$

Diese vier Zahlen, die wir benötigen um unsere neuen Vektoren zu beschreiben wollen wir nun in einem bestimmten Schema aufschreiben, dass wir **Matrix** nennen. Diese Matrix soll vom Format 2×2 sein. Das bedeutet, dass sie zwei Zeilen und zwei Spalten haben soll.

$$R = \begin{pmatrix} \color{red}{\star} & \color{blue}{\star} \\ \color{green}{\star} & \color{purple}{\star} \end{pmatrix}$$

Jeder dieser Sterne steht nun für eine Zahl. Wir werden dabei die folgende Konvention befolgen. Später werden wir sehen, dass diese Wahl sehr gut mit der Matrixmultiplikation verträglich ist.

Die erste Spalte der Matrix entspricht dem Vektor \vec{e}_1' und die zweite Spalte dem Vektor \vec{e}_2' .

$$R_\alpha = \begin{pmatrix} \cos \alpha & -\sin \alpha \\ \sin \alpha & \cos \alpha \end{pmatrix} \quad (1)$$

Mit Hilfe dieser Matrix können wir nun jede Drehung in der Ebene beschreiben. Das Einzige, das wir verwendet haben, war die Kenntnis darüber, wie wir unsere Basisvektoren abbilden. Auch andere Abbildungen können wir auf diese Weise beschreiben (Übungsaufgaben Ü1 und Ü2).

¹Wir haben zwei Vektoren, die normal zueinander stehen um denselben Winkel gedreht.

²Zu einem zweidimensionalen Vektor gibt es lediglich zwei Normalvektoren. Im \mathbb{R}^3 gibt es zu einem Vektor unendlich viele Vektoren, die normal auf ihn stehen.

2 Auf das Format kommt es an

Wir haben gesehen, dass wir für eine Abbildung im \mathbb{R}^2 eine Matrix im Format 2×2 benötigen. Um beispielsweise eine Rotation in drei Dimensionen zu beschreiben benötigen wir eine Matrix vom Format 3×3 . Man kann dies natürlich wieder auf beliebige Dimensionen ausweiten. Eine Matrix, die eine Abbildung beschreibt, die beispielsweise einer Drehung oder Spiegelung entspricht, ist stets quadratisch.

Es gibt allerdings auch nicht quadratische Matrizen. Will man eine Projektion vom dreidimensionalen in den zweidimensionalen Raum beschreiben, so benötigt man eine Matrix im Format 2×3 . Sie hat zwei Zeilen und drei Spalten. Generell gilt für die Angabe des Formats $Z \times S$, wobei Z die Anzahl der Zeilen und S die Anzahl der Spalten angibt.

Auch Vektoren kann man wie eine Matrix anschreiben. Sie bestehen aus einer Spalte und n Zeilen - haben daher das Format $n \times 1$. Einen solchen Vektor, wie wir ihn bis jetzt immer hatten, nennen wir daher **Spaltenvektor**.

3 Rechengesetze für Matrizen

In diesem Kapitel wollen wir uns ansehen, wie man mit Matrizen rechnen kann. Die wohl wichtigste Operation wird dabei die Multiplikation sein. Sie ist womöglich auch die schwierigste, jedoch werden wir bald verstehen, warum sie auf diese Weise Sinn ergibt.

Um etwas Gespür für die Matrixrechnung zu bekommen wollen wir mit der Addition und Subtraktion beginnen. Diese sind ganz analog zu den entsprechenden Operationen bei den Vektoren definiert. Man addiert jedes Element der ersten Matrix zum entsprechenden Element der zweiten Matrix. Als Beispiel dient hier wieder die Addition der 2×2 Matrizen.

Die beiden Matrizen $A = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \end{pmatrix}$ und $B = \begin{pmatrix} b_{11} & b_{12} \\ b_{21} & b_{22} \end{pmatrix}$ werden wie folgt addiert:

$$\left\langle \begin{matrix} * & * \\ * & * \end{matrix} \right\rangle \quad A + B = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} b_{11} & b_{12} \\ b_{21} & b_{22} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a_{11}+b_{11} & a_{12}+b_{12} \\ a_{21}+b_{21} & a_{22}+b_{22} \end{pmatrix}$$

Die Subtraktion funktioniert analog:

$$A - B = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} b_{11} & b_{12} \\ b_{21} & b_{22} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a_{11}-b_{11} & a_{12}-b_{12} \\ a_{21}-b_{21} & a_{22}-b_{22} \end{pmatrix}$$

Die Schreibweise, die wir hier verwendet haben ist typisch für die Matrixrechnung. Matrizen werden mit Großbuchstaben bezeichnet und ihre Elemente mit entsprechenden Kleinbuchstaben. Die Indizes geben die Zeilen- und Spaltennummern an. Das Element a_{12} ist in der Matrix A das Element der ersten Zeile und zweiten Spalte. Man darf Matrizen nur dann addieren/subtrahieren, wenn sie dasselbe Format aufweisen.

Kommen wir nun zur Multiplikation. Zu Beginn wollen wir eine 2×2 -Matrix mit einem Spaltenvektor multiplizieren. Für die Matrixmultiplikation multipliziert man jeweils die Zeilen der Matrix mit der Spalte des Vektors.

$$A\vec{v} = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a_{11}x + a_{12}y \\ a_{21}x + a_{22}y \end{pmatrix}$$

Das Produkt, das wir durch diese Multiplikation erhalten, ist ein Spaltenvektor. Wir kommen damit einer Forderung, die wir gerne für Abbildungen hätten näher. Wir wollen nun unsere Matrix aus dem ersten Kapitel mit den beiden Basisvektoren multiplizieren und erhalten daraus

$$\begin{pmatrix} \cos \alpha & -\sin \alpha \\ \sin \alpha & \cos \alpha \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos \alpha \\ \sin \alpha \end{pmatrix}$$

und

$$\begin{pmatrix} \cos \alpha & -\sin \alpha \\ \sin \alpha & \cos \alpha \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -\sin \alpha \\ \cos \alpha \end{pmatrix}.$$

Das sind jedoch genau unsere gedrehten Basisvektoren. Wir sehen daraus, dass die Wahl, wie wir die Rotationsmatrix aufgestellt haben gut zur Definition der Matrix-Vektor-Multiplikation passt.

Wir wollen nun zwei Abbildungen hintereinander ausführen. Als Beispiel dient uns hier das folgende. Wir wollen unseren Basisvektor \vec{e}_1 zuerst um einen Winkel $\alpha = \frac{\pi}{6}$ ($= 30^\circ$) gegen den Uhrzeigersinn drehen und anschließend um die x-Achse spiegeln. Für die Drehung verwenden wir die Rotationsmatrix (1) und aus Aufgabe (Ü1) wissen wir bereits, wie wir eine Spiegelung um die x-Achse beschreiben können. Wir lesen und schreiben unseren Vorgang von rechts nach links an.

$$\underbrace{S_x}_{\text{Spiegelung um die x-Achse}} \quad \underbrace{R_{30^\circ}}_{\text{Drehung um } 30^\circ} \quad \vec{e}_1$$

Um den gedrehten und gespiegelten Vektor zu berechnen, müssen wir nun folgende Multiplikationen ausführen:

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \frac{\sqrt{3}}{2} & -\frac{1}{2} \\ \frac{1}{2} & \frac{\sqrt{3}}{2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{\sqrt{3}}{2} \\ -\frac{1}{2} \end{pmatrix} \quad (2)$$

Die erste Möglichkeit dies zu tun ist, wie wir es bereits zuvor gemacht haben, zuerst die Matrix R_{30° mit dem Vektor \vec{e}_1 zu multiplizieren und anschließend S_x mit dem gedrehten Vektor. Die zweite Möglichkeit wäre zuerst die beiden Matrizen zu multiplizieren. Das ist zwar etwas komplizierter, es wird sich jedoch lohnen sich damit zu befassen.

Die beiden Matrizen $A = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \end{pmatrix}$ und $B = \begin{pmatrix} b_{11} & b_{12} \\ b_{21} & b_{22} \end{pmatrix}$ können auf die folgende Weise multipliziert werden.



$$A \cdot B = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} b_{11} & b_{12} \\ b_{21} & b_{22} \end{pmatrix} =$$

$$= \begin{pmatrix} a_{11} \cdot b_{11} + a_{12} \cdot b_{21} & a_{11} \cdot b_{12} + a_{12} \cdot b_{22} \\ a_{21} \cdot b_{11} + a_{22} \cdot b_{21} & a_{21} \cdot b_{12} + a_{22} \cdot b_{22} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} c_{11} & c_{12} \\ c_{21} & c_{22} \end{pmatrix}$$

Um beispielsweise das Element c_{12} zu erhalten, muss man die erste Zeile der linken Matrix (A) mit der zweiten Spalte der rechten Matrix (B) multiplizieren. Das bedeutet, dass man das Element a_{11} mit dem Element b_{12} multipliziert und anschließend $a_{12} \cdot b_{22}$ addiert. So kann man auch größere Matrizen addieren. Wichtig ist dabei, dass die Anzahl der Spalten der ersten Matrix („so viele Elemente stehen in den Zeilen“) mit der Anzahl der Zeilen der zweiten Matrix übereinstimmen. Ist dies nicht der Fall, so kann man die beiden Matrizen nicht multiplizieren. Allgemein gilt:

Zwei Matrizen A und B können nur dann miteinander multipliziert werden, wenn ihr Format dies zulässt. Wenn die Matrix A das Format $z_A \times s_A$ und die Matrix B das Format $z_B \times s_B$ hat, so muss für die Multiplikation



immer gelten

$$A \cdot B = (z_A \times s_A) (z_B \times s_B)$$

$$s_A = z_B.$$

Das Format der resultierenden Matrix ist stets


$$(z_A \times s_B)$$

Kommen wir noch einmal zurück zu unserem Beispiel von vorhin. Wir wollen uns nun fragen, ob es einen Unterschied macht, wenn wir die Reihenfolge der beiden Matrizen

und somit auch die Reihenfolge unserer Abbildungen vertauschen. Kommen wir also zum selben Ergebnis, wie in Gleichung (2), wenn wir den Basisvektor \vec{e}_1 zuerst um die x-Achse spiegeln und anschließend um 30° gegen den Uhrzeigersinn drehen.

$$\begin{pmatrix} \frac{\sqrt{3}}{2} & -\frac{1}{2} \\ \frac{1}{2} & \frac{\sqrt{3}}{2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{\sqrt{3}}{2} \\ \frac{1}{2} \end{pmatrix} \quad (3)$$

Da der Vektor \vec{e}_1 in Richtung der x-Achse zeigt, verändert sich seine Richtung nicht, wenn man ihn um die x-Achse spiegelt. Er bleibt somit unverändert und wird nur im Uhrzeigersinn gedreht. Auch die Rechnung in (3) führt zu diesem Ergebnis (Ü5). Für die Multiplikation ist das eine bemerkenswerte Erkenntnis! Wir dürfen die Matrizen, die wir multiplizieren wollen, nicht vertauschen.

 **Die Matrixmultiplikation ist im Allgemeinen nicht kommutativ!**

Wir wollen nun auch ein Beispiel für die Nicht-Kommutativität im Dreidimensionalen betrachten. Die mathematische Beschreibung wäre komplizierter und wird hier weggelassen. Wir betrachten einen handelsüblichen Spielwürfel. Wir wollen diesen Würfel umdrehen und kippen.

1. Fall: Zuerst umdrehen, dann kippen: Der Würfel liegt wie in Abbildung 3 auf dem Tisch und wird umgedreht. Dadurch wandert die Seite mit sechs Augen nach oben und jene mit drei Augen zeigt nach vorne. Als zweiten Schritt werden wir den Würfel nach rechts kippen. Dadurch liegt nun die Seite mit zwei Augen oben auf.

2. Fall: Zuerst kippen, dann umdrehen: Wir beginnen mit derselben Lage des Würfels wie zuvor (Abbildung 3). Nun kippen wir ihn zu Beginn nach rechts. Es liegt nun die Seite mit zwei Augen oben auf. Nach dem Umdrehen zeigt die Seite mit fünf Augen nach oben.

Wir sehen auch hier, dass es einen Unterschied macht, ob wir zuerst umdrehen und dann kippen oder umgekehrt. Es gibt auch Fälle, in denen es keinen Unterschied macht in welcher Reihenfolge man Abbildungen durchführt, jedoch darf man nicht von vornherein davon ausgehen, dass man die Matrizen in der Multiplikation vertauschen darf.

Auch für Matrizen ist keine Division im eigentlichen Sinne definiert. Wir wollen jedoch Abbildungen rückgängig machen können. Wenn wir einen Vektor um einen Winkel α gedreht habe möchten wir ihn auch zurückdrehen können. Zurückdrehen bedeutet,

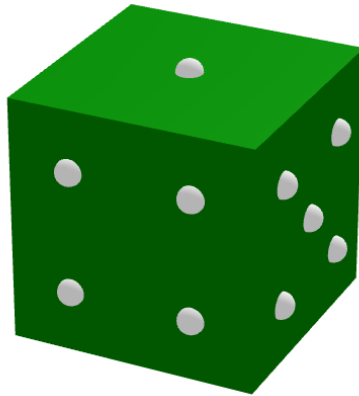


Abbildung 3: Ein handelsüblicher Spielwürfel wird verwendet um Rotationen im Dreidimensionalen zu veranschaulichen.

dass wir um den Winkel α im Uhrzeigersinn drehen - in mathematisch negative Richtung. Wir führen somit eine Drehung um $-\alpha$ durch.

$$R_{-\alpha} = \begin{pmatrix} \cos(-\alpha) & -\sin(-\alpha) \\ \sin(-\alpha) & \cos(-\alpha) \end{pmatrix}$$

Da es sich bei der Kosinusfunktion um eine gerade Funktion³ handelt gilt $\cos(-\alpha) = \cos \alpha$. Die Sinusfunktion hingegen ist eine punktsymmetrische oder ungerade Funktion und daher gilt $\sin(-\alpha) = -\sin \alpha$. Wir können daher für die Rotation um den Winkel α im Uhrzeigersinn schreiben

$$R_{-\alpha} = \begin{pmatrix} \cos \alpha & \sin \alpha \\ -\sin \alpha & \cos \alpha \end{pmatrix}$$

Die Matrix $R_{-\alpha}$ beschreibt somit jene Abbildung, die die Drehung um α , also R_{α} rückgängig macht. Wir wollen, dass für jeden beliebigen Vektor \vec{v} der folgende Ausdruck gilt:

$$R_{-\alpha} R_{\alpha} \vec{v} = \vec{v}$$

Das bedeutet: Wir gehen von einem Vektor \vec{v} aus und drehen ihn um α gegen den Uhrzeigersinn. Anschließend drehen wir diesen neuen Vektor um α im Uhrzeigersinn. Dadurch kommen wir genau zu unserem Ausgangsvektor. Durch Multiplikation der beiden Matrizen $R_{-\alpha}$ und R_{α} sollten wir eine Matrix erhalten, die eine Abbildung beschreibt, die jeden Vektor unverändert lässt (Ü6).

$$R_{-\alpha} R_{\alpha} = \begin{pmatrix} \cos \alpha & \sin \alpha \\ -\sin \alpha & \cos \alpha \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \cos \alpha & -\sin \alpha \\ \sin \alpha & \cos \alpha \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} = \mathbf{1} \quad (4)$$

³Das bedeutet, dass die symmetrisch zur y-Achse ist.

Die Matrix, wie wir sie in Gleichung (4) erhalten wird **Einheitsmatrix** $\mathbb{1}$ genannt. Sie entspricht bei der Zahlenmultiplikation der Zahl 1 und lässt jeden Vektor unverändert. Einheitsmatrizen sind stets quadratisch und auf ihrer Hauptdiagonalen (von oben links nach unten rechts) steht die Zahl 1, alle anderen Elemente sind 0.

Wir haben bereits besprochen, dass die Matrixmultiplikation im Allgemeinen nicht kommutativ ist. Wollen wir eine Operation, wie beispielsweise eine Drehung rückgängig machen, sollte es egal sein, in welche Richtung wir zuerst drehen. Auch mathematisch ist das so. Eine Matrix, die das Umkehren einer Abbildung beschreibt, wird **inverse Matrix** oder nur **Inverse** genannt.

Eine Matrix A^{-1} heißt invers zur Matrix A , wenn

$\left(\begin{array}{c} * * \\ * * \end{array} \right)$

$A^{-1}A = AA^{-1} = \mathbb{1}$

gilt.

Wir haben nun alle wichtigen Begriffe und Gesetze erlernt, die für das Rechnen mit Matrizen notwendig sind. Da wir auch Vektoren in der Matrixrechnung berücksichtigen, wollen wir uns im nächsten Kapitel noch einmal mit ihnen auseinandersetzen.

4 Ein Blick zurück

Wir haben bereits gesehen, dass wir einen Spaltenvektor auch als $(n \times 1)$ -Matrix schreiben können. Bei der Betrachtung des Skalarprodukts haben wir gesehen, dass wir zwei Vektoren so miteinander multiplizieren können, dass wir eine Zahl erhalten. Das ist nur dann möglich, wenn der zweite Vektor im Format $(1 \times n)$ ist und von links multipliziert wird.

$$(1 \times n)(n \times 1) = (1 \times 1)$$

Wir fassen eine (1×1) -Matrix als Zahl auf. Den Umkehrschluss sollte man jedoch nicht ziehen, denn es führt gelegentlich zu Problemen, wenn man eine Zahl als (1×1) -Matrix sieht. Ein $(1 \times n)$ -Vektor besteht aus einer Zeile und n Spalten. Wir nennen einen solchen Vektor **Zeilenvektor**. Man erhält ihn aus einem Spaltenvektor, indem man diesen kippt. Dieser Vorgang wird **transponieren** genannt. Auch Matrizen können transponiert werden, indem man ihre Zeilen und Spalten vertauscht.

Eine Matrix A^T wird Transponierte der Matrix $A = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} \end{pmatrix}$ genannt, wenn

$$A^T = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{21} & a_{31} \\ a_{12} & a_{22} & a_{32} \\ a_{13} & a_{23} & a_{33} \end{pmatrix}$$

gilt

Das Skalarprodukt, wird somit durch Multiplikation eines Zeilenvektors mit einem Spaltenvektor gebildet, wie das nachstehende Beispiel zeigt.

$$(1 \quad 2 \quad 4) \begin{pmatrix} 3 \\ 5 \\ 7 \end{pmatrix} = 1 \cdot 3 + 2 \cdot 5 + 4 \cdot 7 = 3 + 10 + 28 = 41$$

Wir haben bei dieser Multiplikation auch alle Regeln der Matrixmultiplikation berücksichtigt. Vor allem auch das Multiplizieren von Zeilen und Spalten. Was passiert, wenn wir die Vektoren aus dem vorherigen Beispiel vertauschen. Wir wollen daher die folgende Multiplikation durchführen.

$$\begin{pmatrix} 3 \\ 5 \\ 7 \end{pmatrix} (1 \quad 2 \quad 4)$$

Betrachten wir zuallererst das Format dieser Multiplikation:

$$(3 \times 1)(1 \times 3)$$

Nach den bereits bekannten Regeln ist diese Multiplikation möglich, da die aneinanderstoßenden Elemente gleich sind. Als Ergebnis erhalten wir eine (3×3) -Matrix.

$$\begin{pmatrix} 3 \\ 5 \\ 7 \end{pmatrix} (1 \quad 2 \quad 4) = \begin{pmatrix} 3 \cdot 1 & 3 \cdot 2 & 3 \cdot 4 \\ 5 \cdot 1 & 5 \cdot 2 & 5 \cdot 4 \\ 7 \cdot 1 & 7 \cdot 2 & 7 \cdot 4 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 3 & 6 & 12 \\ 5 & 10 & 20 \\ 7 & 14 & 28 \end{pmatrix}$$

Ein weiteres sehr deutliches Beispiel dafür, dass die Matrixmultiplikation nicht kommutativ ist.

5 Wichtige Matriceigenschaften zusammengefasst

Manche Matrizen haben bestimmte Eigenschaften, die andere nicht aufweisen. Wir wollen uns daher einige dieser Eigenschaften ansehen und Situationen finden in denen sie auftauchen oder eine wichtige Rolle spielen.

1. Sind alle Matrizen invertierbar?
2. Wann wird eine Matrix orthogonal genannt?

Für den ersten Punkt stellen wir uns die Frage, ob wir jede Abbildung umkehren können? Wenn wir einen Vektor um eine Achse spiegeln, können wir ihn zurückspiegeln, wenn wir ihn drehen, können wir ihn auch zurückdrehen. Was passiert jedoch, wenn wir ihn auf eine Achse projizieren? Wenn wir sozusagen seinen Schatten betrachten? Wir wollen einen Vektor \vec{v} so abbilden, dass seine x-Koordinate erhalten bleibt und er auf der x-Achse liegt (siehe Abbildung 4). Wir wollen nun eine Matrix

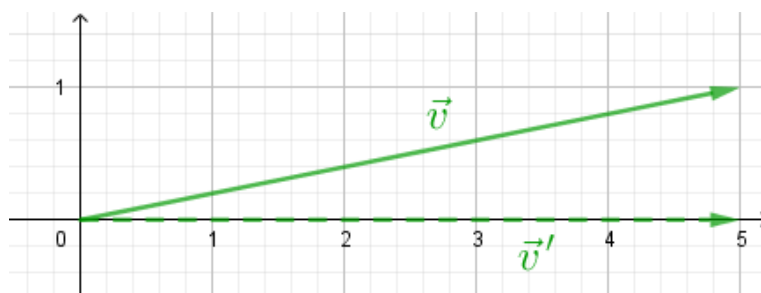


Abbildung 4: Der Vektor \vec{v} wird auf die x-Achse projiziert.

