
Seminar zur Vorlesung Quantenmechanik
Übungsblatt 1
Mathematische Grundlagen I

Wintersemester 15/16

1 Komplexe Zahlen

Komplexe Zahlen werden wie folgt definiert:

$$z = x + iy \quad \textbf{kartesische Koordinatenform} \quad (1)$$

Dabei sind x der Realteil ($x = \operatorname{Re}(z)$) und y der Imaginärteil ($y = \operatorname{Im}(z)$) der Zahl z . Eine komplexe Zahl kann immer auch eindeutig mit den Polarkoordinaten r und θ dargestellt werden. Die folgenden Beziehungen zwischen kartesischen und Polarkoordinaten ergeben sich aus der Gaußschen Zahlenebene:

$$x = r \cos \theta \quad \text{und} \quad y = r \sin \theta$$

Setzt man dies in Gl. (1) ein, so erhält man die komplexe Zahl in Polarkoordinaten:

$$\begin{aligned} z &= x \pm iy = r \cos \theta \pm ir \sin \theta \\ &= r (\cos \theta \pm i \sin \theta) \quad \textbf{Polarkoordinatenform} \\ &= r e^{\pm i\theta} \quad \textbf{Eulerform} \end{aligned}$$

Durch das Einsetzen der Eulerschen Formel (Gl. (2)) erhält man mit der letzten Umformung die eulersche Form der komplexen Zahl.

$$e^{i\theta} = \cos \theta + i \sin \theta \quad (2)$$

Bei der Addition bzw. Subtraktion von komplexen Zahlen werden die Realteile und Imaginärteile separat addiert bzw. subtrahiert. Um zwei komplexe Zahlen zu multiplizieren, werden beide ausmultipliziert und $i^2 = -1$ angewendet. Für die Division wird der Quotient mit der komplex-konjugierten Zahl zum Nenner erweitert. Die komplex-konjugierte Zahl z^* zu einer gegebenen komplexen Zahl z ist wie folgt definiert:

$$z = x \pm iy \quad \Leftrightarrow \quad z^* = x \mp iy$$

Einige Beispiele für das Rechnen mit komplexen Zahlen:

$$\begin{aligned} (2+i) - (1-2i) &= (2-1) + [(1-(-2))]i = 1+3i \\ (2+i) \cdot (1-2i) &= 2-4i+1i-2i^2 = 2-3i-2 \cdot (-1) = 4-3i \\ \frac{2+i}{1+2i} &= \frac{2+i}{1+2i} \left(\frac{1-2i}{1-2i} \right) = \frac{4-3i}{5} = \frac{4}{5} - \frac{3}{5}i \end{aligned}$$

a) (i) Zeigen Sie in der kartesischen Koordinatenform, dass z^*z immer eine reelle Zahl ist.

(ii) Stellen Sie sich vor, dass die komplexe Zahl als Vektor $\vec{z} = \begin{pmatrix} \operatorname{Re}(z) \\ \operatorname{Im}(z) \end{pmatrix}$ dargestellt wird.

Wie können Sie die Länge (Norm, Betrag) des Vektors bestimmen? Vergleichen Sie mit z^*z .

(iii) Bilden Sie den Betrag von $z_1 = 3 + 4i$ und tragen Sie z_1 sowie z_1^* in die Gaußsche Zahlenebene ein.

(iv) Bilden Sie die Differenz ($z_1 - z_2$) und den Quotient (z_2/z_1) von z_1 und z_2 . z_2 habe die Polarkoordinaten $r = \sqrt{8}$ und $\varphi = \frac{7}{4}\pi$. Geben Sie für die berechnete Differenz auch die Polarkoordinaten an.

b) Es sei $z_3 = e^{i\theta}$.

(i) Zeigen Sie, dass $z_3^* = e^{-i\theta}$ ist. Verwenden Sie die Achsen- bzw. Punktsymmetrie der *cos*- bzw. *sin*-Funktion.