M finden, die

$$\begin{pmatrix} m_{11} & m_{12} \\ m_{21} & m_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} x \\ 0 \end{pmatrix}$$

erfüllt. Es müssen die nachstehenden Gleichungen für alle x und y erfüllt sein.

$$m_{11} \cdot x + m_{12} \cdot y = x$$

$$m_{21} \cdot x + m_{22} \cdot y = 0$$

Da das Ergebnis unabhängig von der y-Komponente des Vektors ist, müssen die Elemente der zweiten Spalte allesamt 0 sein. Auch m_{21} muss gleich 0 sein, da sonst die zweite Gleichung nicht erfüllt wäre. Das Element m_{11} hingegen muss 1 sein, damit die erste Gleichung erfüllt ist. Das gilt genau für die Matrix

$$M = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}$$

Eine solche Abbildung können wir nicht rückgängig machen. Das bedeutet, dass wir durch Kenntnis der Abbildung und des Vektors \vec{v}' nicht auf \vec{v} schließen können. Es gibt nämlich eine ganze Menge von Vektoren die durch Anwenden der Matrix M auf \vec{v}' abgebildet werden. Wir haben durch die Abbildung sämtliche Informationen über

die y-Komponente des Vektors \vec{v} verloren. Siehe dazu auch Abbildung 5. Somit gibt es keine inverse Matrix M^{-1} , die

$$M^{-1}\vec{v}' = \vec{v}$$

erfüllt. Wir sagen die Matrix M ist nicht invertierbar.

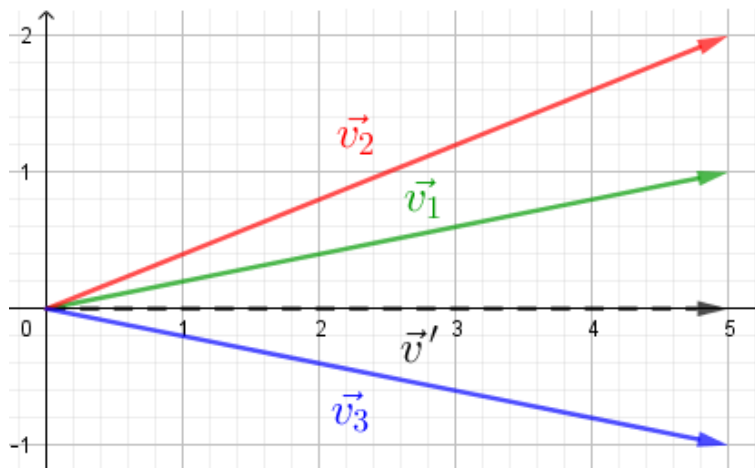



Abbildung 5: Jeder Vektor \vec{v} wird durch M auf \vec{v}' abgebildet. Man kann somit nicht von \vec{v}' auf einen dieser Vektoren zurück schließen.

Es kann auch vorkommen, dass eine Matrix zu sich selbst invers ist. Ein Beispiel dafür wäre die Drehung um π (siehe Ü7). Eine solche Matrix nennt man **selbstinvers**. Genauer dazu im Baustein „Determinanten“.

Unsere zweite Frage beschäftigt sich mit dem Begriff **orthogonal**. Der Begriff ist vielleicht schon aus der Schule bekannt. Man sagt, wenn zwei Vektoren orthogonal sind, stehen sie normal zueinander. Man muss den Begriff jedoch ein bisschen erweitern, wenn man ihn auf Abbildungen anwenden möchte.


 Wir nennen eine Abbildung orthogonal, wenn sie das Skalarprodukt erhält.

Wir werden bald verstehen was diese Definition bedeutet. Der für uns wichtigste Fall sind Basisvektoren, die zueinander normal stehen und normiert sind. Wir haben zu Beginn dieses Bausteins das Beispiel der Drehung der Standardbasis, einer Orthonormalbasis, besprochen. Dieses Beispiel hat uns über den gesamten Baustein begleitet und wird auch hier als wichtiger Vertreter dienen.

Intuitiv war uns in diesem Fall klar, dass die Vektoren \vec{e}_1' und \vec{e}_2' im rechten Winkel aufeinander stehen, da auch die Ausgangsvektoren \vec{e}_1 und \vec{e}_2 einen rechten Winkel einschließen.

Aus der Schule wissen wir bereits, dass zwei Vektoren normal aufeinander stehen, wenn das Skalarprodukt der beiden Vektoren 0 ist. Der Zusammenhang zwischen Winkel und Skalarprodukt ist für uns somit nichts Neues.

Kommen wir nun zur Formulierung „Skalarprodukt erhalten“. Diese Aussage bedeutet, wenn wir zwei Vektoren \vec{a} und \vec{b} um denselben Winkel α drehen, so soll sich das Skalarprodukt der beiden Vektoren und somit ihr eingeschlossener Winkel φ nicht ändern. Durch das Anwenden der Drehung erhalten wir aus den Vektoren \vec{a} und \vec{b} die gedrehten Vektoren \vec{a}' und \vec{b}' und es gilt

$$\vec{a} \cdot \vec{b} = \vec{a}' \cdot \vec{b}'$$

In der Quantenmechanik befassen wir uns mit Wahrscheinlichkeiten, die ebenfalls durch das Skalarprodukt zweier Vektoren berechnet werden. Damit dies auch immer funktioniert, verwenden wir normierte Vektoren. Das stellt sicher, dass das Skalarprodukt zweier Vektoren (betragsmäßig) immer zwischen 0 und 1 liegt. Diese Eigenschaft wollen wir durch das Anwenden von Abbildungen ebenfalls nicht aufs Spiel setzen. Aus diesem Grund sind uns Abbildungen, die das Skalarprodukt nicht verändern so wichtig.

Eine orthogonale Abbildung stellt somit sicher, dass Skalarprodukte und somit auch Winkel und Längen, sowie Wahrscheinlichkeiten erhalten bleiben.

Eine reelle und quadratische Matrix A wird orthogonal genannt, wenn

$$A^T A = A A^T = \mathbb{1}$$

$\langle \begin{smallmatrix} * \\ * \\ * \end{smallmatrix} \rangle$ gilt. Aus dieser Bedingung kann man leicht ableiten, dass auch

$$A^T = A^{-1}$$

erfüllt ist.

Im Baustein „Komplexe Vektoren“ werden wir dieses Thema erneut für komplexe Vektoren aufgreifen.

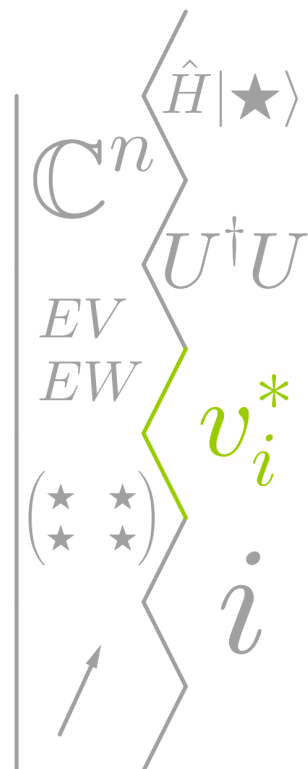
Übungsaufgaben



- Ü1 Berechnen Sie die Vektoren \vec{e}_1' und \vec{e}_2' aus Kapitel 1 für die Werte $\alpha = 0$, $\alpha = \frac{\pi}{4}$, $\alpha = \frac{\pi}{2}$ und $\alpha = \pi$. Zeichnen Sie diese am Einheitskreis ein.
- Ü2 Stellen Sie Matrizen auf, welche die folgenden Abbildungen im \mathbb{R}^2 beschreiben.
- Drehung im Uhrzeigersinn
 - Spiegelung um die x-Achse
 - Spiegelung um die y-Achse
- Ü3 Berechnen Sie $A+B$ sowie $A-B$ und $B-A$ der beiden Matrizen $A = \begin{pmatrix} 2 & 2 \\ 4 & 3 \end{pmatrix}$ und $B = \begin{pmatrix} 1 & 2 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$.
- Ü4 Rechnen Sie die Gleichungen (2) und (3) nach.
- Ü5 Zeichnen Sie die Abbildungen, die durch die Gleichungen (2) und (3) gegeben sind am Einheitskreis ein.
- Ü6 Rechnen Sie Gleichung (4) nach.
- Ü7 Zeigen Sie, dass die Matrix, die eine Drehung um π beschreibt selbstinvers ist.
- Ü8 Zeigen Sie, dass es sich bei einer Drehmatrix im \mathbb{R}^2 um eine orthogonale Matrix handelt.

Komplexe Vektoren und Indexnotation

18. März 2019



Dieser Baustein besteht aus zwei Teilen.

Erster Teil (Kapitel 1-4): In der Quantenmechanik werden wir sehr viel mit komplexen Zahlen in Berührung kommen. Wir werden sie auch innerhalb von Vektoren verwenden. Daher werden wir auch dafür Vektorräume und einige weitere Begriffe benötigen, die wir zum Teil schon kennen, diese jedoch auch erweitern müssen. Dieser Baustein soll als Zwischenschritt in der Abstraktion dienen, um schließlich den „Hilbertraum“ zu beschreiben. Insbesondere erhebt der angegebene Text keinen Anspruch auf Vollständigkeit.

Zweiter Teil (Kapitel 5-8): Hier werden wir über die in der Physik häufig vorkommende Indexschreibweise sprechen und einige ihrer Eigenschaften untersuchen.

Einstiegsbeispiele

$$\langle v_i^* |$$

E1 Führen Sie nachstehende Addition durch: $\begin{pmatrix} i \\ 1 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 1 \\ i \end{pmatrix} =$

E2 Berechnen Sie das Skalarprodukt der beiden Vektoren aus Aufgabe E1.

E3 Berechnen Sie den Betrag des Vektors, der sich nach Ausführen der Addition in Aufgabe E1 ergibt.

E4 Geben Sie die Werte von δ_{11} , δ_{20} und δ_{02} an.

E5 Geben Sie die Werte von ϵ_{111} , ϵ_{123} und ϵ_{132} an.

Komplexe Vektoren

1 Komplexe Vektoren am Beispiel des \mathbb{C}^2

Wir wollen nun versuchen unsere bisherigen Erkenntnisse auf komplexe Zahlen zu erweitern und somit auch auf komplexe Vektoren. Da ein Vektor aus zumindest zwei Zahlen besteht und jede komplexe Zahl durch zwei reelle Zahlen geschrieben werden kann, ist der \mathbb{C}^2 mit dem \mathbb{R}^4 vergleichbar. Aus diesem Grund können wir auch zwei-dimensionale komplexe Vektoren nicht mehr zeichnen.

In den beiden letzten Bausteinen werden wir sehen, dass wir das Konzept des Vektorraums und seiner Elemente noch weiter abstrahieren können (und müssen). Wir wollen uns daher auch über eine allgemeinere Notation Gedanken machen:

1. Da wir solche „Vektoren“, das können beispielsweise Funktionen sein, wie wir später sehen werden, nicht mehr als Pfeile deuten wollen, sollten wir uns daran gewöhnen, dass sie nicht immer ein „Pfeilchen“ tragen. Insbesondere werden im nachstehenden nur rein reelle Vektoren durch Pfeile gekennzeichnet. Zur einfacheren Lesbarkeit werden komplexe Vektoren fett gedruckt. Vektoren sind nun eben die Elemente des Vektorraums, diesen haben wir im Baustein „Vektoren“ bereits kennengelernt, aber dazu mehr im Baustein „Hilberträume und Skalarprodukte“.
2. Wir werden sehen, dass wir das Skalarprodukt abändern müssen. Das nehmen wir zum Anlass, um eine andere Schreibweise kennenzulernen. Auch hier werden wir \cdot nur noch für reelle Vektoren verwenden. Das Skalarprodukt zweier komplexer Vektoren \mathbf{x} und \mathbf{y} schreiben wir durch

$$\langle \mathbf{x}, \mathbf{y} \rangle.$$

Der Einfachheit halber werden wir uns hier wieder auf zwei Dimensionen beschränken. Sämtliche Rechengesetze können allerdings wie gehabt auf höhere Dimensionen erweitert werden. Bevor wir beginnen, wollen wir uns klar machen, was genau ein komplexer Vektor ist. Wir haben bei den reellen Vektoren bereits gesehen, dass wir sogenannte Skalare benötigen. Diese Skalare sind nun nicht mehr reelle, sondern komplexe Zahlen. Somit können die Eintragungen des Vektors auch komplexe Zahlen sein. Beachten Sie, dass es sich bei den reellen Zahlen nur um Spezialfälle der komplexen Zahlen handelt. Somit sind diese auch weiterhin als Skalare zulässig.

Die Rechenregeln für Addition, Subtraktion und skalare Multiplikation bleiben wie gehabt. Auch unsere Standardbasis können wir beibehalten, für Linearkombinationen

verwenden wir hier allerdings komplexe Zahlen, wie nachstehendes Beispiel zeigt.

$$\begin{pmatrix} 3 + 2i \\ i \end{pmatrix} = (3 + 2i) \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} + i \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

Das einzige, wo wir aufpassen müssen ist das Skalarprodukt, wie das nächste Kapitel zeigt.

2 Das Problem mit dem Skalarprodukt

Wir haben bereits gesehen, dass wir Skalarprodukte für vieles benötigen. Wir kennen für reelle Vektoren bereits das Standardskalarprodukt für beispielsweise zweidimensionale Vektoren \vec{v}_1 und \vec{v}_2

$$\vec{v}_1 \cdot \vec{v}_2 = x_1 \cdot x_2 + y_1 \cdot y_2$$

Uns war dabei unter anderem eine Eigenschaft sehr wichtig. Wir haben das Skalarprodukt verwendet, um Längen zu messen. Zur Erinnerung, die Länge eines reellen Vektors \vec{v} ist durch

$$|\vec{v}| = \sqrt{\vec{v} \cdot \vec{v}}$$

gegeben. Daher wollen wir, dass $\vec{v} \cdot \vec{v}$ für alle Vektoren \vec{v} eine positive Zahl¹ ist. Nur für den Nullvektor soll das Skalarprodukt mit sich selbst Null sein. Ob das Wort Länge nun auch für komplexe Vektoren Sinn macht, lassen wir einmal außen vor. Wir wollen diese Eigenschaft dennoch behalten. In der Mathematik nennen wir diese Eigenschaft „positiv definit“. Wir werden im Baustein „Hilberträume und Skalarprodukte“ sehen, dass ein Skalarprodukt immer drei Eigenschaften erfüllen muss, von denen eine eben positiv definit zu sein ist. Das Wort positiv ist wohl selbsterklärend. Das Wort definit bedeutet, dass das Skalarprodukt $\langle \mathbf{v}, \mathbf{v} \rangle$ nur dann 0 ist, wenn $\mathbf{v} = 0$ gilt und umgekehrt. Nur der Nullvektor darf somit Länge 0 haben.

Um zu überprüfen, ob unser bereits bekanntes Skalarprodukt das erfüllt, wollen wir es mit zwei Beispielen versuchen².

1. Berechnen Sie das Skalarprodukt des Vektors $\mathbf{v} = \begin{pmatrix} 1 \\ i \end{pmatrix}$ mit sich selbst.
2. Berechnen Sie das Skalarprodukt des Vektors $\mathbf{v} = \begin{pmatrix} 0 \\ i \end{pmatrix}$ mit sich selbst.

¹Um positiv zu sein muss eine Zahl vor allem auch reell sein. Komplexe Zahlen haben keine Totalordnung, sind daher weder positiv, noch negativ, noch größer oder kleiner.

²Um etwas in der Mathematik zu beweisen reichen Beispiele nicht aus, um etwas zu widerlegen genügt jedoch ein einziges Gegenbeispiel.

Unter Verwendung unseres bekannten Standardskalarprodukts erhalten wir

1. $\langle \mathbf{v}, \mathbf{v} \rangle = 1 \cdot 1 + i \cdot i = 1 - 1 = 0$

Wir haben somit zumindest einen komplexen Vektor gefunden, der ungleich dem Nullvektor ist, jedoch im Skalarprodukt mit sich selbst 0 ergibt. Daher wäre seine „Länge“ ebenfalls 0. Im nächsten Beispiel werden wir sehen, dass es noch skurriler werden kann.

2. $\langle \mathbf{v}, \mathbf{v} \rangle = 0 \cdot 0 + i \cdot i = -1$

Dieser komplexe Vektor liefert mit sich selbst multipliziert sogar eine negative Zahl. Würden wir die Länge dieses Vektors berechnen, wie wir es bei den reellen Vektoren gemacht haben (Wurzel ziehen), würde er die Länge i bekommen.

Wir haben somit gesehen, dass uns das Standardskalarprodukt der reellen Vektoren, dass sie bereits in der Schule kennengelernt haben, in Schwierigkeiten bringt, weshalb wir im nächsten Kapitel ein Skalarprodukt definieren wollen, das besser zu unseren Bedürfnissen passt. Später werden wir sehen, dass auch das noch nicht die ganze Wahrheit ist.

3 Skalarprodukte für komplexe Vektoren

Im Baustein „Komplexe Zahlen“ haben wir zwei Möglichkeiten kennengelernt den Betrag einer komplexen Zahl zu berechnen. Einerseits über die Komponenten und den Satz des Pythagoras, andererseits durch die Multiplikation mit der komplex konjugierten Zahl. Wir haben gesehen, dass aus z^*z immer eine positive, insbesondere auch reelle Zahl resultiert - das Quadrat des Betrags.

Genau das wünschen wir uns auch für das Skalarprodukt eines Vektors mit sich selbst. Ein reelles und vor allem auch positives Ergebnis. Zwei unterschiedliche Vektoren müssen dies nicht erfüllen und tun es im Allgemeinen auch nicht! Da die Summe von positiven reellen Zahlen wieder positive reelle Zahlen sind, können wir das Skalarprodukt von zwei komplexen Vektoren, wie im nachstehenden Kasten angegeben, berechnen.

Das Skalarprodukt zweier komplexer Vektoren $\mathbf{v}_1 = \begin{pmatrix} x_1 \\ y_1 \end{pmatrix}$ und $\mathbf{v}_2 = \begin{pmatrix} x_2 \\ y_2 \end{pmatrix}$ kann durch $\langle \mathbf{v}_1, \mathbf{v}_2 \rangle = x_1^* \cdot x_2 + y_1^* \cdot y_2$ berechnet werden.

Im Falle reeller Vektoren geht dieses Skalarprodukt in das aus der Schule bekannte Standardskalarprodukt über (warum?). Ob man die Elemente des linken oder des rechten Vektors im Skalarprodukt komplex konjugiert ist eine Frage der Konvention. Wir wollen allerdings stets das linke Element im Skalarprodukt komplex konjugieren.

Wir haben bei reellen Vektoren intuitiv vorausgesetzt, dass das Skalarprodukt kommutativ ist. Das für alle Vektoren \vec{v} und \vec{w}

$$\vec{v} \cdot \vec{w} = \vec{w} \cdot \vec{v}$$

gilt. Wir wollen nun überprüfen, ob auch für komplexe Vektoren diese Bedingung gilt. Wir wollen damit beginnen diese Vermutung anhand eines Beispiels zu testen.

Wir verwenden dazu die beiden Vektoren $\mathbf{v}_1 = \begin{pmatrix} i \\ i \end{pmatrix}$ und $\mathbf{v}_2 = \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}$.

$$\langle \mathbf{v}_1, \mathbf{v}_2 \rangle = (-i) \cdot 1 + (-i) \cdot 1 = -2i$$

Wir haben den Vektor \mathbf{v}_1 komplex konjugiert, wodurch i zu $-i$ wurde. Vertauschen wir nun die beiden Vektoren so erhalten wir:

$$\langle \mathbf{v}_2, \mathbf{v}_1 \rangle = 1 \cdot i + 1 \cdot i = 2i$$

Wir erkennen, dass wir hier nicht dasselbe Ergebnis bekommen, sondern das komplex konjugierte. Diese Eigenschaft wird uns noch häufiger in anderen Varianten begegnen. Wir nennen diese Eigenschaft **hermitesch**³(Ü3).

Für das Skalarprodukt zweier komplexer Vektoren \mathbf{x} und \mathbf{y} gilt

$$\langle \mathbf{x}, \mathbf{y} \rangle = \langle \mathbf{y}, \mathbf{x} \rangle^*$$

$$\langle v_i^* |$$

Neben positiv definit zu sein, also $\langle \mathbf{x}, \mathbf{x} \rangle \geq 0$, ist hermitesch die zweite Bedingung, die wir an ein Skalarprodukt stellen wollen (warum?). Wir haben gesehen, dass wir diese durch obige Definition ohnehin bekommen. Die dritte Eigenschaft, die wir hier noch nicht behandelt haben, wollen wir im Baustein „Hilberträume und Skalarprodukte“ kennenlernen. Im obenstehenden Beispiel haben Sie auch gesehen, dass zwei unterschiedliche Vektoren im Skalarprodukt ein im Allgemeinen komplexes Ergebnis liefern können - die positive Definitheit bezieht sich somit nur auf das Skalarprodukt zweier identischer Vektoren.

³Oft auch hermitisch.

4 Abbildungen im \mathbb{C}^2

Auch Abbildungen komplexer Vektoren können wir mit Hilfe von (komplexen) Matrizen beschreiben. Die Eintragungen der Matrix sollen nun eben komplexe Zahlen sein. Diese Matrizen verwenden wir in der Quantenmechanik zur Beschreibung von Operatoren. Wir werden daher wieder besondere Ansprüche an sie stellen.

Denken wir zuerst an die reellen Matrizen zurück. Unser Wunsch war es Abbildungen invertieren zu können. Außerdem wollten wir Abbildungen, die das Skalarprodukt erhalten. Beide Forderungen wollen wir auch hier beibehalten. Die erste der beiden, die Invertierbarkeit, können wir ohne Abänderungen übernehmen. Wenn also eine komplexe Matrix existiert, die mit der ursprünglichen multipliziert die Einheitsmatrix ergibt, so haben wir ein Inverses und die ursprüngliche Matrix ist invertierbar.

Die zweite Eigenschaft, also die Erhaltung des Skalarprodukts, können wir leider nicht komplett gleich belassen. Wir haben schließlich auch ein anderes Skalarprodukt. Wir werden die Orthogonalität allerdings in der gleichen Weise abändern, wie wir auch das Skalarprodukt verändert haben. Zur Erinnerung eine orthogonale Matrix A erfüllt $A^T A = A A^T = \mathbb{1}$ beziehungsweise ihr Inverses ist genau das Transponierte, $A^T = A^{-1}$.

Für komplexe Matrizen, die das Skalarprodukt erhalten verwenden wir den Begriff **unitär**.

Wir nennen eine Abbildung unitär, wenn sie das komplexe Skalarprodukt $\langle v_i^* |$ erhält.

Da wir hier das komplexe Skalarprodukt verwenden, gilt für unitäre Matrizen:

Eine komplexe und quadratische Matrix A wird unitär genannt, wenn

$$(A^T)^* A = A (A^T)^* = \mathbb{1}$$

gilt. Aus dieser Bedingung kann man leicht ableiten, dass auch

$$(A^T)^* = A^{-1}$$

erfüllt ist.

Transponieren ist uns bereits bekannt. Eine Matrix komplex konjugieren bedeutet, dass man jedes Element der Matrix komplex konjugiert. Da die Schreibweise mit doppeltem Exponenten auf Dauer etwas unpraktisch ist, führen wir eine neue Bezeichnung ein, das sogenannte „**Dagger**“ (oder „Kreuz“):

$$A^\dagger = (A^T)^* = (A^*)^T$$

Das transponieren und komplex konjugieren einer komplexen Matrix nennt man (komplex) **adjungieren**.

Indexnotation

5 Nabla und Laplace - Wie man mit Dreiecken rechnet

Wir kommen nun zum zweiten Teil dieses Bausteins. Hier werden wir uns zuerst mit Ableitungsregeln⁴ für Vektoren beschäftigen und in den späteren Kapiteln eine praktische Schreibweise für die Themen der Vektoranalysis⁵ kennenlernen.

Im Zentrum dieses Kapitels steht der sogenannte **Nabla-Operator**, der in drei Dimensionen folgendermaßen definiert werden kann:

$$\vec{\nabla} := \begin{pmatrix} \frac{\partial}{\partial x} \\ \frac{\partial}{\partial y} \\ \frac{\partial}{\partial z} \end{pmatrix}$$

Wir erkennen, dass es sich dabei um einen Vektor handelt, dessen Komponenten partielle Ableitungen⁶ sind. Wir wissen bereits, dass wir Vektoren mit Zahlen multiplizieren können, Skalarprodukte berechnen und auch das Kreuzprodukt bilden können. Diese drei Operationen wollen wir nun mit dem Nabla-Operator durchführen.

1. **Gradient:** Wir wollen den Nabla-Operator nun mit einer skalaren Funktion multiplizieren. Ein Beispiel für eine skalare Funktion wäre die Temperatur in Abhängigkeit des Orts, also $T(x, y, z) \equiv T(\vec{x})$. Der Gradientenvektor gibt an in

⁴Für die Integration sind vor allem die Sätze von Stokes und Gauß von Bedeutung.

⁵Analysis, also hauptsächlich Differential- und Integralrechnung, in mehreren Variablen.

⁶Hängt eine Funktion von mehreren Variablen ab, so entscheidet die partielle Ableitung nach welcher dieser Variablen man ableitet. Alle anderen Variablen werden als Konstanten betrachtet.

welche Richtung wir gehen müssen, damit die Temperatur den größten Anstieg (pro Einheit) hat.

$$\text{grad } T(\vec{x}) = \vec{\nabla} \cdot T(\vec{x}) = \begin{pmatrix} \frac{\partial T(\vec{x})}{\partial x} \\ \frac{\partial T(\vec{x})}{\partial y} \\ \frac{\partial T(\vec{x})}{\partial z} \end{pmatrix}$$

2. **Divergenz:** Wir wollen nun das Skalarprodukt des Nabla-Operators mit einer vektoriellen Funktion berechnen. Bekannt ist Ihnen die Divergenz womöglich bereits aus der Maxwellgleichung $\text{div } \vec{B}(\vec{x}) = 0$. Die Divergenz beschreibt die Quellstärke und somit ist die Aussage der genannten Maxwellgleichung, dass das Magnetfeld quellfrei ist.

$$\text{div } \vec{B}(\vec{x}) = \vec{\nabla} \cdot \vec{B}(\vec{x}) = \frac{\partial B_x(\vec{x})}{\partial x} + \frac{\partial B_y(\vec{x})}{\partial y} + \frac{\partial B_z(\vec{x})}{\partial z}$$

3. **Rotation:** Als letztes wollen wir noch das Kreuzprodukt des Nabla-Operators mit einem Vektorfeld berechnen. Durch diese Operation können wir Wirbel in einem Vektorfeld beschreiben. Betrachten wir beispielsweise ein Kraftfeld, so wissen wir, dass es sich um eine konservative Kraft handelt, wenn die Rotation verschwindet. Die Rotation eines Kraftfelds kann durch

$$\text{rot } \vec{F}(\vec{x}) = \vec{\nabla} \times \vec{F}(\vec{x}) = \begin{pmatrix} \frac{\partial F_z}{\partial y} - \frac{\partial F_y}{\partial z} \\ \frac{\partial F_x}{\partial z} - \frac{\partial F_z}{\partial x} \\ \frac{\partial F_y}{\partial x} - \frac{\partial F_x}{\partial y} \end{pmatrix}$$

berechnet werden, wobei $F_i \equiv F_i(\vec{x})$ für $i \in \{x, y, z\}$ gilt.

Der **Laplace-Operator** entsteht, wenn man das Skalarprodukt zweier Nabla-Operatoren bildet:

$$\Delta := \vec{\nabla} \cdot \vec{\nabla} = \begin{pmatrix} \frac{\partial}{\partial x} \\ \frac{\partial}{\partial y} \\ \frac{\partial}{\partial z} \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} \frac{\partial}{\partial x} \\ \frac{\partial}{\partial y} \\ \frac{\partial}{\partial z} \end{pmatrix} = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}$$

6 Indexnotation

Im letzten Kapitel haben wir uns bereits mit den Ableitungen in mehreren Dimensionen beschäftigt und gesehen, dass das Anschreiben der Rotation beispielsweise umständlich ist. Aus diesem Grund wollen wir eine kompaktere Schreibweise kennenlernen.

Dazu werden wir die Indexnotation⁷ verwenden. Wie der Name bereits sagt, wollen wir anstelle der Tupel-Darstellung, Vektoren nur durch ihre durchnummerierten Komponenten angeben. Ein dreidimensionaler Vektor \vec{v} wird dabei beispielsweise durch seine Komponenten v_i angegeben, wobei $i \in \{1, 2, 3\}$. Auch den Nabla-Operator aus dem letzten Kapitel kann man in dieser Notation schreiben, nämlich ∇_i oder $\frac{\partial}{\partial x_i}$. Sie sehen bereits, dass wir den Vektorpfeil hier weglassen. Logisch, da die einzelnen Komponenten Zahlen sind.

Um die Schreibweise so allgemein wie möglich zu halten, werden wir die Komponenten mit Zahlen durchnummerieren (anstelle der Raumkomponenten x, y und z). Die y -Komponente des Impulses p_y , schreiben wir somit p_2 .

Anmerkung 1: Wenn wir in einem System mehrere Impulse beschreiben, nummerieren wir diese ebenfalls durch. Der Unterschied liegt jedoch darin, dass die Impulse in diesem Fall Vektorpfeile tragen. Der Impuls \vec{p}_1 ist somit einer von mehreren Impulsen in einem System - eine vektorielle Größe. Hingegen ist p_1 die x -Komponente des Impulses \vec{p} .

Wir haben im Baustein „Matrizen“ bereits gesehen, dass wir auch die Komponenten einer Matrix durchnummerieren. Der erste Index entspricht dabei der Zeile und der zweite Index der Spalte. Wir können die 2×3 -Matrix A beispielsweise durch ihre Komponenten a_{ij} mit $i \in \{1, 2\}$ und $j \in \{1, 2, 3\}$ angeben. Sie sehen bereits, dass man einen Vektor durch einen Index und eine Matrix durch zwei Indizes beschreiben kann. Man kann auch Objekte (Tensoren) mit noch mehr Indizes definieren. Wahrscheinlich haben Sie das Levi-Civita-Symbol ε_{ijk} bereits gesehen - dazu später mehr.

7 Einsteinsche Summenkonvention

Nun wollen wir beginnen mit dieser neuen Notation zu rechnen. Zuerst sehen wir uns das Skalarprodukt zweier Vektoren \vec{v} und \vec{w} an. Zur Erinnerung:

$$\vec{v} \cdot \vec{w} = v_1 \cdot w_1 + v_2 \cdot w_2 + \dots$$

Man erkennt, dass wir jeweils die Komponenten mit gleichem Index multiplizieren und diese Paare anschließend addieren. Etwas kürzer können wir dies auf folgende Weise anschreiben:

$$\vec{v} \cdot \vec{w} = \sum_{i=1}^n v_i \cdot w_i$$

⁷Wir werden hier nur untenstehende Indizes verwenden. Möchte man beispielsweise mit der aus der Relativitätstheorie bekannte Minkowski-Metrik rechnen, müsste man zwischen oberen und unteren Indizes unterscheiden.

Dabei ist n die Dimension der beiden Vektoren⁸ und i der so genannte Summationsindex. Dieser nimmt alle Werte zwischen 1 und n an. Die Einsteinsche Summenkonvention besagt nun, dass wir das Summationszeichen \sum weglassen und anstelle der obigen Formel

$$\vec{v} \cdot \vec{w} = v_i w_i$$

schreiben. Wir wissen bereits, dass der Name eines Summationsindex willkürlich gewählt werden kann. Wir hätten anstelle von i genauso gut k oder jeden anderen Buchstaben schreiben können. Wir wollen sie „Dummy-Indizes“ nennen. Wir verwenden sie nur genau einmal innerhalb einer Rechnung und schmeißen sie anschließend weg, ähnlich einer kaputten „Dummy“-Puppe beim Test von (schadhaften) Fahrzeug-Airbags. Die Konvention besagt auch, dass wir keine drei gleichen Indizes in einen Term packen. Wir sollten uns daher folgendes merken:

Über zwei gleiche Indizes wird summiert. Der Name dieser Indizes ist $\langle v_i^* |$ vollkommen irrelevant.

Zusätzlich zu den Dummy-Indizes gibt es auch freie Indizes, also welche die in einem Term nur einmal vorkommen. Solche freien Indizes müssen bei einer Gleichung erhalten bleiben. Das bedeutet, wenn links des Gleichheitszeichen ein freier Index steht muss das auch für die rechte Seite gelten. Steht rechts ein Vektor muss auch links ein solcher stehen. Selbiges gilt auch für Zahlen und Matrizen. Um dies zu verdeutlichen wollen wir uns einige Beispiele aus der Physik ansehen. Im nächsten Kapitel werden wir auch sehen, wie sehr uns diese Schreibweise das Leben vereinfachen kann.

- **Arbeit:** Die Arbeit kann über das Skalarprodukt von Kraft und Weg berechnet werden:

$$W = \vec{F} \cdot \vec{x} = F_i x_i$$

Links gibt es keinen freien Index, da die Arbeit eine skalare Größe ist und somit keinen Index braucht. Auch rechts treten nur Dummy-Indizes auf.

- **Impuls:** Der Impuls kann über die skalare Multiplikation von Masse und Geschwindigkeit berechnet werden:

$$\vec{p} = m \cdot \vec{v}$$

oder in Indexnotation:

$$p_i = m v_i$$

⁸Bei der Berechnung des Skalarprodukts muss die Dimension der beiden Vektoren übereinstimmen.

Hier kommt der Index links, sowie rechts einmal vor - auf beiden Seiten der Gleichung steht ein Vektor.

- **Kreuzprodukt:** Viele physikalische Größen beinhalten ein Kreuzprodukt. Beispiele dafür wären der Drehimpuls und das Drehmoment. Für doppelt angewandte Kreuzprodukte gilt die folgende Identität:

$$\vec{v} = \vec{a} \times (\vec{b} \times \vec{c}) = \vec{b}(\vec{a} \cdot \vec{c}) - \vec{c}(\vec{a} \cdot \vec{b})$$

Wir schreiben nun den ersten dieser beiden Terme in Indexnotation an:

$$v_i = (\vec{b}(\vec{a} \cdot \vec{c}))_i = b_i (a_k c_k) = b_i a_k c_k$$

Auch hier erkennen wir, dass sowohl rechts als auch links ein Vektor steht.

8 Kronecker-Delta und Levi-Civita-Symbol

In den letzten Kapiteln haben wir uns bereits viel mit der Schreibweise des Skalarprodukts beschäftigt. Nun wollen wir uns auch überlegen, ob wir das Kreuzprodukt mit der neuen Schreibweise vereinfachen können. Wir werden sehen, dass für dieses eine einzige Zeile ausreicht.

$$\vec{z} = \vec{x} \times \vec{y} = \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix} \times \begin{pmatrix} y_1 \\ y_2 \\ y_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} x_2 \cdot y_3 - x_3 \cdot y_2 \\ x_3 \cdot y_1 - x_1 \cdot y_3 \\ x_1 \cdot y_2 - x_2 \cdot y_1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} z_1 \\ z_2 \\ z_3 \end{pmatrix}$$

Beginnen wir damit die Struktur dieses erstmals sehr kompliziert wirkenden Objekts zu analysieren. Was fällt Ihnen dabei auf? Vergleichen Sie mit der nachstehenden Liste:

- Die erste Komponente des Vektors \vec{z} setzt sich nur aus der zweiten und dritten der Vektoren \vec{x} und \vec{y} zusammen usw.
- Jede Komponente des Vektors \vec{z} setzt sich aus zwei Termen zusammen, die jeweils aus einer Komponente des Vektors \vec{x} und einer des Vektors \vec{y} bestehen.
- Jeder Index kommt in jeder Spalte nur ein einziges Mal vor. Zum Beispiel in der ersten Spalte x_2, x_3, x_1 .

Bevor wir uns nun um eine ökonomischere Schreibweise bemühen, werden wir das Kronecker-Delta⁹ kennenlernen. Im Wesentlichen unterscheidet es, ob zwei Objekte gleich sind oder eben nicht. Es ist definiert durch:

⁹Die Delta-Distribution kann als kontinuierliches Analogon zum Kronecker-Delta gesehen werden.

$$\delta_{ij} = \begin{cases} 1 & i = j \\ 0 & i \neq j \end{cases}$$

$\langle v_i^* |$

Kommen wir nun zurück zum Kreuzprodukt. Um diese Kombinationen zusammenzufassen, ist das Levi-Civita-Symbol ε_{ijk} hilfreich. Es ist folgendermaßen definiert:

$$\varepsilon_{ijk} = \begin{cases} 1 & \text{zyklische Permutation von 1,2,3} \\ -1 & \text{antizyklische Permutation von 1,2,3} \\ 0 & \text{sonst} \end{cases}$$

$\langle v_i^* |$

Zyklische Vertauschungen sind jene, bei denen man 1, 2, 3 durchzählen kann. Als Tipp um sich diese zu merken, schreiben Sie am besten diese Zahlen zwei mal hintereinander auf:

1 2 3 1 2 3

Unterstreichen Sie nun in der oberen Liste die ersten drei Zahlen in rot, anschließend die zweite bis vierte Zahl in blau und zuletzt die dritte bis fünfte Zahl in grün. Sie erhalten die Kombinationen

1 2 3
2 3 1
3 1 2

Genau diese Kombinationen sind die zyklischen Vertauschungen (oder Permutationen). Die antizyklischen Vertauschungen sind alle übrigen Kombinationen in denen jede Ziffer genau einmal vorkommt. Die sonstigen Fälle sind jene in denen eine Ziffer zumindest doppelt vorkommt.

Mit Hilfe des Levi-Civita-Symbols können wir dieses folgendermaßen anschreiben (Ü5):

$$z_i = \varepsilon_{ijk} x_j y_k$$

Überlegen Sie, wie diese Schreibweise mit den drei oben genannten Beobachtungen zusammenpasst.

Für die Multiplikation des Kronecker-Deltas und des Levi-Civita-Symbols gilt (Ü7):

$$\delta_{ij} \varepsilon_{ijk} = 0$$

Eine weitere sehr praktische Tatsache sind die Symmetrien dieser beiden Symbole. Für das Kronecker-Delta gilt

$$\delta_{ij} = \delta_{ji}.$$

Es ist symmetrisch bezüglich der Vertauschung zweier Indizes. Hingegen ist das Levi-Civita-Symbol total antisymmetrisch. Das bedeutet, dass es durch Vertauschung zweier Indizes ein negatives Vorzeichen erhält, wie das nachstehende Beispiel zeigt:

$$\varepsilon_{ijk} = -\varepsilon_{jik}$$

Wie in der Physik üblich sind Symmetrien ein Grund zur Freude. Das folgende Beispiel soll verdeutlichen, wie sehr uns diese Schreibweise das Leben vereinfacht. Wir wollen zeigen, dass

$$\operatorname{div} \operatorname{rot} \vec{A} = 0$$

für ein beliebiges Vektorfeld \vec{A} gilt. Dazu schreiben wir dies in die Indexnotation um:

$$\operatorname{div} \operatorname{rot} \vec{A} = \nabla_i \varepsilon_{ijk} \nabla_j A_k$$

Da für bestimmte Werte von i, j und k das Levi-Civita-Symbol lediglich eine Zahl ist, dürfen wir es nach vorne ziehen und erhalten:

$$\operatorname{div} \operatorname{rot} \vec{A} = \underbrace{\varepsilon_{ijk}}_{\text{antisym.}} \underbrace{\nabla_i \nabla_j}_{\text{sym.}} A_k = 0$$

Wir wissen bereits, dass das Levi-Civita-Symbol antisymmetrisch ist. Aufgrund des Satzes von Schwarz wissen wir, dass man partielle Ableitungen vertauschen darf, weshalb $\nabla_i \nabla_j$ symmetrisch ist. Mit Hilfe der Einsteinschen Summenkonvention¹⁰ können wir nun begründen, dass etwas symmetrisches mit etwas antisymmetrischen multipliziert, verschwindet. Wir haben dadurch gezeigt, was wir zeigen wollten. Falls Sie glauben diese Aussage ohne dieser Konvention schneller allgemein beweisen zu können, versuchen Sie es.

Anmerkung 2: Für das Kronecker-Delta mit zwei gleichen Indizes gilt:

$$\delta_{ii} = n$$

Dabei ist n die Dimension. Auch hier greift die Einsteinsche Summenkonvention. Als Beispiel dient der Fall $n = 3$:

$$\delta_{ii} = \underbrace{\delta_{11}}_{=1} + \underbrace{\delta_{22}}_{=1} + \underbrace{\delta_{33}}_{=1} = 3$$

Anmerkung 3: Für die Multiplikation zweier Levi-Civita-Symbole, die zumindest in einem Index übereinstimmen, gilt:

¹⁰Nach Summation des obigen Ausdrucks kürzen sich alle Terme weg.