(ii) Zeigen Sie in eulerscher und Polarkoordinatenform, dass $z_3^* z_3 = 1$ ist.

(iii) Bilden Sie Summe und Produkt von $z_4 = 5e^{i\pi}$ und $z_5 = 2e^{\frac{i\pi}{2}}$. Geben Sie für das berechnete Produkt auch die kartesischen Koordinaten an.

2 Vektoralgebra

Ein Vektor $|\alpha\rangle$ wird in der Dirac-Notation als Bra bezeichnet:

$$|\alpha\rangle = \begin{pmatrix} \alpha_1 \\ \alpha_2 \\ \vdots \\ \alpha_n \end{pmatrix} \quad \text{Bsp. für } \mathbb{R}^3 : \quad |v\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 2 \\ 3 \end{pmatrix}$$

Der adjungierte Vektor zu $|\alpha\rangle$ ist eine Zeilenmatrix und wird als Ket definiert:

$$(|\alpha\rangle)^\dagger = \langle\alpha| = \begin{pmatrix} \alpha_1^* & \alpha_2^* & \dots & \alpha_n^* \end{pmatrix}$$

Das Skalarprodukt (auch inneres Produkt genannt) zweier Vektoren $|\alpha\rangle$ und $|\beta\rangle$ ist die Summe der Produkte der Komponenten α_i und β_i .

$$\langle\alpha|\beta\rangle = \sum_{i=1}^n \alpha_i^* \cdot \beta_i$$

Eine wichtige Eigenschaft des Skalarproduktes ist, dass dieses für zwei orthogonale Vektoren null ist. Das innere Produkt eines beliebigen Vektors mit sich selbst ist eine nichtnegative Zahl und somit dessen Wurzel reell. Dies wird die Norm des Vektors genannt:

$$\|\alpha\| = \sqrt{\langle\alpha|\alpha\rangle}$$

Ist die Norm eines Vektors gleich 1, so bezeichnet man diesen als Einheitsvektor. Durch Multiplikation mit dem Reziproken der Norm können Vektoren auch normiert, d.h. zu einem Einheitsvektor gemacht, werden.

Ein Vektorraum besteht aus einer Menge von Vektoren ($|\alpha\rangle, |\beta\rangle, |\gamma\rangle, \dots$) und einem Satz von Skalaren ($a, b, c, \dots$). Alle Vektoren, die durch eine Linearkombination dieser Vektoren gebildet werden können, liegen in dem aufgespannten Vektorraum.

$$|v\rangle = a|\alpha\rangle + b|\beta\rangle + c|\gamma\rangle + \dots \quad (3)$$

Ein Vektor $|\lambda\rangle$ ist linear unabhängig von der Menge $|\alpha\rangle, |\beta\rangle, |\gamma\rangle, \dots$, wenn er sich nicht als Linearkombination aus ihnen schreiben lässt. In Erweiterung dieser Definition heißt eine Menge von Vektoren linear unabhängig, wenn jeder einzelne von ihnen von den anderen linear unabhängig ist. Eine Menge von linear unabhängigen Vektoren heißt eine Basis dieses Vektorraums. Die Anzahl der Vektoren in einer beliebigen Basis wird als Dimension des Raums bezeichnet.

Für eine endliche n -dimensionale Basis

$$|e_1\rangle, |e_2\rangle, \dots, |e_n\rangle$$

kann jeder beliebige Vektor

$$|\alpha\rangle = a_1 |e_1\rangle + a_2 |e_2\rangle + \dots + a_n |e_n\rangle = \sum_{i=1}^n a_i |e_i\rangle \quad (4)$$

eindeutig durch einen Satz an Komponenten $(a_1, a_2, \dots, a_n)$ dargestellt werden.