- $\varepsilon_{ijk} \varepsilon_{ilm} = \delta_{jl} \delta_{km} - \delta_{jm} \delta_{kl}$
- $\varepsilon_{ijk} \varepsilon_{ijm} = 2\delta_{km}$
- $\varepsilon_{ijk} \varepsilon_{ijk} = 2\delta_{kk}$

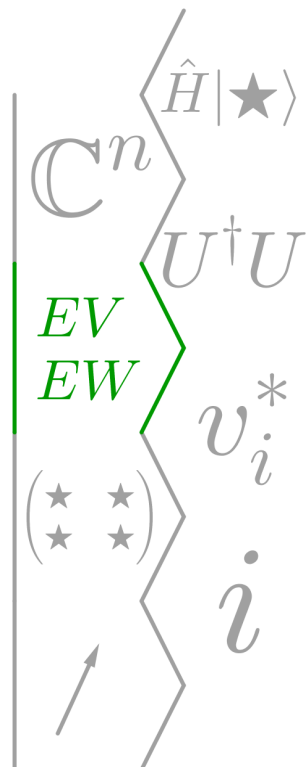
Übungsaufgaben

$$\langle v_i^* |$$

- Ü1 Berechnen Sie das Skalarprodukt der beiden Vektoren aus Kapitel 2 mit der korrekten Definition des Skalarprodukts.
- Ü2 Berechnen Sie das Skalarprodukt des Vektors $\mathbf{v}_1 = \begin{pmatrix} i \\ i \end{pmatrix}$ mit dem Vektor $\mathbf{v}_2 = \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}$
- Ü3 Zeigen Sie allgemein für Vektoren des \mathbb{C}^2 , dass das Skalarprodukt hermitesch ist.
- Ü4 Geben Sie den Gradienten, die Divergenz sowie den Laplace-Operator in zwei Dimensionen an.
- Ü5 Rechnen Sie nach, dass das Kreuzprodukt $\vec{z} = \vec{x} \times \vec{y}$ durch $z_i = \varepsilon_{ijk} x_j y_k$ berechnet werden kann.
- Ü6 Rechnen Sie für drei selbst gewählte Werte nach, dass die Identität $\varepsilon_{ijk} \varepsilon_{ilm} = \delta_{jl} \delta_{km} - \delta_{jm} \delta_{kl}$ gilt.
- Ü7 Begründen Sie, warum $\delta_{ij} \varepsilon_{ijk} = 0$ gilt.
- Ü8 Zeigen Sie für ein beliebiges (genügend oft differenzierbares) Skalarfeld $\phi(\vec{x})$, dass $\text{rot grad } \phi = 0$ gilt. Führen Sie diese Rechnung sowohl in Indexnotation als auch in Vektorschreibweise durch.

Eigenwerte und Eigenvektoren

18. März 2019



Eigenwerte werden wir in der Quantenmechanik als mögliche Messwerte einer Observablen (Messgröße) kennenlernen. In diesem Baustein wollen wir uns nicht nur damit befassen, wie wir Eigenwerte und Eigenvektoren berechnen können, sondern auch was wir uns unter diesen vorstellen können.

Dies ist ein Interaktiver Baustein, der mit den Geogebra-Files „Eigenwerte und Eigenvektoren finden“ sowie „Figuren abbilden“ verbunden ist. Zugang zu diesen Dateien erhalten Sie über: www.quantumparticlegroup.at/teaching

Einstiegsbeispiele



E1 Berechnen Sie die Eigenwerte, sowie die Eigenvektoren der Matrix $M_1 = \begin{pmatrix} 1 & \frac{1}{2} \\ \frac{1}{2} & 1 \end{pmatrix}$.

E2 Berechnen Sie die Eigenwerte, sowie die Eigenvektoren der Matrix $M_2 = \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix}$.

E3 Berechnen Sie die Eigenwerte, sowie die Eigenvektoren der Matrix $M_3 = \begin{pmatrix} -1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$.

1 Ziele

Wir haben uns in den letzten Bausteinen bereits viel mit Matrizen und Abbildungen beschäftigt, nun wollen wir uns überlegen, ob es Vektoren gibt, die unter einer Abbildung nur gestreckt oder gestaucht werden.

Zur Erinnerung: Ein Vektor wird durch die Multiplikation mit einem Skalar gestreckt oder gestaucht, je nach Betrag des Skalars.

Klarerweise wird diese Fragestellung von der Matrix, die die Abbildung beschreibt, selbst abhängen. Zu einer Matrix A nennen wir v einen Eigenvektor und λ einen Eigenwert, wenn

$$Av = \lambda v$$

erfüllt ist. Wenn wir die Matrix A auf den Vektor anwenden, soll dies dasselbe sein, als würden wir ihn mit der Zahl λ multiplizieren. Man kann diese Betrachtungen für die reellen Zahlen, als auch für die komplexen durchführen. Allerdings können wir die beiden Betrachtungen nicht mehr so einfach voneinander trennen, denn es gibt reelle Matrizen, die beispielsweise komplexe Eigenwerte aufweisen. Wir werden daher allgemein im Komplexen rechnen.

Anmerkung: Ist λ negativ, so wird die Orientierung des Vektors geändert, seine Richtung bleibt jedoch gleich. Daher ist v auch in diesem Fall ein Eigenvektor. Man könnte auch sagen, dass alle Vektoren Av , die zu dem Ausgangsvektor v parallel oder antiparallel sind Eigenvektoren sind.

Um ein etwas genaueres Bild davon zu bekommen, was wir uns unter dieser Überlegung vorstellen können, wollen wir mit einigen Beispielen für zweidimensionale reelle Abbildungen beginnen.

2 Reelle 2×2 - Matrizen

Im Geogebra-File „Eigenwerte und Eigenvektoren finden“ werden alle nachstehenden Matrizen auf den Vektor \vec{v} angewandt. Der Vektor \vec{v} kann durch Verschieben des roten Punktes an seiner Spitze verändert werden. Die abgebildeten Vektoren sind durch die entsprechenden Indizes gekennzeichnet zu welcher Matrix sie gehören. Um die abgebildeten Vektoren anzuzeigen wählen Sie die entsprechende Schaltfläche aus. Versuchen Sie durch Verändern des Vektors \vec{v} seine Eigenwerte und seine Eigenvektoren zu finden. Sie können auch versuchen zu beschreiben wie die einzelnen Matrizen auf den Vektor \vec{v} wirken. Am Besten gehen Sie nach der Reihenfolge B - C - D - E - A vor. In den Kapiteln 2.1 bis 2.5 wird beschrieben, wie man die Eigenwerte sowie die Eigenvektoren finden kann. Versuchen Sie daher erst selbst welche aufzufinden, bevor Sie weiterlesen.

2.1 Matrix A - Streckung um den Faktor 2

$$A = \begin{pmatrix} 2 & 0 \\ 0 & 2 \end{pmatrix}$$

Wir wollen nun diese Matrix auf einen allgemeinen Vektor der Form $v = \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix}$ anwenden.

$$Av = \begin{pmatrix} 2 & 0 \\ 0 & 2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 2 \cdot x \\ 2 \cdot y \end{pmatrix} = 2 \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix}$$

Wir sehen, dass egal welchen Vektor wir für diese Betrachtung verwenden, er auf sein Doppeltes abgebildet wird. Unabhängig davon in welche Richtung v zeigt, ist v_A parallel und doppelt so lang. Wir wissen daher, dass die Matrix den Eigenwert 2 hat und jeder zweidimensionale (komplexe) Vektor Eigenvektor ist.

2.2 Matrix B - Spiegelung um die x-Achse

$$B = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

Es handelt sich bei dieser Abbildung um eine Spiegelung um die x-Achse, die wir bereits im Baustein „Matrizen“ kennengelernt haben. Somit bleiben alle Längen erhalten. Das bedeutet auch, dass wir nur Eigenwerte mit Betrag 1 erwarten. Es wird schließlich kein Vektor verlängert oder verkürzt. Ein Vektor, der entlang der x-Achse liegt, sollte unter einer Spiegelung unverändert bleiben. Ein solcher Vektor hat die Form $v = \begin{pmatrix} x \\ 0 \end{pmatrix}$.

$$Bv = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} x \\ 0 \end{pmatrix} = 1 \begin{pmatrix} x \\ 0 \end{pmatrix}$$

Der Vektor v ist somit ein Eigenvektor zum Eigenwert 1. Im ersten Moment denkt man möglicherweise, das sei der einzige Eigenvektor. Doch was passiert mit einem Vektor der entlang der y-Achse zeigt. Wir wollen nun den Vektor $v = \begin{pmatrix} 0 \\ y \end{pmatrix}$ betrachten.

$$Bv = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ y \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ -y \end{pmatrix} = -1 \begin{pmatrix} 0 \\ y \end{pmatrix}$$

Daher ist auch -1 ein Eigenwert und der Vektor w ein dazugehöriger Eigenvektor. Er bleibt durch Spiegelung um die x-Achse gleich lang, ändert jedoch seine Orientierung (Ü1).

2.3 Matrix C - Projektion auf die x-Achse

$$C = \begin{pmatrix} \frac{1}{2} & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}$$

Auch eine solche Matrix haben wir bereits kennengelernt. Jeder Vektor wird auf die x-Achse projiziert. Es bleibt lediglich der x-Anteil des Vektors übrig. Der Wert $\frac{1}{2}$ verkürzt diese x-Komponente noch auf die Hälfte des ursprünglichen Werts. Ein Vektor, der nur in x-Richtung zeigt, wird verkürzt, ändert seine Richtung aber nicht, daher haben wir einen Anwärter auf einen Eigenvektor gefunden. Dies wollen wir auch nachrechnen.

$$Cv = \begin{pmatrix} \frac{1}{2} & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{x}{2} \\ 0 \end{pmatrix} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} x \\ 0 \end{pmatrix}$$

Dieser Vektor ist somit ein Eigenvektor zum Eigenwert $\frac{1}{2}$. Ein zweiter Vektor zeigt uns ebenfalls eine Besonderheit, nämlich der Vektor, der entlang der y-Achse gerichtet ist. Er besitzt überhaupt keinen Anteil in x-Richtung, aber sehen wir uns an, auf welchen „Vektor“ er abgebildet wird.

$$Cv = \begin{pmatrix} \frac{1}{2} & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ y \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix} = 0 \begin{pmatrix} 0 \\ y \end{pmatrix}$$

Ein Vektor der ausschließlich in diese Richtung zeigt, verschwindet unter Projektion auf die x-Achse. Er wird somit auf den Nullvektor abgebildet. Man sagt, dass er ebenfalls ein Eigenvektor ist. Ein Eigenvektor zum Eigenwert 0.

In den letzten drei Beispielen waren die kanonischen Basisvektoren stets Eigenvektoren. Wir werden sehen, dass dies nicht immer der Fall sein muss. Wir haben bis jetzt zwei Fälle kennengelernt

1. Jeder Vektor ist Eigenvektor.
2. Es gibt zwei Eigenvektoren.

Außerdem fällt auf, dass die Eigenwerte immer jene Zahlen waren, die genau auf der Hauptdiagonale liegen. Nun wollen wir uns zwei weitere Beispiele ansehen - wer weiß, vielleicht gibt es noch mehr Auffälligkeiten.

2.4 Matrix D - Drehung um 90° im Uhrzeigersinn

$$D = \begin{pmatrix} \cos \frac{\pi}{2} & -\sin \frac{\pi}{2} \\ \sin \frac{\pi}{2} & \cos \frac{\pi}{2} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$$

Der Vektor v_D ist stets gleich lang wie der Vektor v . Das wundert uns nicht, da er nur um $\frac{\pi}{2}$ gedreht wird. Da keine Streckung oder Stauchung auftritt, erwarten wir einen Eigenwert vom Betrag 1.

Wir haben nun jedoch das Problem, dass wir keinen Vektor $v \neq 0$ finden, der parallel zum abgebildeten Vektor v_D ist.

Da wir auch bemerkt haben, dass sich die Eigenwerte bis jetzt auf der Hauptdiagonale befunden haben, könnten wir auch 0 als möglichen Eigenwert erwarten. Das Problem hier ist jedoch, dass kein Vektor $v \neq 0$ auf den Nullvektor abgebildet wird. Es scheint hier der Fall aufzutreten, dass wir keinen Eigenwert beziehungsweise Eigenvektor finden. Kann das sein?

2.5 Matrix E

$$E = \begin{pmatrix} \frac{1}{2} & \frac{1}{2} \\ 1 & 1 \end{pmatrix}$$

Die Beschreibung dieser Abbildung ist womöglich die schwierigste, daher ein Tipp, der Ihnen hoffentlich weiterhilft:

Blenden Sie den Funktionsgraphen der Funktion $f(x) = 2x$ ein.

Der abgebildete Vektor v_E scheint an diese Funktion „angeheftet“ zu sein. Das heißt somit auch, dass ein Vektor, der in diese Richtung zeigt ein Eigenvektor sein wird. Und das ist er auch. Aber wir bemerken auch, dass der Vektor gestreckt wird. Da wir diesen Wert nicht schön ablesen können, werden wir versuchen, ob wir ihn berechnen können.

$$Ev = \begin{pmatrix} \frac{1}{2} & \frac{1}{2} \\ 1 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ 2x \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{3}{2}x \\ 3y \end{pmatrix} = \frac{3}{2} \begin{pmatrix} x \\ 2y \end{pmatrix}$$

Der Vektor $v = \begin{pmatrix} x \\ 2x \end{pmatrix}$ beschreibt alle Vektoren, deren y-Komponente das Doppelte der x-Komponente entspricht, also alle Vektoren, die auf der Geraden f liegen.

Wir haben somit den Eigenwert $\frac{3}{2}$ gefunden und den dazugehörigen Eigenvektor. Um vielleicht noch einen zweiten Eigenwert zu finden, wollen wir einen allgemeinen Vektor abbilden.

$$Ev = \begin{pmatrix} \frac{1}{2} & \frac{1}{2} \\ 1 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{1}{2}(x+y) \\ x+y \end{pmatrix}$$

Wie gehabt stehen x und y-Koordinate im Verhältnis 1:2. Außerdem sieht man, dass man für $x = -y$ den Nullvektor erhält. Wir sehen somit, dass der Vektor $v = \begin{pmatrix} x \\ -x \end{pmatrix}$ für $x \neq 0$ ein Eigenvektor zum Eigenwert 0 ist.

2.6 Figuren abbilden

Im Geogebra-File „Figuren abbilden“ können Sie sich ansehen wie eine beliebige 2×2 -Matrix auf einen Vektor \vec{v} wirkt. Dieser kann wie im File „Eigenwerte und Eigenvektoren finden“ verändert werden indem man den roten Punkt an seiner Spitze bewegt. Der abgebildete Vektor v_M ist blau dargestellt. Die Abbildungsmatrix wird zeilenweise eingegeben. Die Matrix

$$M = \begin{pmatrix} 1 & 2 \\ 3 & 4 \end{pmatrix}$$

wird im Eingabefeld Abbildungsmatrix auf folgende Weise geschrieben:

$$\{\{1, 2\}, \{3, 4\}\}$$

Mit Hilfe des Kontrollkästchens *Spur ein* können Sie angeben, ob der Verlauf der Vektorspitzen mitgezeichnet werden soll. Auf diese Weise können Sie Figuren zeichnen und sich ihre Abbildung ansehen. Um diese Zeichnung wieder zu löschen klicken Sie irgendwo auf das Koordinatensystem um bewegen Sie die Maus.

3 Eigenwerte berechnen

Wir haben im vorherigen Kapitel bereits gesehen, wie man auf Eigenwerte schließen kann. Jedoch funktioniert das anschauliche Bestimmen nur für 2×2 -Matrizen oder womöglich für 3×3 -Matrizen, die Abbildungen im dreidimensionalen Raum beschreiben. Doch wie bestimmen wir die Eigenwerte größerer Matrizen beziehungsweise auch komplexer Matrizen. Dazu wollen wir versuchen unsere Anfangsgleichung

$$Av = \lambda v$$

umzuformen und zu lösen. Wir können zuerst alle Terme auf eine Seite bringen.

$$Av - \lambda v = 0$$

Wir dürfen dabei nicht vergessen, dass A eine Matrix, v ein Vektor und λ ein Skalar ist. Daher müssen wir die Einheitsmatrix ergänzen, wenn wir v herausheben wollen.

$$(A - \lambda \mathbb{1})v = 0$$

Durch v dividieren dürfen wir nicht, da es keine Division bei Vektoren gibt. Damit diese Gleichung stimmt, muss einer der beiden folgenden Fälle erfüllt sein.

1. $v = 0$. Das ist jedoch ein sehr trivialer Fall. Wir wollen den Nullvektor als Eigenvektor verbieten, da er zu jeder Matrix Eigenvektor wäre und die Eigenwertgleichung somit auch für alle Zahlen erfüllt wäre.

2. $(A - \lambda \mathbb{1})v = 0$. Diesen Fall wollen wir uns nun genauer anschauen, da er uns dabei hilft Eigenwerte zu finden.

Die Matrix $\lambda \mathbb{1}$ besteht aus Nullen, nur die Elemente der Hauptdiagonalen sind λ . Wenn wir sie nun von der Matrix A abziehen, ändern sich lediglich die Hauptdiagonalelemente. Für eine 2×2 -Matrix

$$A = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \end{pmatrix}$$

bedeutet das

$$\begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} \lambda & 0 \\ 0 & \lambda \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a_{11} - \lambda & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} - \lambda \end{pmatrix}$$

Multiplizieren wir diese Gleichung mit dem Vektor v , so erhalten wir

$$(A - \lambda \mathbb{1})v = \begin{pmatrix} a_{11} - \lambda & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} - \lambda \end{pmatrix} \begin{pmatrix} v_x \\ v_y \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} (a_{11} - \lambda)v_x + a_{12}v_y \\ a_{21}v_x + (a_{22} - \lambda)v_y \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix}$$

Die letzten beiden Ausdrücke beschreiben ein Gleichungssystem, das zeilenweise gelöst werden kann. Die Unbekannten in diesem Gleichungssystem sind λ , v_x und v_y . Außerdem sind die beiden Gleichungen nicht linear. Das bedeutet, dass zwei Unbekannte nicht nur einzeln, sondern auch als Produkte voneinander auftreten. Ein solches Gleichungssystem zu lösen ist oft sehr schwierig. Es gibt allerdings einen einfachen Trick, der durch folgende Überlegung zustande kommt.

Die Matrix $(A - \lambda \mathbb{1})$ darf nicht invertierbar sein. Denn wenn sie invertierbar wäre, würde man durch Multiplikation mit der Inversen $v = 0$ erhalten, was wir für Eigenvektoren bereits ausgeschlossen haben. Für nicht invertierbare Matrizen verschwindet die Determinante. Wir können die Eigenwerte somit finden, indem wir

$$\det(A - \lambda \mathbb{1}) = 0 \tag{1}$$

lösen. Diese Gleichung entspricht dem Auffinden der Nullstellen eines Polynoms. Eine 2×2 -Matrix hat somit stets zwei komplexe Eigenwerte. Die Determinante aus Gleichung (1) ergibt:

$$\det(A - \lambda \mathbb{1}) = (a_{11} - \lambda) \cdot (a_{22} - \lambda) - a_{21} \cdot a_{12}$$

Man kann sich für 2×2 -Matrizen merken: „Hauptdiagonale minus Nebendiagonale“. Dadurch entsteht ein Polynom, das wir **charakteristisches Polynom** nennen. Um die Berechnung zu veranschaulichen und mögliche Fälle, die bei der Eigenwertberechnung auftreten können, zu diskutieren, wollen wir uns einige Beispiele aus dem letzten Kapitel ansehen.

3.1 Matrix B - Spiegelung um die x-Achse

$$B = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

Für die Determinante der Matrix $B - \lambda \mathbb{1}$ erhält man:

$$\det(B - \lambda \mathbb{1}) = \det \begin{pmatrix} 1 - \lambda & 0 \\ 0 & -1 - \lambda \end{pmatrix} = (1 - \lambda)(-1 - \lambda)$$

Aus dem Produkt-Null-Satz¹ erkennen wir leicht, dass $\lambda = 1$ beziehungsweise $\lambda = -1$ gilt. Zu diesem Ergebnis sind wir auch durch unsere geometrischen Überlegungen gekommen.

3.2 Matrix A - Streckung um den Faktor 2

$$A = \begin{pmatrix} 2 & 0 \\ 0 & 2 \end{pmatrix}$$

Wir wollen nun wieder das charakteristische Polynom aufstellen. Es ergibt sich durch:

$$\det(A - \lambda \mathbb{1}) = \det \begin{pmatrix} 2 - \lambda & 0 \\ 0 & 2 - \lambda \end{pmatrix} = (2 - \lambda)^2$$

Das charakteristische Polynom hat nun eine doppelte Nullstelle bei $\lambda = 2$. Wir haben bereits durch die geometrische Überlegung gesehen, dass 2 ein Eigenwert sein muss. Auch die Vielfachheit eines Eigenwerts wird später von Bedeutung sein.

3.3 Matrix D -Drehung um 90° im Uhrzeigersinn

Bei der Drehung um 90° haben wir keinen Eigenwert gefunden. Wir wollen uns nun ansehen, wie das charakteristische Polynom in diesem Fall aussieht. Die einzige Vermutung war, dass wenn es einen Eigenwert gibt, dieser Betrag 1 haben muss. Zur Erinnerung:

$$D = \begin{pmatrix} 0 & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$$

Wir beginnen mit der Berechnung des charakteristischen Polynoms

$$\det(D - \lambda \mathbb{1}) = \det \begin{pmatrix} 0 - \lambda & -1 \\ 1 & 0 - \lambda \end{pmatrix} = (-\lambda)^2 + 1$$

Nun müssen wir die Nullstellen dieses Polynoms finden, indem wir die Gleichung

$$(-\lambda)^2 + 1 = 0$$

¹Das Produkt zweier Zahlen ist nur dann 0, wenn zumindest eine der beiden 0 ist.

lösen. Diese Gleichung ist gleichbedeutend mit

$$\lambda^2 = -1$$

Wir erhalten die Lösungen $\lambda = i$ und $\lambda = -i$. Eigenwerte können auch komplex sein. Geometrisch können wir uns diese leider nicht mehr vorstellen. In diesem Fall erscheint uns das Ergebnis durchaus logisch, wenn wir einen Vergleich mit der komplexen Zahlenebene wagen. Ein Vektor, der entlang der x-Achse gerichtet ist, wird auf einen Vektor entlang der y-Achse abgebildet und seine Länge bleibt unverändert. In der Gaußschen Zahlenebene entspricht die y-Achse dem imaginiären Anteil einer Zahl. Diese Vorstellung hinkt allerdings auch in manchen Punkten, weshalb wir ihr keine zu große Bedeutung zukommen lassen wollen.

Wir haben gesehen, dass alle Lösungsfälle quadratischer Gleichungen auch als mögliche Fälle von Eigenwerten auftreten können.

4 Eigenvektoren berechnen

Im letzten Kapitel haben wir besprochen, wie man die Eigenwerte berechnen kann. Nun wollen wir uns an die Eigenvektoren wagen. Wichtig ist, dass ein Eigenvektor immer zu einem bestimmten Eigenwert gehört. Daher können wir jenes λ , das wir bei der Berechnung der Eigenwerte erhalten haben direkt einsetzen. Wenn es zwei verschiedene Eigenwerte gibt suchen wir die Eigenvektoren der Reihe nach, wie in den anschließenden Beispielen zu sehen ist.

Wir beginnen wie gehabt mit der Eigenwertgleichung

$$(A - \lambda \mathbb{1})v = 0$$

Da wir die Eigenwerte λ bereits kennen, handelt es sich bei $A - \lambda \mathbb{1}$ um eine bekannte Matrix. Um nun die Eigenvektoren zu berechnen, müssen wir nur noch das Gleichungssystem lösen, das uns die Eigenwertgleichung vorgibt. Wir werden zu den Beispielen aus dem letzten Kapitel nun auch die Eigenvektoren berechnen.

4.1 Matrix B - Spiegelung um die x-Achse

$$B = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

Wir beginnen nun mit dem ersten Eigenwert $\lambda_1 = 1$. Für diesen Eigenwert müssen wir das folgende Gleichungssystem lösen:

$$(B - \lambda_1 \mathbb{1})v = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & -2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix}$$

Da wir ja eine ganze Schar an Eigenvektoren bekommen (alle, die in eine bestimmte Richtung zeigen) ist dieses Gleichungssystem nie eindeutig lösbar. Sollte es also doch eindeutig lösbar sein, weiß man, dass man sich verrechnet hat. Das Gleichungssystem kann durch Multiplikation der Matrix und des Vektors auch in nachstehender Form geschrieben werden.

$$\begin{aligned} 0x + 0y &= 0 \\ 0x - 2y &= 0 \end{aligned}$$

Die erste Gleichung stimmt für alle x und alle y . Die zweite Gleichung gibt vor, dass $y = 0$ gelten muss. Daher sind alle Vektoren der Form $\begin{pmatrix} x \\ 0 \end{pmatrix}$ Eigenvektoren. Üblicherweise gibt man einen Vertreter dieser Schar an. Meist entscheidet man sich für den Einheitsvektor. Der Eigenvektor zum Eigenwert $\lambda_1 = 1$ ist

$$v_1 = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$$

Das Berechnen des zweiten Eigenvektors funktioniert analog. Wir berechnen nun den Eigenvektor zum Eigenwert $\lambda_2 = -1$.

$$(B - \lambda_2 \mathbb{1})v = \begin{pmatrix} 2 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix}$$

Das zu lösende Gleichungssystem ist somit:

$$\begin{aligned} 2x + 0y &= 0 \\ 0x + 0y &= 0 \end{aligned}$$

Hier muss nun wegen der ersten Gleichung $x = 0$ gelten. Für y gibt es nun keine Einschränkungen. Wir entscheiden uns auch hier für einen Einheitsvektor. Der Einheitsvektor zum Eigenwert $\lambda_2 = -1$ ist

$$v_2 = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

Diese beiden Eigenvektoren haben wir bereits aus unseren geometrischen Überlegungen erhalten.

4.2 Matrix A - Streckung um den Faktor 2

$$A = \begin{pmatrix} 2 & 0 \\ 0 & 2 \end{pmatrix}$$

Wir haben bereits gesehen, dass nur der Eigenwert 2 auftritt, da jeder Vektor verdoppelt wird. Somit sollte auch mathematisch jeder Vektor Eigenvektor sein. Wir setzen $\lambda = 2$ in die Eigenwertgleichung ein und erhalten:

$$(A - \lambda \mathbb{1})v = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix}$$

Man erkennt sofort, dass diese Gleichung für jeden Vektor v erfüllt ist. Doch wie entscheiden wir, welche Eigenvektoren wir exemplarisch für alle anderen angeben wollen? Da der Eigenwert λ die Vielfachheit 2 besitzt wollen wir zwei linear unabhängige Eigenvektoren angeben. Wir entscheiden uns für die bereits bekannten Basisvektoren

$$v_1 = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$$

und

$$v_2 = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

4.3 Matrix D - Drehung um 90° gegen den Uhrzeigersinn

$$D = \begin{pmatrix} 0 & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$$

Wir beginnen mit dem ersten Eigenwert $\lambda_1 = i$. Für komplexe Eigenwerte gehen wir genauso vor wie für reelle, müssen jedoch auf die Rechenregeln für komplexe Zahlen achten.

$$(D - \lambda_1 \mathbb{1})v = \begin{pmatrix} -i & -1 \\ 1 & -i \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix}$$

Man sieht, dass die zweite Zeile das i -fache der ersten Zeile der Matrix ist. Somit ist eine eindeutige Lösung auch hier ausgeschlossen. Das zugehörige Gleichungssystem hier wäre

$$\begin{aligned} -ix - 1y &= 0 \\ 1x - iy &= 0 \end{aligned}$$

Aus jeder der beiden Gleichungen folgt für sich

$$y = -ix$$

Jeder Vektor für den dieser Zusammenhang zwischen seinen Koordinaten gilt ist Eigenvektor. Am leichtesten findet man einen solchen, wenn man für $x = 1$ setzt. Man erhält durch normieren den folgenden Eigenvektor zum Eigenwert $\lambda_1 = i$:

$$v_1 = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ -i \end{pmatrix}$$

Jedes komplexe Vielfache dieses Vektors ist ebenfalls ein Eigenvektor.

Wir wollen nun auch die Eigenvektoren zum Eigenwert $\lambda_2 = -i$ berechnen. Dazu setzen wir diesen Eigenwert in die Eigenwertgleichung ein.

$$(D - \lambda_2 \mathbf{1})v = \begin{pmatrix} i & -1 \\ 1 & i \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix}$$

Hier ist nun die zweite Zeile das $-i$ -fache der ersten Zeile. Als Gleichungssystem geschrieben ergibt sich:

$$\begin{aligned} ix - 1y &= 0 \\ 1x + iy &= 0 \end{aligned}$$

Jede Gleichung für sich umgeformt, ergibt

$$ix = y$$

Wenn wir $x = 1$ setzen, erhält man als normierten Eigenvektor zum Eigenwert λ_2

$$v_1 = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ i \end{pmatrix}$$

Man könnte auch hier jedes andere Zahlenpaar verwenden, dass obiges Gleichungssystem löst (Ü2).

5 Der Eigenraum

Wir haben in den letzten Kapiteln bereits gesehen, dass wir eine Schar an Eigenvektoren bekommen. Diese Schar wollen wir nun etwas genauer als nur durch einen Vertreter angeben. Wir werden dafür den jeweiligen Untervektorraum angeben. Das bedeutet, dass wir alle Vielfachen des Vektors beschreiben wollen. Doch zuerst werden wir uns über den Begriff **Untervektorraum** Gedanken machen.

Im Baustein „Vektoren“ haben wir bereits besprochen worum es sich bei einem Vektorraum handelt. Ein Untervektorraum erfüllt für sich selbst genau dieselben Axiome wie der Vektorraum. Wichtig ist, dass man durch Addition und skalarer Multiplikation den Untervektorraum nicht verlassen kann. Der Untervektorraum hat im Allgemeinen eine kleinere Dimension als der ursprüngliche Vektorraum.

Wir kennen Untervektorräume bereits aus der Schule, haben sie dort jedoch nicht als solche bezeichnet. Beispielsweise ist eine Ebene (die den Ursprung enthält) ein

Untervektorraum des \mathbb{R}^3 . Wenn wir zwei Vektoren dieser Ebene addieren oder mit Skalaren multiplizieren, wird auch der resultierende Vektor Teil der Ebene sein. Um sich das zu veranschaulichen zeichnen Sie zwei beliebige Vektoren auf ein Blatt Papier. Addieren Sie diese beiden Vektoren graphisch, wie wir es auch im Baustein „Vektoren“ gemacht haben. Sie werden sehen, dass auch der neue Vektor auf dem Papier ist und nicht etwa im Raum schwebt. Dasselbe gilt auch für die Multiplikation eines Vektors mit einem Skalar. Man verlässt nie die Gerade auf der der ursprüngliche Vektor lag. Vergleichen Sie dies mit der Parameterdarstellung einer Geraden beziehungsweise einer Ebene, wie Sie, sie in der Schule gelernt haben. Diese Eigenschaft wird **Abgeschlossenheit** genannt.

Wir werden die formale Definition des Untervektorraums hier weglassen. Allerdings wollen wir die für uns wichtigsten (Unter-)vektorräume zusammenfassen:

- *Dimension 0*: Dieser Vektorraum besteht nur aus dem Nullvektor. Er ist Untervektorraum jedes anderen Vektorraums. Da wir den Nullvektor als Eigenvektor ausgeschlossen haben, werden wir diesen Fall hier nicht mehr weiter betrachten.
- *Dimension 1*: Unter einem eindimensionalen (Unter-)vektorraum versteht man einen Vektorraum, der durch nur einen Vektor aufgespannt wird. Daher besteht die Basis hier aus nur einem Vektor. Jede Gerade, die durch den Nullpunkt geht kann auf diese Weise beschrieben werden.
- *Dimension 2*: Bei einem zweidimensionalen (Unter-)vektorraum handelt es sich um eine Ebene, die den Nullpunkt beinhaltet. Eine solche Ebene wird durch zwei Vektoren aufgespannt, sie besitzt somit eine Basis aus zwei Elementen.
- *Dimension 3 (und höher)*: Der dreidimensionale Untervektorraum wird von drei Basisvektoren aufgespannt. Auch dieser muss den Ursprung enthalten um als Untervektorraum eines beispielsweise 4-dimensionalen Vektorraums in Frage zu kommen. Mathematisch gesehen kann man auch noch höhere Räume und deren Untervektorräume betrachten.

Anstelle eines bestimmten Eigenvektors wollen wir nun die Eigenräume angeben. Da wir größtenteils 2×2 -Matrizen betrachtet haben werden die Untervektorräume Geraden oder Ebenen sein.

5.1 Matrix B - Spiegelung um die x-Achse

Wir haben bereits die Eigenwerte sowie die Eigenvektoren berechnet. Nun wollen wir zu jedem der Eigenwerte auch die Eigenräume angeben. Für $\lambda_1 = 1$ ist der

zugehörige Eigenraum

$$E_B(\lambda_1) = \left\{ t_1 \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \mid t_1 \in \mathbb{R} \right\}$$

Ein solcher Eigenraum wird als Gerade verstanden. Die Form ähnelt auch der aus der Schule bekannten Parameterdarstellung

$$X = P + t \cdot v$$

für Geraden. Da wir im Gegensatz zur analytischen Geometrie nur Geraden erlauben, die durch den Ursprung verlaufen, ist der Punkt P der Nullpunkt und wird daher weggelassen. Außerdem geht es uns vorrangig um die Gerade selbst und nicht um die Punkte, die auf ihr liegen, weshalb wir auch den Punkt X nicht anschreiben. Es handelt sich somit um eine sehr verkürzte Geradengleichung.

Für den Eigenwert $\lambda_2 = -1$ haben wir den Eigenraum

$$E_B(\lambda_2) = \left\{ t_2 \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \mid t_2 \in \mathbb{R} \right\}$$

gefunden. Auch dieser entspricht einer Geraden.

Unsere beiden Eigenräume spannen die x-Achse beziehungsweise die y-Achse auf. Gemeinsam, dass heißt würden wir sie addieren, spannen sie daher die gesamte Ebene auf. Wir sagen die Matrix B besitzt eine Basis aus Eigenvektoren. Wir werden in späteren Bausteinen noch darauf zu sprechen kommen.

5.2 Matrix A - Streckung um den Faktor 2

In diesem Fall hatten wir nur einen Eigenwert $\lambda = 2$. Zu diesem Eigenwert hatten wir zwei linear unabhängige, also nicht parallele, Eigenvektoren gefunden. Jede Linearkombination der beiden Vektoren ist wieder ein Eigenvektor. Wir spannen durch den Eigenraum

$$E_A(\lambda) = \left\{ t_1 \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} + t_2 \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \mid t_1, t_2 \in \mathbb{R} \right\}$$

die gesamte Ebene auf. Diese Darstellung ist nun vergleichbar mit der aus der Schule bekannten Ebenengleichung in Parameterdarstellung

$$X = P + t \cdot v_1 + s \cdot v_2$$

Dabei werden dieselben Vereinfachungen für X und P verwendet, die wir bereits oben besprochen haben. Da ohnehin jeder Vektor Eigenvektor ist, können wir leicht eine Basis aus Eigenvektoren aufstellen.

5.3 Matrix D - Drehung um 90° gegen den Uhrzeigersinn

Wir hatten hier zwei komplexe Eigenwerte und auch komplexe Eigenvektoren erhalten. Abgesehen davon funktioniert das Aufstellen der Eigenräume analog zur Matrix B. Der Eigenraum zum Eigenwert $\lambda_1 = i$ ist

$$E_D(\lambda_1) = \left\{ \frac{t_1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ -i \end{pmatrix} \mid t_1 \in \mathbb{C} \right\}$$

und der Eigenraum zum Eigenwert $\lambda_2 = -i$

$$E_D(\lambda_2) = \left\{ \frac{t_2}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ i \end{pmatrix} \mid t_2 \in \mathbb{C} \right\}$$

Wir haben gesehen, dass auch die Vielfachheit eines Eigenwerts von Bedeutung ist. So kann der entsprechende Eigenraum eine Gerade oder auch eine Ebene bilden.

Übungsaufgaben



Ü1 Beschreiben Sie wie sich die Eigenvektoren von B_y verhalten.

Ü2 Überprüfen Sie, ob die Eigenvektoren der Matrix D bezüglich des komplexen Skalarprodukts aufeinander normal stehen.

Ü3 Berechnen Sie die Eigenwerte sowie die Eigenvektoren der Matrix $M = 2 \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ \frac{1}{4} & 1 \end{pmatrix}$.

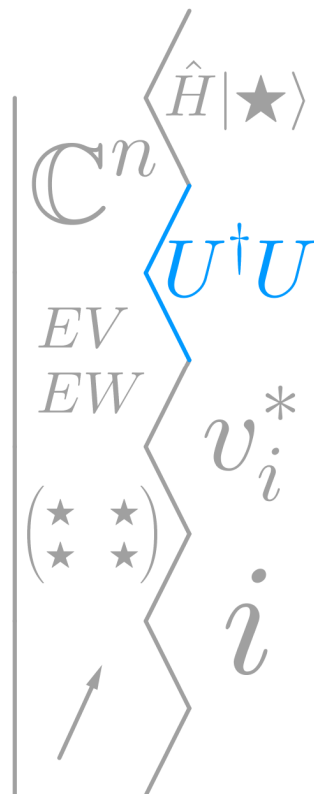
*Ü4 Berechnen Sie die Eigenwerte der Matrix $M = \begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 \\ 4 & 5 & 6 \\ 7 & 8 & 9 \end{pmatrix}$.

Ü5 Berechnen Sie die Eigenwerte, sowie die Eigenvektoren der Matrix $M = \begin{pmatrix} -1 & 1 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$.
Was fällt Ihnen bei der Berechnung der Eigenvektoren auf?

Die mit Stern (*) gekennzeichnete Aufgabe ist eine Zusatzaufgabe und erfordert die Kenntnis darüber, wie man die Determinante einer 3×3 -Matrix berechnet.

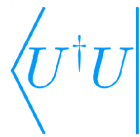
Familie Matrix

18. März 2019



Dieser Baustein widmet sich den vielen verschiedenen und zunächst unübersichtlichen Eigenschaften, die Matrizen aufweisen. Es ist wichtig diese Eigenschaften bestimmen zu können, da damit viele verschiedene physikalische Zusammenhänge verstanden werden können. Besonders wichtig werden uns die Begriffe „unitär“ und „hermitesch“ sein. Beispielsweise kann eine beobachtbare Größe durch eine hermitesche Operator (u.a. eine Matrix) beschrieben werden. Außerdem bietet der Baustein wichtige Erkennungsmerkmale für bestimmte Eigenschaften.

Einstiegsbeispiele



- E1 Berechnen Sie $A^5 = A \cdot A \cdot A \cdot A \cdot A$ für die Matrix $A = \begin{pmatrix} 2 & 0 \\ 0 & 2 \end{pmatrix}$.
- E2 Berechnen Sie A^5 für die Matrix $A = \begin{pmatrix} 1 & 2 \\ 2 & 1 \end{pmatrix}$.
- E3 Berechnen Sie das Matrixexponential der Einheitsmatrix e^1 .
- E4 Berechnen Sie das Matrixexponential der Matrix $M = \begin{pmatrix} 1 & 2 \\ 2 & 1 \end{pmatrix}$, also e^M .
- E5 Berechnen Sie für die Matrix M aus Aufgabe E4 $\sin\left(\frac{\pi}{2}M\right)$.
- E6 Überprüfen Sie, ob M aus Aufgabe E4 symmetrisch oder orthogonal ist. Handelt es sich bei dieser Matrix um eine Projektion?
- E7 Überprüfen Sie, ob die Matrix $M = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} i & i \\ i & i \end{pmatrix}$ unitär oder hermitesch ist. Handelt es sich bei dieser Matrix um eine Projektion?

Die nachstehenden Eigenschaften beziehen sich nur auf 2×2 -Matrizen. Es gibt Matrizen, die keine der Eigenschaften erfüllen.

Es gibt auch eine gewisse Hierarchie unter den Matriceigenschaften. Auf diese Hierarchien soll, soweit sie für die Physik wichtig ist, eingegangen werden. Außerdem soll immer wieder ein Bogen zur Quantenmechanik gezogen werden.

1 Diagonalisierbare Matrizen und Basiswechsel

In diesem Kapitel wollen wir uns darüber Gedanken machen, wie man mit Matrizen operieren kann. Wir werden sehen, dass uns das Diagonalisieren dabei helfen kann. Wie der Name bereits vermuten lässt, wollen wir eine beliebige Matrix auf eine Diagonalgestalt

$$\begin{pmatrix} \star & 0 \\ 0 & \star \end{pmatrix}$$

bringen. Wie die Aufgaben E1 und E2 bereits gezeigt haben lässt sich mit solchen Matrizen viel einfacher hantieren. Sehen Sie sich das Ergebnis von der Aufgabe E1 noch einmal genau an. Es würde ausreichen die Elemente der Hauptdiagonalen mit 5 zu potenzieren um auf das richtige Ergebnis zu kommen (Ü1).

Jetzt stellt sich allerdings die Frage, wie wir eine beliebige Matrix in diese Form bringen oder ob das überhaupt möglich ist. In vergangenen Bausteinen haben wir bereits einiges über Abbildungen gelernt und vor allem auch, dass diese durch Matrizen beschrieben werden können. Wir müssen ein Problem daher richtig anschauen. Dazu ein Do-it-yourself Experiment. Bitte lesen Sie diesen Text.

Law, MIT-Press 1967, Kapitel 6

steht Quantenmechanik." - Richard Feynman, The Character of Physical
gab. Auf der anderen Seite denke ich, es ist sicher zu sagen, niemand ver-
die Relativitätstheorie. Ich glaube nicht, dass es jemals eine solche Zeit
"Es gab eine Zeit, als Zeitungen sagten, nur zwölf Menschen verstanden

Haben Sie den Text versucht auf dem Kopf stehend zu lesen oder haben Sie ihr Blatt auf den Kopf gestellt? Beides ist natürlich eine zulässige Vorgehensweise, jedoch wird es für viele Personen einfacher sein das Blatt zu drehen. Mathematisch gesehen haben Sie mit dieser Strategie einen Basiswechsel durchgeführt. Sie haben Ihr Problem um 180° gedreht um es zu vereinfachen. Für viele physikalisch relevante Problemstellungen können Sie ein System finden, indem sich dieses Problem wesentlich vereinfacht. In vielen dieser Fälle kann uns ein Basiswechsel dabei helfen. Wir

wollen hier nur die für uns wichtigen Endergebnisse besprechen. Dem interessierten Leser wird dabei ein Buch zur Linearen Algebra empfohlen.