Eine Menge von n paarweise orthogonalen, normierten Vektoren mit

$$\langle \alpha_i | \alpha_j \rangle = \delta_{ij} \quad \begin{cases} \delta_{ij} = 1, \text{ wenn } i = j \\ \delta_{ij} = 0, \text{ wenn } i \neq j \end{cases}$$

heißt somit orthonormale Basis im $\mathbb{R}^n$. Das oben definierte Symbol δ_{ij} heißt Kronecker-Delta.

Ein Beispiel für eine Basis sind die Vektoren

$$|i\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \quad |j\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad |k\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} \quad (5)$$

welche ein dreidimensionales kartesisches Koordinatensystem bilden. Mithilfe dieser drei Basisvektoren kann jeder beliebige Vektor in diesem Raum dargestellt werden, z.B.:

$$|v\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 2 \\ 3 \end{pmatrix} = 1 |i\rangle + 2 |j\rangle + 3 |k\rangle$$

a) Bilden Sie das Skalarprodukt folgender Vektoren:

$$(i) \quad |v\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 2 \\ 3 \end{pmatrix} \text{ mit } |i\rangle, |j\rangle \text{ und } |k\rangle$$

$$(ii) \quad \langle \nabla | \nabla \rangle = \nabla^2 \text{ mit } \nabla = \begin{pmatrix} \partial/\partial x \\ \partial/\partial y \\ \partial/\partial z \end{pmatrix}$$

$$(iii) \quad \langle w | v \rangle \text{ und } \langle v | w \rangle \text{ mit } |v\rangle \text{ aus (i) und } |w\rangle = \begin{pmatrix} 2+i \\ 1 \\ -i \end{pmatrix}$$

$$(iv) \quad \sum_{\lambda}^{\{i,j,k\}} |\lambda\rangle \langle \lambda | v \rangle \quad \text{mit } |v\rangle \text{ aus (i)}$$

Wie heißen die beiden Operatoren ∇ und ∇^2 aus Aufgabe (ii)? Was fällt Ihnen bei den Aufgaben (iii) und (iv) auf?

b) Gegeben sind die Vektoren:

$$|u\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 2 \\ 2 \end{pmatrix} \quad |v\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 4 \\ 3 \end{pmatrix} \quad |w\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 2 \end{pmatrix} \quad |x\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}$$

Wählen Sie aus den gegebenen 4 Vektoren einen Satz von Vektoren aus, der eine Basis darstellt. Beweisen Sie, dass dieser eine Basis bildet. Stellen Sie, wenn vorhanden, den (die) übrigen Vektor(en) als Linearkombination der gewählten Basis dar. Normieren Sie Vektor $|u\rangle$.

3 Gram-Schmidtsches Orthogonalisierungsverfahren

Das Gram-Schmidtsche Orthogonalisierungsverfahren erzeugt zu jedem System linear unabhängiger Vektoren, ein Orthogonalsystem, das denselben Untervektorraum erzeugt. Eine Erweiterung stellt das Gram-Schmidtsche Orthonormalisierungsverfahren dar: statt eines Orthogonalsystems berechnet es ein Orthonormalsystem. Verwendet man ein System von Basisvektoren als Eingabe für die Algorithmen, so berechnen sie eine Orthogonal- bzw. Orthonormalbasis.

Der nach Gl. (6) gegebene Algorithmus berechnet zu linear unabhängigen Vektoren $|w_1\rangle, \dots, |w_n\rangle$ ein Orthogonalsystem von n paarweise orthogonalen Vektoren, das denselben Untervektorraum erzeugt.

$$|v_n\rangle = |w_n\rangle - \sum_{i=1}^{n-1} \frac{\langle v_i | w_n \rangle}{\langle v_i | v_i \rangle} |v_i\rangle \quad (6)$$

Der nach Gl. (7) gegebene Algorithmus berechnet zu linear unabhängigen Vektoren $|w_1\rangle, \dots, |w_n\rangle$ ein Orthonormalsystem von n normierten, paarweise orthogonalen Vektoren, das denselben Untervektorraum erzeugt.