Die Fragestellung lautet nun, wie wir eine gegebene Matrix A , die eine Abbildung beschreibt in zwei verschiedenen Basen $B = \{b_1; b_2\}$ und $B' = \{b'_1; b'_2\}$ darstellen können. Der Einfachheit halber beschreiben wir dies anhand eines Beispiels. Dazu betrachten wir die beiden Basen

$$B = \left\{ \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}; \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \right\}$$

und

$$B' = \left\{ \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}; \begin{pmatrix} -1 \\ 0 \end{pmatrix} \right\}.$$

Ein beliebiger Vektor kann sowohl in der Basis B als auch in der Basis B' eindeutig dargestellt werden (Ü2). Auch die Matrix A hängt von der jeweils verwendeten Basis ab, wobei der Zusammenhang

$$A' = S^{-1}AS$$

gilt. Die Matrix S wechselt dabei von der Basis B zur Basis B' und die Matrix S^{-1} von der Basis B' zur Basis B . In unserem angegebenen Beispiel ist das Finden dieser Matrix S sehr einfach, da die Basis B' um 90° gedreht zur Basis B ist. Es gilt daher

$$S = \begin{pmatrix} 0 & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}.$$

Durch invertieren der Matrix S erhält man

$$S^{-1} = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix}.$$

Wir haben gesehen, dass die Standardbasis oft nicht die zweckmäßigste ist und wissen jetzt auch, wie wir zwischen Basen wechseln können. Doch wie finden wir die Basis in der unser Problem am Besten beschrieben werden kann. Zum Rechnen haben wir gesehen, dass es am besten ist, wenn eine Matrix Diagonalgestalt hat. Sehen wir uns daher das folgende Beispiel an.

Wir wollen den Einheitskreis abbilden. Dazu betrachten wir die Abbildungsmatrix

$$A = \begin{pmatrix} 1 & 2 \\ 2 & 1 \end{pmatrix}. \quad (1)$$

Diese bildet den Kreis auf eine Ellipse ab (Abbildung 1). Wie kann man diese Ellipse nun am besten darstellen. Da die Hauptachse der Ellipse nicht auf der x-Achse liegt

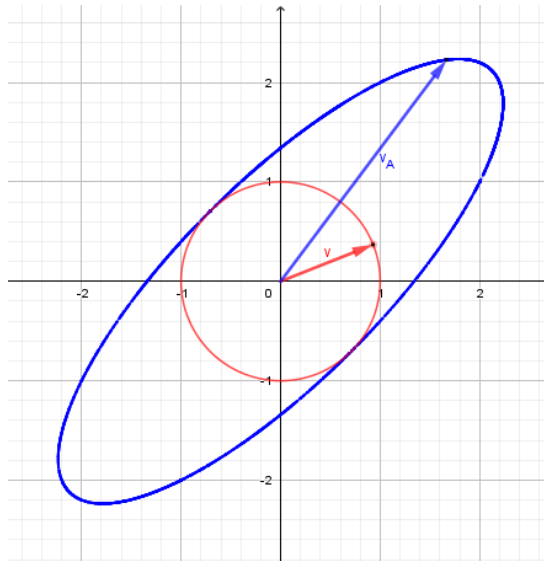


Abbildung 1: Hier sieht man das Bild des Einheitskreises unter der Abbildung, die durch die Matrix A beschrieben wird.

ist wohl die Standardbasis nicht die einfachste. Wir wollen Basisvektoren, die entlang der Haupt- beziehungsweise Nebenachse ausgerichtet sind. Aus dem Baustein „Eigenwerte und Eigenvektoren“ wissen wir bereits, dass das genau die Eigenvektoren sind. Da wir von der Standardbasis ausgegangen sind ist es relativ einfach die Basiswechsellmatrix aufzustellen, denn sie enthält spaltenweise nur die neuen Basisvektoren. In unserem Fall sind das gerade die (normierten) Eigenvektoren:

$$S = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & -1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix}$$

Invertieren wir diese Matrix, so erhalten wir

$$S^{-1} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ -1 & 1 \end{pmatrix}$$

Wir wollen die Abbildungsmatrix A nun in dieser Basis darstellen und verwenden dazu Gleichung (1). Daraus erhalten wir die Matrix (Ü3)

$$A' = \begin{pmatrix} 3 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}. \quad (2)$$

Wir erkennen sofort, dass wir auf diese Weise eine Diagonalmatrix gefunden haben. Man kann leicht nachrechnen, dass sie die Eigenwerte der Matrix A enthält. Dieses Verfahren heißt **Diagonalisieren**.

Wir können eine Matrix A in der Form

$$A = SDS^{-1}$$



darstellen. Dabei beinhaltet die Diagonalmatrix D die Eigenwerte und die Matrix S die Eigenvektoren.

Wir müssen uns nun noch fragen, ob dieses Verfahren immer funktioniert. Wir haben einige Fälle kennengelernt, welche bei der Berechnung von Eigenvektoren auftreten können. Die Matrix S muss auf jeden Fall invertierbar sein. Da sie die Eigenvektoren enthält muss es daher möglich sein, aus solchen eine entsprechende Matrix zu kreieren. Für zweidimensionale Matrizen A gilt daher, dass wir auf jeden Fall zwei Eigenvektoren brauchen. Allgemein kann man diese Forderung folgendermaßen formulieren

Die Matrix A ist genau dann diagonalisierbar, wenn ihre geometrische und algebraische Vielfachheit übereinstimmt.



Wir müssen daher noch die Begriffe der Vielfachheit klären:

- **algebraische Vielfachheit:** Man versteht darunter, wie häufig eine bestimmte Nullstelle im charakteristischen Polynom vorkommt.
- **geometrische Vielfachheit:** Dieser Begriff gibt die Dimension des Eigenraums an. Sie liegt zwischen 1 und der algebraischen Vielfachheit eines Eigenwerts.

Funktionen von Matrizen

Mit diesem Wissen ausgestattet können wir noch einmal darüber nachdenken, wie man das Berechnen von Potenzen von Matrizen vereinfachen kann. Wir gehen von einer diagonalisierbaren Matrix A aus. Man kann A daher folgendermaßen schreiben:

$$A = SDS^{-1}$$

Davon ausgehend kann A^2 wie nachstehend geschrieben werden:

$$A^2 = (SDS^{-1})(SDS^{-1}) = SD^2S^{-1}$$

Dies gilt für alle Potenzen von A .

Wir wollen uns im folgenden auch fragen, ob und vor allem wie wir Funktionen auf Matrizen anwenden können. Den Anfang soll die Exponentialfunktion machen. Wir kennen die Taylorreihenentwicklung reeller Funktionen:

$$e^x = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{1}{k!} x^k$$

Ganz analog definieren wir für eine Matrix A das Matrixexponential

$$e^A := \sum_{k=0}^{\infty} \frac{1}{k!} A^k$$

Das können wir berechnen, da wir ja schon wissen, wie man Matrizen potenziert. Allerdings kann die Berechnung über die Definition sehr zeitaufwendig sein, weshalb wir uns im folgenden Gedanken darüber machen, wie wir diesen Vorgang vereinfachen können.

Beginnen wir dazu mit dem Matrixexponential einer Diagonalmatrix.

$$e \begin{pmatrix} a & 0 \\ 0 & b \end{pmatrix} = \exp \begin{pmatrix} a & 0 \\ 0 & b \end{pmatrix} = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{1}{k!} \begin{pmatrix} a & 0 \\ 0 & b \end{pmatrix}^k$$

Aus der Übungsaufgabe Ü1 wissen wir bereits, dass

$$\begin{pmatrix} a & 0 \\ 0 & b \end{pmatrix}^k = \begin{pmatrix} a^k & 0 \\ 0 & b^k \end{pmatrix}$$

gilt. Auch den Vorfaktor können wir in die Matrix multiplizieren und da wir wissen, dass man Matrizen komponentenweise addiert, kann man sich leicht überzeugen, dass

$$\exp \begin{pmatrix} a & 0 \\ 0 & b \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \sum_{k=0}^{\infty} \frac{1}{k!} a^k & 0 \\ 0 & \sum_{k=0}^{\infty} \frac{1}{k!} b^k \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} e^a & 0 \\ 0 & e^b \end{pmatrix}$$

gilt. In diesem Fall darf man das Exponential somit in die Matrix ziehen.

Auch für diagonalisierbare Matrizen ist dies ähnlich einfach:

$$e^A = S e^D S^{-1}$$

Für unsere Zwecke reicht es aus, Funktionen diagonalisierbarer Matrizen zu berechnen. Auch die trigonometrischen Funktionen Sinus und Kosinus können auf Matrizen angewendet werden. Dies funktioniert analog zur Exponentialfunktion

Für diagonalisierbare Matrizen können die folgenden Matrixfunktionen vereinfacht berechnet werden:

- $e^A = Se^D S^{-1}$
- $\sin A = S \sin(D) S^{-1}$
- $\cos A = S \cos(D) S^{-1}$

⟨uv⟩

2 Normale Matrizen

Eine reelle quadratische Matrix A wird normal genannt, wenn

$$A^T A = A A^T$$

Für komplexe Matrizen gilt in diesem Fall

$$A^\dagger A = A A^\dagger$$

⟨uv⟩

Normale Matrizen haben die folgenden Eigenschaften:

1. Normale Matrizen kommutieren mit ihrer Adjungierten/Transponierten.
2. Eine Matrix ist genau dann normal, wenn sie unitär diagonalisierbar ist. Das bedeutet, dass sie diagonalisierbar ist und die Matrix S unitär ist.
3. Reelle symmetrische beziehungsweise komplexe hermitesche Matrizen sind normal.
4. Normale Matrizen sind genau diejenigen, die eine Orthonormalbasis aus Eigenvektoren besitzen.

3 Unitäre und orthogonale Matrizen

Diese beiden Definitionen haben wir bereits bei den „Matrizen“ beziehungsweise bei den „Komplexen Vektoren“ kennengelernt und bemerkt, dass sie sich in vielen Dingen ähnlich sehen. Zur Erinnerung sind nachstehend noch einmal beide Eigenschaften angeführt:

Eine reelle und quadratische Matrix A wird orthogonal genannt, wenn

$$A^T A = A A^T = \mathbb{1}$$

gilt. Aus dieser Bedingung kann man leicht ableiten, dass auch

$$A^T = A^{-1}$$

erfüllt ist.



Eine komplexe und quadratische Matrix A wird unitär genannt, wenn

$$A^\dagger A = A A^\dagger = \mathbb{1}$$

gilt. Aus dieser Bedingung kann man leicht ableiten, dass auch

$$A^\dagger = A^{-1}$$

erfüllt ist.



Durch den Vergleich dieser Definitionen sehen wir, dass alle orthogonalen Matrizen auch unitär sind. Es gibt allerdings orthogonale Matrizen, die nicht unitär sind. Es gilt somit:

$$A \text{ ist orthogonal} \Rightarrow A \text{ ist unitär}$$

Sollte Ihnen diese Aussage nicht sofort klar sein, denken Sie noch einmal darüber nach, dass adjungieren und transponieren bei reellen Matrizen gleichbedeutend ist. Das Arbeiten mit unitären Matrizen bringt einen weiteren bedeutenden Vorteil. Es ist manchmal mit viel Arbeit verbunden Matrizen zu invertieren. Die Inverse einer Matrix benötigen wir allerdings oft für das Wechseln von einer Basis in eine andere.

4 Hermitesche und symmetrische Matrizen

Ein ähnlicher Zusammenhang wie jenen den die unitären und die orthogonalen Matrizen aufweisen kann auch für die hermiteschen und symmetrischen Matrizen aufgestellt werden.

Eine quadratische Matrix A wird symmetrisch genannt, wenn

$$A = A^T$$



gilt.

Eine komplexe und quadratische Matrix A wird hermitisch genannt, wenn

$$A = A^\dagger$$



gilt.

Da wir im Allgemeinen immer mit komplexen Zahlen rechnen, werden wir eher die zweite dieser Definitionen benötigen. Oft verwendet man auch den Begriff der **selbst-adjungierten** Matrix, der im reellen Fall der ersten und im komplexen Fall der zweiten Definition entspricht.

Wir wollen hier einige wichtige Eigenschaften von hermiteschen Matrizen besprechen.

1. Hermitesche Matrizen haben nur reelle Eigenwerte. Da die Eigenwerte den Erwartungswerten entsprechen bedeutet das, dass wir durch die Verwendung von hermiteschen Operatoren nur reelle Messergebnisse erhalten. Eine sehr wünschenswerte Eigenschaft für die Physik.
2. Hermitesche Matrizen sind normal. Überlegen Sie sich warum?
3. Hermitesche Matrizen sind stets unitär diagonalisierbar. Das bedeutet, dass jede hermitesche Matrix A in der Form $A = UDU^\dagger$ geschrieben werden kann. Dabei ist U eine unitäre Matrix und D eine Diagonalmatrix. Die Vorteile dieser Darstellung haben wir im ersten Kapitel dieses Bausteins bereits besprochen.

5 Projektionen

Ein weiterer wichtiger Begriff soll zu guter Letzt noch besprochen werden. Die sogenannte Projektion.

Eine Matrix P wird Projektion genannt, wenn

$$P \cdot P = P$$



gilt.

Beginnen wir wieder mit einem einfachen Beispiel, das veranschaulichen soll, wie eine Projektion wirkt. Betrachten wir das Bild der Matrix (Ü5)

$$P = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix} \quad (3)$$

Sie können im File „Figuren abbilden“ versuchen selbst herauszufinden, wie diese Matrix wirkt. In Abbildung 2 ist zu sehen, wie der Einheitskreis unter dieser Abbildung aussieht. Man sieht beziehungsweise kann berechnen, dass die Eigenwerte der

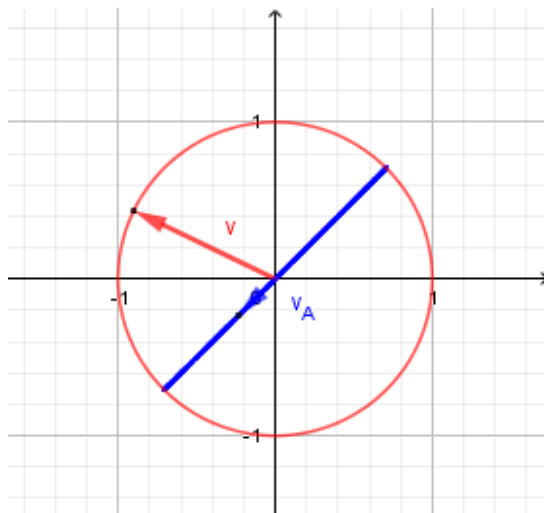


Abbildung 2: Hier sieht man das Bild des Einheitskreises unter der Abbildung, die durch die Projektionsmatrix P beschrieben wird.

Matrix P $\lambda_1 = 0$ und $\lambda_2 = 1$ sind. Die Eigenvektoren dazu sind $\vec{v}_1 = \left(\frac{-1}{\sqrt{2}} \quad \frac{1}{\sqrt{2}} \right)^T$ zum Eigenwert λ_1 und $\vec{v}_2 = \left(\frac{1}{\sqrt{2}} \quad \frac{1}{\sqrt{2}} \right)^T$ zum Eigenwert λ_2 . Es fällt auf, dass wir hier mit einer entarteten Ellipse zu tun haben. Man kann sich eine Projektion auch als Schatten vorstellen. Dabei gibt der Eigenvektor zum Eigenwert 0 die Projektionsrichtung vor und der Eigenvektor zum Eigenwert 1 die Gerade an, auf die projiziert wird.

Doch ist es Zufall, dass die Projektionsmatrix P die Eigenwerte 0 und 1 hat oder ist dies eine Eigenschaft, die alle Projektionen teilen? Um diese Frage zu beantworten wollen wir uns die Eigenwertgleichung ansehen

$$Pv = \lambda v. \quad (4)$$

Wir multiplizieren diese Gleichung nun mit P (von links) und erhalten dadurch

$$PPv = \lambda Pv$$

Wir wissen allerdings aus der Definition, dass $P \cdot P = P$ gilt. Auf der rechten Seite können wir Pv durch λv ersetzen.

$$Pv = \lambda^2 v$$

Wenn wir dieses Ergebnis nun mit Gleichung (4) vergleichen erkennen wir, dass

$$\lambda^2 = \lambda$$

gelten muss. Dies gilt allerdings nur für die Werte 0 und 1. Daher gilt Allgemein:

Projektionen haben stets die Eigenwerte 0 und 1.



Übungsaufgaben

$$\langle U^\dagger U \rangle$$

Ü1 Berechnen Sie A^5 für die Matrix $A = \begin{pmatrix} a & 0 \\ 0 & b \end{pmatrix}$ für beliebige Werte von a und b .

Ü2 Stellen Sie die beiden Vektoren $\vec{v} = \begin{pmatrix} 2 \\ 1 \end{pmatrix}$ und $\vec{w} = \begin{pmatrix} -4 \\ 3 \end{pmatrix}$ bezüglich der Basis B in der Basis B' dar.

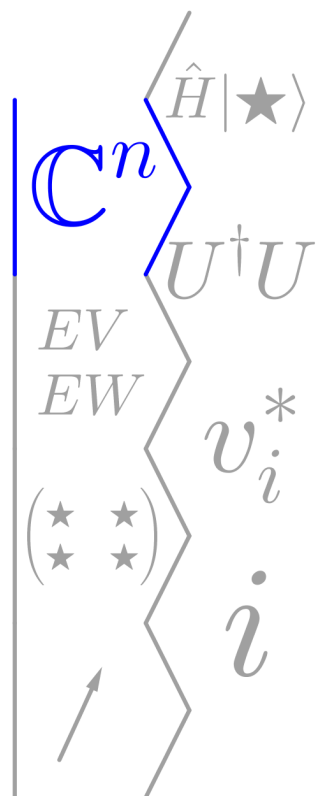
Ü3 Rechnen Sie Gleichung (2) nach.

Ü4 Zeigen Sie, dass die Paulimatrizen $\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$, $\sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}$ und $\sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$ hermitesch und unitär sind.

Ü5 Zeigen Sie, dass es sich bei der Matrix P in Gleichung (3) um eine Projektion handelt.

Hilberträume und Skalarprodukte

18. März 2019



Der sogenannte Hilbertraum ist jener Raum, der die Zustandsvektoren enthält. Er ist mehr als ein einfacher Vektorraum - doch sehen Sie selbst.

Einstiegsbeispiele

$$|\mathbb{C}^n\rangle$$

E1 Berechnen Sie die (komplexen) Skalarprodukte $\langle v, v \rangle$, $\langle w, w \rangle$, $\langle v, w \rangle$ und $\langle w, v \rangle$ der beiden Vektoren $v = \begin{pmatrix} 2i \\ 3 \end{pmatrix}$ und $w = \begin{pmatrix} -3 \\ i \end{pmatrix}$.

E2 Zeigen Sie mit Hilfe der Vektorraumaxiome, dass der \mathbb{C}^2 ein Vektorraum ist.

1 Der Hilbertraum

Das Gute ist, dass wir bereits Hilberträume kennen beziehungsweise alle ihre Bestandteile, diese jedoch nicht so bezeichnet haben. Wir wollen damit beginnen eine Definition des Hilbertraums anzugeben und diese anschließend zu diskutieren.

Unter einem Hilbertraum versteht man einen reellen oder komplexen Vektorraum, der bezüglich einer Norm

\mathbb{C}^n

$$\|x\| := \sqrt{\langle x, x \rangle}$$

vollständig^a ist. Diese Norm wird über ein Skalarprodukt definiert.

^aVollständig bedeutet, dass jede Cauchyfolge in dem betrachteten Raum konvergiert. Cauchyfolgen sind Folgen, die sich in ihrem Verlauf einem Grenzwert annähern.

Da diese Definition erstmals ungewohnt klingt, wollen wir ihre Teile einmal separat betrachten. Im Wesentlichen benötigen wir für die Konstruktion eines Hilbertraums zwei Dinge.

1. Einen Vektorraum
2. Ein Skalarprodukt

Im Baustein „Vektoren“ haben wir das Konzept des Vektorraums bereits diskutiert und haben gesehen, dass der Vektorraum sehr allgemein definiert ist. Auch über Skalarprodukte haben wir bereits gesprochen und somit können wir zwei für die Physik sehr wichtige Hilberträume als Beginn unserer Anschauungen verwenden. Überlegen Sie sich welche Eigenschaften diese beiden Strukturen gemeinsam haben.

- Der Vektorraum \mathbb{R}^n mit dem Standardskalarprodukt bildet einen Hilbertraum.
- Der Vektorraum \mathbb{C}^n mit dem komplexen Skalarprodukt bildet ebenso einen Hilbertraum

Das Erste, dass Ihnen womöglich in den Sinn kommt ist die Tatsache, dass die Elemente durch ein Zahlen-Tupel dargestellt werden können. Wir wollen uns hier jedoch noch einmal überlegen, was diese Zahlen genau bedeuten.

Wie wir bereits ganz am Beginn des Bausteins „Vektoren“ gesehen haben kann jeder Vektor als Linearkombination seiner Basisvektoren geschrieben werden. Zur Erinnerung sei hier ein Beispiel angegeben:

$$\begin{pmatrix} 3 \\ 5 \end{pmatrix} = 3 \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} + 5 \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

Nun stellt sich die Frage, ob wir dieses Konzept auf andere „Vektoren“ erweitern können, dabei soll ein Vektor lediglich als Element des Vektorraums gesehen werden und nicht als Zahlentupel oder gerichtete Größe (Pfeil). Kurz zusammengefasst bedeutet das, dass wir Vektoren addieren wollen und mit Zahlen¹ multiplizieren².

Als erstes Beispiel für einen abstrakteren Vektorraum wollen wir uns die **Polynome³ vom Grad 2** ansehen. Versuchen Sie sich bevor Sie weiterlesen darüber klar zu werden, warum es sich hierbei um einen Vektorraum handelt (Ü1).

Jedes Polynom ist eine Summe von Potenzen. In unserem Fall ist die höchst vorkommende Potenz x^2 . Die Basis dieses Vektorraums bilden die Potenzen x^2 , x und $x^0 = 1$. Betrachten wir nun beispielsweise das Polynom

$$p(x) = 2x^2 + 5x - 3$$

so könnte man es als Zahlentupel in der Form $(2 \ 5 \ -3)$ schreiben. Es ist leicht einzusehen, dass diese Darstellung eindeutig ist und die Vektorraumaxiome erfüllt. Obwohl es möglich ist jedes Polynom vom Grad 2 durch drei Zahlen eindeutig festzulegen, würde es wenig Sinn machen diese Tupel als Pfeile im Raum darzustellen⁴.

Gut, die Polynome als Vektorraum zu sehen haben wir uns nun klar gemacht, doch für den Hilbertraum fehlt uns noch das Skalarprodukt. Das Skalarprodukt, wie wir es bei den Vektoren über den Satz des Pythagoras eingeführt haben ist hier womöglich nicht zweckmäßig. Das hat den Grund, dass die räumliche Vorstellung der Länge hier nicht mehr anwendbar ist. Aus diesem Grund werden wir im nächsten Kapitel eine formalere Definition des Skalarproduktes anstreben.

2 Skalarprodukt - Schon wieder

In diesem Kapitel werden wir damit beginnen das Skalarprodukt über drei Eigenschaften zu definieren, die sich für ein reelles und ein komplexes Skalarprodukt minimal unterscheiden. Diese Art der Definition des Skalarprodukts fällt in das Gebiet der axiomatischen Geometrie.

¹Für uns reicht es hier nur reelle und komplexe Zahlen zu betrachten. Man könnte abstrakter jedoch auch andere Mengen als sogenannten Grundkörper eines Vektorraums fordern.

²genauer: siehe Vektorraumaxiome im Baustein „Vektoren“.

³Sie kennen diese bereits aus der Schule. Wahrscheinlich jedoch unter dem Namen „Polynomfunktionen“.

⁴Es gibt noch sehr viel mehr Vektorräume. Ein anderer wichtiger Vertreten sind die Folgen.

Wir nennen eine Abbildung

$$V \times V \rightarrow \mathbb{R}$$

ein Skalarprodukt^a, wobei V einen reellen Vektorraum bezeichnet, wenn die folgenden Eigenschaften erfüllt sind:

$\langle \mathbb{C}^n \rangle$

1. **Bilinearität**
2. **Symmetrie**
3. **Positive Definitheit**

^aauch **inneres Produkt** genannt

Sollte Sie also jemand fragen, worum es sich bei einem reellen Skalarprodukt handelt, können Sie einfach darauf antworten: „Ein reelles Skalarprodukt ist eine positiv definite, symmetrische Bilinearform.“. Nach einer solchen Antwort können zwei Fälle auftreten. Erstens die Person beendet das Gespräch und Sie sehen Sie nie wieder oder die Person sieht Sie fragend an und möchte wissen, was diese Worthüllen bedeuten. Auf die zweite Option wollen wir uns hier vorbereiten.

Die Definition besteht im Prinzip aus vier Teilen. Zuerst wird definiert, dass das Skalarprodukt eine Abbildung ist. Wichtig dabei ist zu verstehen, was die Formulierung $V \times V \rightarrow \mathbb{R}$ bedeutet. Der Pfeil repräsentiert die Abbildung. Eine Abbildung kann man sich als eine Maschine vorstellen, die aus vorhandenen Materialien etwas Neues produziert. Sie kennen Abbildung bereits aus der Schule, denn eine jede Funktion ist eine Abbildung. Einfach gesagt: „Sie stecken einen x-Wert hinein und bekommen einen y-Wert heraus“. Auf der linken Seite des Abbildungspfeils steht nun, was wir hineinstecken, auf der rechten Seite, was wir herausbekommen.

Beginnen wir mit der rechten Seite, da sie wesentlich einfacher zu verstehen ist. Sie sagt lediglich aus, dass wir in die reellen Zahlen abbilden. Anders ausgedrückt bedeutet das, dass wir eine Zahl (= Skalar) als Ergebnis der skalaren Multiplikation erhalten.

Die linke Seite gibt zuallererst einmal an, dass wir zwei Objekte in die Abbildung hineinwerfen müssen. Dies wird durch das Kreuz \times symbolisiert. Diese zwei Objekte sind Elemente des Vektorraums V .

Die Schreibweise

$$\langle v, w \rangle$$

für das Skalarprodukt haben wir bereits im Baustein „Komplexe Vektoren und Indexnotation“ kennengelernt. Diese spezielle Art der Abbildung, das Skalarprodukt,

muss nun drei Eigenschaften erfüllen, die wir im Folgenden diskutieren wollen

1. **Bilinearität:** bedeutet, dass die Linearitätsforderung sowohl für den linken (v), als auch für den rechten Eintrag (w) gelten muss.
2. **Symmetrie:** bedeutet, dass wir das linke und das rechte Element vertauschen dürfen. Es gilt: $\langle v, w \rangle = \langle w, v \rangle$.
3. **Positive Definitheit:** bezieht sich darauf, was passiert, wenn wir zwei gleiche Elemente verknüpfen. Dabei soll immer eine positive Zahl als Ergebnis resultieren. Null soll man nur dann erhalten, wenn das eingesetzte Element ebenfalls Null war. Den letzten Teil der Definition nennt man Definitheit.

Für das komplexe Skalarprodukt ändern wir die Definition ein wenig (Ü3).

Wir nennen eine Abbildung

$$V \times V \rightarrow \mathbb{C}$$

ein komplexes Skalarprodukt, wobei V einen komplexen Vektorraum bezeichnet, wenn die folgenden Eigenschaften erfüllt sind:

1. **Sesquilinear im erste und linear im zweiten Element**
2. **Hermitizität:** $\langle v, w \rangle = \langle w, v \rangle^*$
3. **Positive Definitheit**

Die ersten beiden Punkte haben sich augenscheinlich verändert. Damit einher geht allerdings eine weitaus wichtigere Veränderung. Beim komplexen Skalarprodukt müssen wir aufpassen, welches wir als erstes und welches wir als zweites Element verwenden. Für reelle Vektoren war das egal, da $\langle v, w \rangle = \langle v, w \rangle$ (Symmetrie) gilt. Der erste Punkt beinhaltet auch ein neues Vokabel, nämlich **sesquilinear**. Es bedeutet:

$$\begin{aligned}\langle v_1 + v_2, w \rangle &= \langle v_1, w \rangle + \langle v_2, w \rangle \\ \langle \lambda v, w \rangle &= \lambda^* \langle v, w \rangle \\ \langle v, \lambda w \rangle &= \lambda \langle v, w \rangle\end{aligned}$$

Ziehen wir einen Skalar aus dem Skalarprodukt heraus, so müssen wir ihn komplex konjugieren, wenn er im ersten Element stand. Diese Definition ist üblich aber willkürlich. Man hätte diese „hässliche“ Eigenschaft auch dem zweiten Element zukommen lassen können.

Dualraum

Wir werden hier kurz auch auf den Bra-Ket-Formalismus vorgreifen, den wir im nächsten Baustein kennenlernen werden. Am komplexen Skalarprodukt sehen wir bereits, dass wir das linke und das rechte Element nicht mehr „einfach so“ vertauschen dürfen. Man könnte auch sagen, dass das linke und das rechte Element verschiedene Rollen einnehmen.

Wir bezeichnen nun das linke Element durch den linken Teil der Klammer $\langle v |$ (Bra) und den rechten mit $|w\rangle$ (Ket). Nur wenn man einen Bra und einen Ket kombiniert erhält man eine Zahl. Per se sind die Bras und Kets gleichbedeutend - wir haben lediglich entschieden, dass das linke Element die unschönen Eigenschaften abbekommt. Denken wir zurück an die komplexen Vektoren. Hier haben wir das Skalarprodukt auf folgende Art und Weise berechnet:

$$\langle v, w \rangle = v_1^* w_1 + v_2^* w_2 + v_3^* w_3 + \dots$$

Überlegen Sie noch einmal, warum wir das so gemacht haben. Für die Berechnung dieses Skalarprodukts haben wir also den Vektor w mit dem komplex konjugierten des Vektors v kombiniert. Um also aus zwei gegebenen Vektoren das Skalarprodukt zu berechnen müssen wir das linke Element noch auf seinen Einsatz vorbereiten indem wir es komplex konjugieren⁵. Wir nennen alle diese abgeänderten Vektoren die dualen Vektoren zu den ursprünglichen. Der Raum, der aus allen diesen $v_i = w_i^*$ besteht wird **Dualraum** zum ursprünglichen Vektorraum der w_i genannt. Der Dualraum ist ebenfalls ein Vektorraum⁶.

Wichtig ist zu erwähnen, dass der ursprüngliche Vektorraum weder schlechter noch besser als sein Dualraum ist. Die beiden sind gleichberechtigt. Sie spielen zusammen wie Männer und Frauen. Genauso wie hier nur aus der Kombination Mann und Frau ein Kind entstehen kann, kann nur aus der Kombination Dualvektor und Vektor ein Skalar entstehen.

3 Skalarprodukt für Polynome

Nun müssen wir uns überlegen was ein geeignetes Skalarprodukt für beispielsweise Polynome oder generell Funktionen ist. Dazu müssen wir die drei oben genannten Bedingungen erfüllen. Anstelle der Summe in den Ihnen bekannten Skalarprodukten bietet es sich an ein Integral zu verwenden.

⁵Da zweimaliges konjugieren zur ursprünglichen Zahl führt ist auch der Dualraum des Dualraumes der ursprüngliche Vektorraum.

⁶Insbesondere besitzt er auch eine Basis und es gelten alle Vektorraumaxiome. Man kann somit auch mit den dualen Vektoren „ganz normal“ rechnen.

Beim Integrieren kann im Gegensatz zur (endlichen) Summe etwas sehr unangenehmes passieren. Das Skalarprodukt sollte uns auch die Möglichkeit geben eine Norm zu definieren beziehungsweise Längen zu messen. Beim Integrieren kann es allerdings passieren, dass es Fälle gibt in denen wir als Ergebnis der Integration „ ∞ “ erhalten. Daher müssen wir mit den Integrationsgrenzen etwas aufpassen. Es sollte auch klar sein, weshalb wir ein bestimmtes Integral benötigen - nur dieses liefert uns eine Zahl als Ergebnis.

Sehen wir uns das Beispiel aus dem ersten Kapitel dieses Bausteins an und überlegen uns, wie ein geeignetes Skalarprodukt für dieses aussieht. Wir haben dort die Polynome mit reellen Koeffizienten vom Grad 2 betrachtet (genauer gesagt vom Grad ≤ 2). Wir wollen das nachstehende Integral als Skalarprodukt verwenden:

$$\langle p, q \rangle = \int_0^1 p(x)q(x)dx$$

Nun überprüfen wir, ob dieses auch die drei oben genannten Bedingungen erfüllt.

1. **Symmetrie:** In diesem Fall bedeutet Symmetrie, dass wir zeigen müssen, dass

$$\int_0^1 p(x)q(x)dx = \int_0^1 q(x)p(x)dx$$

gilt. Wir können Polynome beim Multiplizieren vertauschen (Ü6) und daher gilt diese Forderung trivialerweise.

2. **Bilinearität:** Da wir bereits die Symmetrie gezeigt haben, genügt es zu zeigen, dass das Skalarprodukt entweder im ersten oder im zweiten Element linear ist (überlegen Sie sich warum). Wir entscheiden uns für das zweite Element und betrachten das Polynom $q(x) = cf(x)$, wobei auch $f(x)$ ein Polynom ist und $c \in \mathbb{R}$.

$$\langle p, q \rangle = \int_0^1 p(x)q(x)dx = \int_0^1 p(x)(c \cdot f(x))dx = c \int_0^1 p(x)f(x)dx = c \langle p, f \rangle$$

Hier haben wir lediglich verwendet, dass man Konstanten aus dem Integral herausziehen darf. Im zweiten Schritt unseres Beweises schreiben wir $q(x) = f(x) + g(x)$, wobei $f(x)$ und $g(x)$ wieder reell-wertige Polynome sein sollen.

$$\begin{aligned} \langle p, q \rangle &= \int_0^1 p(x)(f(x) + g(x))dx = \int_0^1 p(x)f(x)dx + \int_0^1 p(x)g(x)dx = \\ &= \langle p, f \rangle + \langle p, g \rangle \end{aligned}$$

In diesem Schritt wurde verwendet, dass das Integral einer Summe aufgeteilt werden darf. Damit haben wir die Linearität und gemeinsam mit der Symmetrie auch die Bilinearität gezeigt.

3. **Positive Definitheit:** Die Definitheit zu überprüfen ist relativ einfach, denn man kann sich leicht darüber klar werden, dass

$$\langle p, p \rangle = 0 \Leftrightarrow p = 0$$

Dass $\langle p, p \rangle$ für $p \neq 0$ ein positives Ergebnis liefert erhält man aus folgender Überlegung

$$\langle p, p \rangle = \int_0^1 p(x)p(x)dx = \int_0^1 p^2(x)dx$$

Der Integrand $p^2(x)$ ist eine Funktion, die nur nicht-negative Funktionswerte annimmt. Das liegt daran, dass sie aus quadrierten Funktionswerten einer anderen Funktion entstanden ist. Somit ist auch die orientierte Fläche in den Grenzen von 0 bis 1 sicherlich positiv und genau das wollten wir zeigen.

Wir haben nun alle drei Bedingungen überprüft und somit haben wir einen weiteren Hilbertraum kennengelernt.

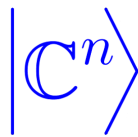
- Der Vektorraum der Polynome vom Grad ≤ 2 mit dem Skalarprodukt $\langle p, q \rangle = \int_0^1 p(x)q(x)dx$ ist ein Hilbertraum.

Möchte man dieses Konzept auf komplexe Funktionen erweitern und daher ein komplexes Skalarprodukt verwenden, so hat dieses üblicherweise die Form

$$\langle \psi, \varphi \rangle = \int_a^b \psi^*(x)\varphi(x)dx.$$

Dabei sind a und b Integrationsgrenzen, die auch $\pm\infty$ annehmen dürfen. Klarerweise müssen für ein solches komplexes Skalarprodukt die entsprechenden Eigenschaften gelten.

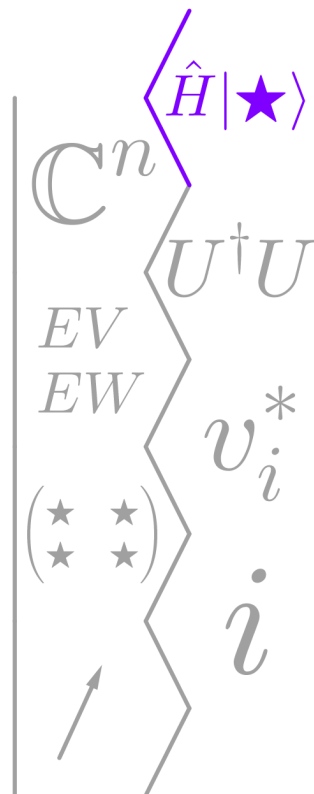
Übungsaufgaben



- Ü1 Machen Sie sich klar, warum die Polynome vom Grad ≤ 2 einen Vektorraum bilden. Überprüfen Sie dies anhand der Vektorraumaxiome.
- Ü2 Überlegen Sie welche Bedeutung die drei Forderungen in der Definition des Skalarprodukts auf das „Schul-Skalarprodukt“ von reellen Vektoren hat.
- Ü3 Vergleichen Sie die Definitionen des reellen und des komplexen Skalarprodukts miteinander.
- Ü4 Zeigen Sie, dass aus der Hermitizität des komplexen Skalarprodukts folgt, dass $\langle v, v \rangle \in \mathbb{R}$ ist.
- Ü5 Überlegen Sie sich, dass beim Ersetzen aller komplexen Komponenten im komplexen Vektorraum mit komplexem Skalarprodukt durch reelle das komplexe Skalarprodukt die Eigenschaften des reellen Skalarprodukts erfüllt.
- Ü6 Rechnen Sie anhand des nachstehenden Beispiels nach, dass die Multiplikation reeller Polynome kommutativ ist: $p(x) = 2x^2 + 5x + 1$, $q(x) = x^2 + x + 4$

Bra-Ket-Formalismus

18. März 2019



Hier befassen wir uns mit den Grundzügen des in der Quantenmechanik verwendeten Formalismus, der auf Paul Dirac zurückgeht. Dieser bietet den Vorteil, dass er darstellungsunabhängig ist.

Einstiegsbeispiele



Da sich dieser Baustein mit einem neuen Formalismus beschäftigen wird, sind hier keine Einstiegsbeispiele gegeben. Anstelle dieser soll kurz auf die Geschichte des Bra-Ket-Formalismus oder Dirac-Formalismus eingegangen werden.

Der Bra-Ket-Formalismus wurde im Jahr 1939 von Paul Dirac eingeführt, weshalb er auch den Namen „Dirac-Formalismus“ trägt. Er ähnelt dabei der bereits 100 Jahre älteren Schreibweise für das innere Produkt, die auf Hermann Grassmann zurückgeht¹.

Dirac spricht in seinem Artikel an, dass ein guter Formalismus dabei helfen soll wichtige Zusammenhänge einfach anschreiben zu können²:

In mathematical theories the question of notation, while not of primary importance, is yet worthy of careful consideration, since a good notation can be of great value in helping the development of a theory, by making it easy to write down those quantities or combinations of quantities that are important, and difficult or impossible to write down those that are unimportant. The summation convention in tensor analysis is an example, illustrating how specially appropriate a notation can be.

Sie sehen auch, dass ein Vergleich zur Summenkonvention gezogen wird, die wir im Baustein „Komplexe Zahlen und Indexnotation“ kennengelernt haben. Dirac endet seinen Artikel indem er zwei wichtige Eigenschaften dieses Formalismus anspricht:

Two general rules in connexion with the new notation may be noted, namely, any quantity in brackets $\langle \rangle$ is a number, and any expression containing an unclosed bracket symbol \langle or \rangle is a vector in Hilbert space, of the nature of a ϕ or ψ respectively. As names for the new symbols \langle and \rangle to be used in speech, I suggest the words bra and ket respectively.

In diesem Absatz spricht er bereits die Namen der beiden verwendeten Klammern (englisch **bra** und **ket**) an.

¹https://en.wikipedia.org/wiki/Bra%E2%80%93ket_notation (25.02.2019)

²P. A. M. Dirac (1939). A new notation for quantum mechanics. *Mathematical Proceedings of the Cambridge Philosophical Society*, 35, pp 416-418 doi:10.1017/ S0305004100021162

1 Auf der Suche nach Unabhängigkeit - I've been looking for freedom

In der Motivation wurde bereits angesprochen, dass der Bra-Ket-Formalismus einen klaren Vorteil im Vergleich zur Vektorschreibweise von Zuständen bietet. Wir wollen nun anhand eines Beispiels verdeutlichen, welche Vereinfachung wir dabei meinen.

Wir haben bereits darüber gesprochen, dass wir Wahrscheinlichkeiten über das Skalarprodukt berechnen wollen. Diese Rechnungen können relativ lang werden, weshalb es oft einfacher sein wird, wenn wir Ausdrücke zuerst ganz allgemein berechnen und erst am Schluss konkrete Werte einsetzen. Es ist klar, dass Resultate in der Physik nicht von der Wahl des Koordinatensystems abhängen dürfen. Aus der klassischen Mechanik kennen wir bereits die verallgemeinerten Koordinaten. Erst wenn wir ein konkretes Problem betrachten, machen wir uns Gedanken darüber, welches Koordinatensystem nun für unsere Betrachtung sinnvoll ist. Die Suche nach einer möglichst allgemeinen Beschreibung ist somit nichts Neues für uns.

In diesem Baustein wollen wir nun der Frage nachgehen, ob das auch für Zustandsvektoren möglich ist. Können wir die Berechnungen, die wir in der Quantenmechanik anstellen wollen auch mit allgemeineren Objekten als ganz konkreten Vektoren, die wir in den vorherigen Bausteinen kennengelernt haben, durchführen?

2 Der Formalismus am Beispiel der zweidimensionalen Vektoren

Bei der Betrachtung von Vektoren sind wir immer von einer Orthonormalbasis ausgegangen. Beispielsweise die Standardbasis

$$B = \left\{ \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \right\}$$

oder die um 45° zu ihr gedrehte Basis

$$B = \left\{ \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} \\ \frac{1}{\sqrt{2}} \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} -\frac{1}{\sqrt{2}} \\ \frac{1}{\sqrt{2}} \end{pmatrix} \right\}$$

Zweitere erhält man durch anwenden der Rotationsmatrix auf die Vektoren der Standardbasis. In welcher Basis wir rechnen sollte egal sein, denn es geht meist nur um die Messergebnisse, die nicht von der konkreten Basiswahl abhängen. Einige wichtige Eigenschaften der Standardbasis müssen jedoch übernommen werden.

1. Wir benötigen für den zweidimensionalen Raum zwei linear unabhängige Basisvektoren.
2. Alle Vektoren des zweidimensionalen Raums sollen aus den Basiszuständen durch Linearkombinationen gebildet werden können.
3. Alle Basisvektoren sollen normiert sein.
4. Die Basisvektoren sollen aufeinander normal stehen.