$$\begin{aligned} |v_1\rangle &= \frac{|w_1\rangle}{\|w_1\|} && \text{Normalisieren des ersten Vektors } |w_1\rangle \\ |v'_n\rangle &= |w_n\rangle - \sum_{i=1}^{n-1} \langle v_i | w_n \rangle |v_i\rangle && \text{Orthogonalisieren des } n\text{-ten Vektors } |w_n\rangle \\ |v_n\rangle &= \frac{|v'_n\rangle}{\|v'_n\|} && \text{Normalisieren des Vektors } |v'_n\rangle \end{aligned} \quad (7)$$

Gegeben seien folgende Vektoren des $\mathbb{R}^3$ -Raums:

$$|w_1\rangle = \begin{pmatrix} 2.5 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \quad |w_2\rangle = \begin{pmatrix} 5 \\ 3 \\ 0 \end{pmatrix} \quad |w_3\rangle = \begin{pmatrix} 2 \\ 6 \\ 1 \end{pmatrix} \quad (8)$$

Konstruieren Sie mit Hilfe des Gram-Schmidtschen Orthonormalisierungsverfahrens eine Orthonormalbasis des von diesen Vektoren aufgespannten Raums. Zeigen Sie danach, dass tatsächlich eine Orthonormalbasis entstanden ist.

4 Matrizen

Eine Matrix ist ein zweidimensionales Feld und wird z.B. für Operationen wie Rotation und Spiegelung verwendet. Eine $(N \times M)$ Matrix $\mathbf{A}$ mit N Zeilen und M Spalten sieht wie folgt aus:

$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} A_{11} & A_{12} & \dots & A_{1M} \\ A_{21} & A_{22} & \dots & A_{2M} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ A_{N1} & A_{N2} & \dots & A_{NM} \end{pmatrix} \quad (9)$$

Ist die Anzahl der Zeilen gleich der Spalten ($N = M$), so bezeichnet man die Matrix als quadratisch. Einige wichtige Eigenschaften von quadratischen $(N \times N)$ Matrizen, die wir häufiger benutzen werden, sind im Folgenden aufgelistet:

1. Eine Matrix $\mathbf{A}$ ist *diagonal*, wenn alle nicht diagonalen Elemente gleich null sind.

$$A_{ij} = A_{ii}\delta_{ij} \quad \Leftrightarrow \quad \mathbf{A} = \begin{pmatrix} A_{11} & 0 & \dots & 0 \\ 0 & A_{22} & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & A_{NN} \end{pmatrix} \quad (10)$$

2. Die *Spur* (engl. „trace“) einer Matrix ist die Summe ihrer Diagonalelemente:

$$\text{Tr}(\mathbf{A}) = \sum_{i=1}^N A_{ii} \quad (11)$$

3. Die *Einheitsmatrix* ist definiert durch

$$\mathbb{E}\mathbf{A} = \mathbf{A}\mathbb{E} = \mathbf{A} \quad (12)$$

für alle Matrizen $\mathbf{A}$ und besitzt die Elemente

$$\mathbb{E}_{ij} = \delta_{ij}. \quad (13)$$

4. Die *inverse Matrix* von $\mathbf{A}$, gekennzeichnet durch $\mathbf{A}^{-1}$ ist eine Matrix, so dass gilt:

$$\mathbf{A}^{-1}\mathbf{A} = \mathbf{A}\mathbf{A}^{-1} = \mathbb{E} \quad (14)$$

Die Bestimmung einer Inversen erfolgt im Allgemeinen über einen Gauß-Algorithmus:

$$(\mathbf{A}|\mathbb{E}) \xrightarrow{\text{Gauß-Algorithmus}} (\mathbb{E}|\mathbf{A}^{-1})$$