Die räumliche Veranschaulichung der Vektoren wäre zwar möglich, jedoch wollen wir ihr hier weniger Aufmerksamkeit zukommen lassen, da es uns um Zustandsvektoren geht, wie sie die Axiome der Quantenmechanik fordern. Wir wollen das hier entwickelte Konzept später auch auf Anwendungen verallgemeinern, die nicht mehr graphisch dargestellt werden können. Die „Schulvorstellung der Pfeile in der Ebene oder im Raum“ wollen wir nun hinter uns lassen. Konzentrieren Sie sich daher bitte auf die vier oben geforderten Eigenschaften.

Anstelle der Vektoren werden wir für Zustände ganz allgemein sogenannte **Kets** verwenden. Wir werden lernen, wie wir mit ihnen rechnen können. Man kann sie aber auch einfach wieder gegen beliebige Basisvektoren ersetzen. Für das Beschreiben eines zweidimensionalen Vektorraums benötigen wir zwei Zustände. Diese nennen wir beispielsweise

glücklich $|\odot\rangle$ und traurig $|\ominus\rangle$.

Eine andere Möglichkeit für Basiszustände wäre

weiß $|\circ\rangle$ und schwarz $|\bullet\rangle$.

Es ist unerheblich, wie wir den Ket „füllen“. Anstelle von $|\bullet\rangle$, hätten wir beispielsweise auch $|\text{schwarz}\rangle$ oder $|s\rangle$ schreiben können. Es soll lediglich beschrieben werden, welche Messgrößen man betrachten möchte.

Diese Zustände wollen wir durch Linearkombinationen miteinander verbinden und daraus sogenannte Superpositionszustände generieren. Sie werden bald lernen, welche wichtige Bedeutung diese Superpositionen haben. Eine solche kann möglicherweise

$$|\bullet\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} |\circ\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}} |\bullet\rangle \quad (1)$$

sein. Diese würde (klassisch) aussagen: „Der Zustand ‚grau‘ setzt sich zusammen aus ‚weiß‘ und ‚schwarz‘“. Superpositionen kennen Sie auch schon aus der klassischen Mechanik, beispielsweise vom waagrechten Wurf.

Die ersten beiden Punkte haben wir nun abgehandelt. Für die Punkte 3 und 4 benötigen wir das Skalarprodukt. Im Baustein „Komplexe Vektoren“ haben wir bereits gelernt, wie wir ein solches berechnen. Wir benötigen dazu die adjungierten Kets. Diese wollen wir **Bras** nennen. Die Bras sind die Elemente des Dualraums der Kets und auch umgekehrt. Die Bedeutung eines solchen Raums haben wir bereits im Baustein „Hilberträume und Skalarprodukte“ angesprochen.

Ein Beispiel soll nun veranschaulichen, was dies bedeutet. Wir suchen uns einen beliebigen normierten Ket-Vektor und wollen den dazugehörigen Bra-Vektor finden.

$$|\uparrow\rangle = \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} \\ \frac{i}{\sqrt{2}} \end{pmatrix}$$

Wir adjungieren dazu $|\uparrow\rangle$ und erhalten

$$\langle\uparrow| = \left(\frac{1}{\sqrt{2}} \quad \frac{-i}{\sqrt{2}} \right)$$

Ein Bra-Vektor ist immer ein Zeilenvektor und ein Ket-Vektor ist immer ein Spaltenvektor. Das Skalarprodukt kann somit einfach angegeben werden durch

$$\langle\uparrow| \cdot |\uparrow\rangle = \left(\frac{1}{\sqrt{2}} \quad \frac{-i}{\sqrt{2}} \right) \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} \\ \frac{i}{\sqrt{2}} \end{pmatrix} = \frac{1}{2} + \frac{1}{2} = 1$$

Als Vereinfachung beim Schreiben wird das Skalarprodukt zu einer einzelnen Klammer (engl. **Bracket**) zusammengezogen:

$$\langle\uparrow| \cdot |\uparrow\rangle = \langle\uparrow|\uparrow\rangle$$

Da wir nun wissen, wie wir das Skalarprodukt anschreiben und berechnen können, wollen wir uns den beiden letzten Punkten widmen und kommen dabei nochmals auf die Zustände $|\circ\rangle$ und $|\bullet\rangle$ zurück. Diese beiden Zustände bilden eine Orthonormalbasis.

Wir wissen bereits, dass der Betrag über das Skalarprodukt gegeben ist und daher

$$\langle\circ|\circ\rangle = \langle\bullet|\bullet\rangle = 1 \quad \langle\uparrow|\star\rangle$$

gelten muss. Da jeder Zustandsvektor normiert sein muss, gilt dieser Ausdruck für alle Zustände, egal ob Basiszustände oder nicht. Wollen wir eine Linearkombination

bilden und somit neue Zustände kreieren müssen wir immer auf die Normierung achten. Aus diesem Grund tritt der Faktor $\frac{1}{\sqrt{2}}$ in Gleichung (1) auf. Außerdem gilt für die beiden aufeinander normal stehenden Basiszustände

$$\langle \circ | \bullet \rangle = \langle \bullet | \circ \rangle = 0 \quad \langle \hat{H} | \star \rangle$$

Wir haben nun alle unsere vier vorausgesetzten Punkte in den neuen Formalismus integriert und können diesen nun für alle unsere Berechnungen verwenden. Um etwas vertrauter mit dem Formalismus zu werden empfiehlt es sich etwas damit zu hantieren. Das wollen wir im Folgenden tun und auch in den Übungsaufgaben am Ende dieses Bausteins.

Das erste Beispiel mit dem wir uns hier beschäftigen wollen ist

$$\langle \bullet | \circ \rangle$$

In Gleichung (1) haben wir bereits gesehen, dass $|\bullet\rangle$ sich aus $|\circ\rangle$ und $|\bullet\rangle$ zusammensetzt. Der zugehörige Bra ist dann

$$\langle \bullet | = \frac{1}{\sqrt{2}} \langle \circ | + \frac{1}{\sqrt{2}} \langle \bullet |$$

Nun können wir das obige Skalarprodukt berechnen.

$$\langle \bullet | \circ \rangle = \left(\frac{1}{\sqrt{2}} \langle \circ | + \frac{1}{\sqrt{2}} \langle \bullet | \right) | \circ \rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \underbrace{\langle \circ | \circ \rangle}_{=1} + \frac{1}{\sqrt{2}} \underbrace{\langle \bullet | \circ \rangle}_{=0} = \frac{1}{\sqrt{2}}$$

Skalarprodukte berechnen so wie wir es hier machen, wird ein wichtiges Werkzeug zum Ermitteln von Wahrscheinlichkeiten in der diskreten Quantenmechanik sein. Da Zustandsvektoren im Allgemeinen komplexe Zahlen beinhalten können, wollen wir auch hierzu ein paar Übungsbeispiele durchführen. Betrachten wir beispielsweise den folgenden Zustandsvektor, der sich wieder aus $|\circ\rangle$ und $|\bullet\rangle$ zusammensetzt.

$$|\bullet\rangle = \frac{3}{5} |\circ\rangle - \frac{4i}{5} |\bullet\rangle$$

Wir wollen nun das Skalarprodukt von $|\bullet\rangle$ und $|\bullet\rangle$ berechnen

$$\langle \bullet | \bullet \rangle = \langle \bullet | \left(\frac{3}{5} |\circ\rangle - \frac{4i}{5} |\bullet\rangle \right) = \frac{3}{5} \langle \bullet | \circ \rangle - \frac{4i}{5} \langle \bullet | \bullet \rangle = -\frac{4i}{5}$$

Wir haben in den letzten Beispielen bereits gesehen, dass wir in der sogenannten **Dirac-Notation** rechnen können, ohne uns je darüber Gedanken gemacht zu haben wie konkret unsere Zustände aussehen oder was sie beschreiben. Genau das wollten wir hier auch erreichen. Wir können physikalische Vorgänge beschreiben ohne mit konkret angegebenen Zahlen zu rechnen³. Der große Vorteil dabei ist, dass wir bereits bekannte Zusammenhänge nicht für jedes Beispiel erneut von Beginn an durchführen müssen.

Wir wollen nun auch das Skalarprodukt der Zustände $|\bullet\rangle$ und $|\circ\rangle$ berechnen, wobei

$$|\circ\rangle = \frac{-4i}{5} |\circ\rangle + \frac{3}{5} |\bullet\rangle$$

gilt.

$$\begin{aligned} \langle\bullet|\circ\rangle &= \left(\frac{3}{5} \langle\circ| + \frac{4i}{5} \langle\bullet| \right) \left(\frac{-4i}{5} |\circ\rangle + \frac{3}{5} |\bullet\rangle \right) = \\ &= -\frac{12i}{25} \langle\circ|\circ\rangle + \frac{16}{25} \langle\bullet|\circ\rangle + \frac{9}{25} \langle\circ|\bullet\rangle + \frac{12i}{25} \langle\bullet|\bullet\rangle \end{aligned}$$

Diesen Term haben wir erhalten indem wir die Klammern vom zweiten in den dritten Schritt ausmultipliziert haben, wie Sie es bereits aus der Schule kennen: „Jedes mit Jedem“. Wir können diesen Ausdruck noch vereinfachen, da wir bereits wissen, dass die erhaltenen „Bra(c)kets“ 0 beziehungsweise 1 ergeben.

$$\langle\bullet|\circ\rangle = -\frac{12i}{25} + \frac{12i}{25} = 0$$

Da die Zustände $|\bullet\rangle$ und $|\circ\rangle$ orthogonal und normiert sind, bilden sie eine Orthonormalbasis des \mathbb{C}^2 . Das bedeutet, dass wir sie anstelle der Zustände $|\bullet\rangle$ und $|\circ\rangle$ verwenden könnten um jeden anderen Zustand mit Hilfe von diesen zu beschreiben.

Sehen Sie sich dieses Kapitel noch einmal an. Wir haben nie definiert welchen konkreten Vektoren $|\bullet\rangle$ und $|\circ\rangle$ entsprechen. Das Einzige, dass wir gefordert haben, war die Lage der beiden zueinander. Man kann zum Rechnen natürlich die Standardbasis verwenden - muss man aber nicht.

3 Eine andere Kombinationsmöglichkeit

Wir haben bis jetzt die Kombination Bra-Ket untersucht. Jetzt wollen wir uns mit der Frage beschäftigen ob auch die Kombination Ket-Bra möglich wäre. Wir wollen also herausfinden, wie wir den Ausdruck

$$|\odot\rangle \langle\odot|$$

³Die einzigen Zahlen, die wir verwenden, geben relative Zusammenhänge an.

interpretieren sollen. Denken wir dazu am Besten noch einmal zurück an die Darstellung durch Vektoren. „Multipliziert“ man einen Spaltenvektor (Ket) und einen Zeilenvektor (Bra) miteinander, so erhält man eine Matrix, wie das nachstehende Beispiel verdeutlichen soll:

$$\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} (1 \ 0) = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}$$

Dies ist eine sehr wichtige Erkenntnis. Wir sollten uns daher Folgendes merken:

„Bra mal Ket ist Skalar“
 „Ket mal Bra ist Matrix“



Die Reihenfolge dieser Multiplikationen ist entscheidend.

4 Der Formalismus verallgemeinert

Bis jetzt haben wir nur Systeme betrachtet, die zwei mögliche Messwerte annehmen können. Wenn wir uns nun allerdings überlegen wollen, wie wir diesen Formalismus erweitern können, denken wir wohl zuerst an drei mögliche Messwerte. Dieser Fall ist noch einfach zu beschreiben, da wir uns anstelle von Vektoren im \mathbb{C}^2 welche im \mathbb{C}^3 vorstellen. Auch für vier, fünf oder weiter Dimensionen ist dies gedanklich einfach, auch wenn es rechnerisch anstrengender wird.

Doch wie sieht es aus, wenn wir die Frage stellen, wo sich ein Teilchen befindet. Wie viele Antworten sind hier zu erwarten? Im Allgemeinen könnte es überall sein und unsere diskrete Beschreibung funktioniert nicht mehr. Eine solche Frage kann erst im Rahmen der kontinuierlichen Quantenmechanik beantwortet werden. Den Platz der Zustandsvektoren nehmen nun die Wellenfunktionen ein. Das Betragsquadrat der Wellenfunktion beschreibt genau wie wahrscheinlich es ist ein Teilchen in einem bestimmten Gebiet zu finden.

Doch welche Auswirkungen hat diese Abänderung auf den Formalismus. Überlegen wir uns dazu zuallererst, noch einmal welche wichtigen Forderungen wir an unseren Formalismus gestellt haben.

1. **Normiertheit:** Jeder Zustandsvektor sollte normiert sein. Zur Erinnerung, im Dirac-Formalismus angeschrieben lautet diese Bedingung

$$\langle \star | \star \rangle = 1$$

Mathematisch gesehen greifen wir hier auf das komplexe Skalarprodukt zurück. Wie man ein solches für Funktionen definieren kann wurde im Baustein „Hilberträume und Skalarprodukte“ diskutiert. Die Normiertheit können wir daher in folgender Weise beibehalten:

$$\int_R \psi(x, y, z)^* \psi(x, y, z) dx dy dz = 1$$

Durch geeignete Wahl der Randbedingungen⁴ kann man ein Teilchen in einem Volumen R „einsperren“. In einer Dimension würde diese Bedingung wie folgt aussehen:

$$\int_a^b \psi(x)^* \psi(x) dx = \int_a^b |\psi(x)|^2 dx = 1$$

Ein Teilchen wird in den Grenzen von a nach b festgehalten und somit wird garantiert, dass es diesen Bereich nicht verlassen kann.

2. **Eigenwertproblem:** Die Messwerte a eines Systems, sowie dessen Eigenzustände $|\psi\rangle$, konnten wir einfach durch Lösen der Eigenwertgleichung

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

finden. Dieses Verfahren wird auch durch die Axiomen der Quantenmechanik gefordert. Im Baustein „Eigenwerte und Eigenvektoren“ haben wir bereits besprochen, wie man die Eigenwerte und Eigenvektoren einer Matrix berechnen kann. Somit ist es kein Problem die Messwerte eines Operators zu finden, wenn dieser durch eine Matrix dargestellt ist und die Eigenzustände durch Vektoren. Nun stellt sich allerdings die Frage, wie man eine Eigenwertgleichung für Funktionen lösen kann.

Um dieser Frage nachzugehen, betrachten wir einen Operator, den Differentialoperator, der der Vorschrift entspricht „Differenziere die Wellenfunktion nach x “, daher:

$$\hat{D} = \frac{\partial}{\partial x}$$

und schreiben die Eigenwertgleichung für ihn an:

$$\hat{D}\psi(x) = a\psi(x) \tag{2}$$

Diese Gleichung kann man nun folgendermaßen lesen: Wir suchen eine Funktion $\psi(x)$, sodass ihre Ableitung $\frac{\partial\psi}{\partial x}$ sich, bis auf einen konstanten Faktor a , nicht von der Funktion unterscheidet. Gleichung (2) ist somit gleichbedeutend mit der Differentialgleichung

$$\psi'(x) = a \cdot \psi(x)$$

⁴Beispielsweise ein Kastenpotential

Eine Lösung⁵ dieser Differentialgleichung kennen wir bereits:

$$\psi(x) = e^{a \cdot x}$$

Wir haben gesehen, dass wir ein Eigenwertproblem nicht nur für Vektoren lösen können. Selbst die stationäre Schrödingergleichung, eine grundlegende Gleichung der Quantenmechanik, die Sie in der Vorlesung kennenlernen werden, ist eine Eigenwertgleichung

$$\hat{H} |\psi\rangle = E |\psi\rangle$$

⁵Die Lösung einer solchen Differentialgleichung enthält eine Integrationskonstante. Die allgemeine Lösung dieser Gleichung ist somit:

$$\psi(x) = c \cdot e^{a \cdot x}$$

Übungsaufgaben

$$\langle \hat{H} | \star \rangle$$

- Ü1 Finden Sie eine Orthonormalbasis des \mathbb{C}^2 und drücken Sie diese durch die Zustände $|\odot\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$ und $|\ominus\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$ aus.
- Ü2 Überprüfen Sie, ob es sich bei $|\odot\rangle \langle \odot|$ um einen Projektor handelt oder nicht.
- Ü3 Berechnen Sie $\langle \bullet | \circ \rangle$, $|\circ\rangle \langle \bullet|$ und $|\langle \bullet | \circ \rangle|^2$.
- Ü4 Finden Sie einen zu $|\bullet\rangle$ orthonormalen Zustand, ausgedrückt durch $|\bullet\rangle$ und $|\circ\rangle$.

Zusammenfassung

Zum Verständnis der Theoretischen Physik ist ein hohes Maß an mathematischen Grundlagen nötig. Wie eine Umfrage, die im Zuge dieser Diplomarbeit durchgeführt wurde, zeigt, fehlen 60% der Lehramtsstudierenden an der Universität Wien diese Kenntnisse. Um herauszufinden wo Probleme bei der Lehramts - Lehrveranstaltung zur Theoretischen Physik Quantenmechanik auftreten, wurden auch Antworten auf typische Prüfungsfragen analysiert.

Aus den Erkenntnissen dieser Untersuchungen, sowie aus persönlichen Gesprächen mit Studierenden und der Lehrveranstaltungsleitung sind acht „Bausteine zum Erlernen des Formalismus der Quantentheorie“ entstanden, die vor allem mathematisch weniger affinen Studierenden als Werkzeug zu einem positiven Abschluss einer Einführungsvorlesung zum Thema Quantenmechanik verhelfen sollen. Bei der Konzeption dieser Materialien wurde bewusst nicht auf mathematische Rigorosität und Vollständigkeit abgezielt, sondern an das Schulwissen der Studierenden angeknüpft. In den Bausteinen wird stets auch auf den Bezug des behandelten Themas zur Quantenmechanik eingegangen. Sie sollen das selbstständige Erlernen der mathematischen Grundlagen in kurzer Zeit ermöglichen, wodurch (mathematischen) Verständnisproblemen während der Vorlesung und den Übungen vorgebeugt werden soll. Ein jeder Baustein kann getrennt bearbeitet werden, jedoch ist es empfohlen in der nachstehenden Reihenfolge vorzugehen:

1. **Vektoren**
2. **Komplexe Zahlen**
3. **Matrizen**
4. **Komplexe Vektoren und Indexnotation**
5. **Eigenwerte und Eigenvektoren**
6. **Familie Matrix (Matrizeigenschaften, Basiswechsel und Diagonalisierung)**
7. **Hilberträume und Skalarprodukte**
8. **Bra-Ket-Formalismus**

Alle Bausteine haben denselben Aufbau. Zuerst wird das Thema motiviert und Rechenaufgaben gegeben. Diese so genannte „Einstiegsbeispiele“ sollen den Studierenden einen Eindruck davon vermitteln, wie viel sie von der Thematik bereits kennen. Im Anschluss an diese ist ein durchschnittlich zehn Seiten umfassender Text gegeben, der das behandelte Thema erklärt. In diesem wird bereits auf einige Übungsaufgaben hingewiesen, welche am Ende des Bausteins die erlernten Themen festigen sollen

und den Studierenden die Möglichkeit geben ihre Fähigkeiten selbst zu testen. Der Baustein „Eigenwerte und Eigenvektoren“ ist interaktiv aufgebaut. In zwei Programmen, die mit Hilfe von GeoGebra erstellt wurden, wird die geometrische Bedeutung von Eigenwerten und Eigenvektoren verdeutlicht, um ein intuitives Verständnis dieser Begriffe zu generieren.

Die Materialien wurden im Wintersemester 2018/19 im Zuge eines Tutoriums zur Lehrveranstaltung „Theoretische Physik III für das UF Physik“ getestet und evaluiert.

Abstract

In order to understand theoretical physics a high amount of mathematical knowledge is needed. A survey which is included in the present diploma thesis shows that 60 % of the student teachers of Physics at the University of Vienna have problems with this issue. In order to locate the main problems in the understanding of theoretical quantum mechanics, students' answers on exam questions were analysed.

Based on this findings and after having discussions with students and university teachers eight "Bausteine zum Erlernen des Formalismus der Quantentheorie" (blocks for learning the formalism of quantum theory) were constructed. These blocks should help especially those students who feel less comfortable in mathematical issues to pass their theoretical quantum mechanics examinations. The emphasis was put on the connection to students' previous knowledge instead of mathematical completeness. These materials should enable the students to independently study the main mathematical topics needed in quantum mechanics within a short period of time, so that no (mathematical) problems occur during the lecture and problem solving classes. Each of the blocks can be revised independently although the following order is recommended:

1. **Vektoren (vectors)**
2. **Komplexe Zahlen (complex numbers)**
3. **Matrizen (matrices)**
4. **Komplexe Vektoren und Indexnotation (complex vectors and index notation)**
5. **Eigenwerte und Eigenvektoren (eigenvalues and eigenvectors)**
6. **Familie Matrix (properties of matrices, basis change, diagonalisation)**
7. **Hilberträume und Skalarprodukte (hilbert spaces and scalar products)**
8. **Bra-Ket-Formalismus (Dirac notation)**

All of the blocks have the same structure. In the beginning, the current topic is motivated and some exercises are offered which should help the students to identify where their problems are. Afterwards, an on average ten-page explanatory text is placed. Every block is concluded with exercises to practice the newly learned topics. The block on eigenvalues and eigenvectors is supported with some interactive materials, which were created with the program GeoGebra. They should help to gain a natural understanding of this topic.

The materials which were developed for this present diploma thesis were tested and evaluated in a tutoring course in the winter term 2018/19.