5. Eine *transponierte* Matrix von $\mathbf{A}$, gekennzeichnet durch $\mathbf{A}^T$, hat die Elemente:

$$(\mathbf{A}^T)_{ij} = A_{ji} \quad (15)$$

6. Eine *komplex konjugierte* Matrix von $\mathbf{A}$, gekennzeichnet durch $\mathbf{A}^*$, hat die Elemente:

$$(\mathbf{A}^*)_{ij} = A_{ij}^* \quad (16)$$

7. Eine *adjungierte* Matrix von $\mathbf{A}$, gekennzeichnet durch $\mathbf{A}^\dagger$, hat die Elemente:

$$(\mathbf{A}^\dagger)_{ij} = A_{ji}^* \quad (17)$$

8. Für eine *unitäre Matrix* $\mathbf{A}$ gilt:

$$\mathbf{A}^{-1} = \mathbf{A}^\dagger \quad (18)$$

Eine reelle, unitäre Matrix wird orthogonal genannt.

9. Eine *hermitesche Matrix* ist selbst-adjungiert:

$$\mathbf{A}^\dagger = \mathbf{A} \quad (19)$$

Eine reelle, hermitesche Matrix wird symmetrisch genannt.

a) Gegeben seien die folgenden Matrizen:

$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} -1 & 1 & i \\ 2 & 0 & 3 \\ 2i & -2i & 2 \end{pmatrix} \quad \mathbf{B} = \begin{pmatrix} 2 & 0 & -i \\ 0 & 1 & 0 \\ i & 3 & 2 \end{pmatrix}$$

Geben Sie (i) $\mathbf{A} + \mathbf{B}$, (ii) $\mathbf{A}^T$, (iii) $\mathbf{A}^*$, (iv) $\mathbf{A}^\dagger$ und (v) $\text{Tr}(\mathbf{B})$ an. Berechnen Sie auch (vi) die Determinante von $\mathbf{B}$ ($\det(\mathbf{B})$) durch Zeilen- oder Spaltenentwicklung.

b) Gegeben seien folgende quadratische bzw. Spaltenmatrizen:

$$\mathbf{C} = \begin{pmatrix} 2 & 0 \\ -1 & 3 \end{pmatrix} \quad \mathbf{D} = \begin{pmatrix} -3 & -2 \\ 3 & 0 \end{pmatrix} \quad |\alpha\rangle = \begin{pmatrix} 2 \\ 1-i \end{pmatrix} \quad |\beta\rangle = \begin{pmatrix} 2+i \\ -2i \end{pmatrix}$$

Berechnen Sie (i) $\mathbf{C}^{-1}$, (ii) $\mathbf{CD}$, (iii) $\mathbf{C}|\alpha\rangle$, (iv) $\langle\beta|\alpha\rangle$ und (v) $\langle\alpha|\mathbf{D}|\beta\rangle$.

c) (i) Welche der folgenden Matrizen sind hermitesch?

$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} 4 & 16 & 9 \\ 16 & 3 & -1 \\ 9 & -1 & 7 \end{pmatrix} \quad \mathbf{B} = \begin{pmatrix} 1 & i & 2+i \\ -i & 2 & 3-i \\ 2-i & 3+i & 3 \end{pmatrix}$$

$$\mathbf{C} = \begin{pmatrix} 2 & 2+3i & 4-5i \\ 2-3i & 5 & 6+2i \\ 4+5i & 6-2i & -7i \end{pmatrix} \quad \mathbf{D} = \begin{pmatrix} 3 & 2-i & 4+i \\ 2-i & 9 & i \\ 4+i & i & 3 \end{pmatrix}$$

(ii) Zeigen Sie mithilfe von Gl. (14) und (18), dass $\mathbf{A}$ unitär ist, wenn: $\mathbf{A}\mathbf{A}^\dagger = \mathbb{E}$ gilt.

(iii) Ist die folgende Matrix unitär? Ist die Matrix orthogonal?

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