Vektor-/Hilberträume und Operatoren

Eine der wesentlichen Erkenntnisse der Mathematik im frühen 20. Jahrhundert war, dass sich Funktionen ganz ähnlich wie Vektoren verhalten. Das geht soweit, dass wir auch Vektor- und Hilberträume aus Funktionen bilden können.

Hilbert war laut Wikipedia übrigens ein Mathematiker, der sich besonders an der mathematischen Unzulänglichkeit von Physikern störte. Er war daher viel damit beschäftigt, hinter den Physikern aufzuräumen und deren Theorien mathematisch sauber zu formulieren. Berühmt ist das Zitat: „Die Physik ist für die Physiker eigentlich viel zu schwer."

Vektorraum

DEFINITION UND ZUTATEN:

Die Zutaten für einen Vektorraum lassen sich folgendermaßen zusammenfassen:

$$(V, (\mathbb{K}, +, \cdot), \oplus, \odot).$$

Dabei ist V eine Menge, deren Elemente *Vektoren* genannt werden. Wir werden Vektoren im Folgenden als Bras notieren, sodass

$$V = \{|v_1\rangle, |v_2\rangle, \ldots\}.$$

Außerdem enthält ein Vektorraum einen Körper $(\mathbb{K}, +, \cdot)$. Ein Körper wiederum besteht aus einer Menge $\mathbb{K}$ (üblicherweise reelle oder komplexe Zahlen, $\mathbb{K} = \mathbb{R}, \mathbb{C}$) sowie eine Addition und Multiplikation; die üblichen Operationen von reellen und komplexen Zahlen eben.

Und schließlich enthält ein Vektorraum noch zwei Verknüpfungen: Zum einen irgendeine Addition von Vektoren, deren Ergebnis wieder ein Vektor aus V ist,

$$|v_i\rangle \oplus |v_j\rangle \in V,$$

sowie irgendeine Multiplikation von einem Element aus $\mathbb{K}$ (also normalerweise einer Zahl) und einem Vektor, deren Ergebnis wiederum ein Vektor aus V ist:

$$x \odot |v_1\rangle \in V.$$

Man beachte, dass für einen Vektorraum *kein* Skalarprodukt definiert sein muss, also *keine* Abbildung von zwei *Vektoren* auf $\mathbb{K}$.

BEISPIELE:

Natürliche ist der gewöhnliche, dreidimensionale euklidische Raum, mit Spaltenvektoren $|v_i\rangle = \vec{v}_i$ ein Vektorraum mit $\mathbb{K} = \mathbb{R}$.

Ebenso kann V aber auch eine Menge von Matrizen beinhalten, das heißt $V = \mathbb{R}^{n\times n}$. Damit die Multiplikation mit einem Skalar $x \in \mathbb{K}$ wieder in V landet, muss $\mathbb{K} = \mathbb{R}$ sein. Es ist schon jetzt offensichtlich: Im Sinne des Vektorraumes ist weit mehr ein „Vektor", als die Schule uns unter diesem Begriff vermittelt.

Wir können V sogar als eine Menge von Funktionen wählen, etwa

$$V = \{\text{alle (reellen/komplexen) stetigen Funktionen im Intervall } [a, b]\}.$$

Dann wäre zum Beispiel

$$|v_1\rangle = 5 \sin x/3, \qquad |v_2\rangle = x^2 - \pi x + 5, \qquad \text{usw.}$$

BASIS:

Eine Basis B ist eine Teilmenge der Vektoren aus V, also $B \subset V$, aus der sich *alle* Vektoren aus V per *Linearkombination* darstellen lassen. Eine Menge $B = \{|b_1\rangle, |b_2\rangle, \dots\} \subset V$ bildet also genau dann eine Basis von V, wenn für alle $|v\rangle \in V$ (eindeutige) Zahlen $x_i \in \mathbb{K}$ existieren, sodass

$$|v\rangle = (x_1 \odot |b_1\rangle) \oplus (x_2 \odot |b_2\rangle) \oplus \cdots.$$

Es ist klar, wie eine Basis für den gewöhnlichen $\mathbb{R}^3$-Vektorraum aussieht. Wir könnte eine Basis für den Funktionen-Vektorraum aussehen? Wir wissen, dass wir alle (stetigen) Funktionen Taylorentwickeln können. Also muss wohl $B = \{1, x, x^2, x^3, \dots\}$ eine Basis sein. Diese hat unendliche viele Elemente. Also ist der Funktionen-Vektorraum ein *unendlich-dimensionaler* Vektorraum.

Hilbertraum

DEFINITION: VEKTORRAUM MIT SKALARPRODUKT:

Kurz gesagt: Ein Hilbertraum ist ein Vektorraum mit Skalarprodukt.[1] Ein Skalarprodukt ist eine Abbildung zwischen zwei Vektoren aus V auf die Menge $\mathbb{K}$. Wir wollen es als Braket notieren, also $\langle v_1|v_2\rangle \in \mathbb{K}$. Damit sich diese Verknüpfung „Skalarprodukt" nennen darf, muss sie allerdings noch weitere folgende Eigenschaften für alle $|v\rangle, |v_i\rangle \in V$ erfüllen:

$$\langle v|v\rangle \geq 0, \qquad \langle v|v\rangle = 0 \Leftrightarrow v = 0, \qquad \langle v_1|v_2\rangle^* = \langle v_2|v_1\rangle, \qquad \langle x\, v_1|v_2\rangle = x^* \langle v_1|v_2\rangle$$

$$\langle v_1 + v_2|v_3\rangle = \langle v_1|v_3\rangle + \langle v_2|v_3\rangle.$$

Aufgrund der dritten Eigenschaft folgt aus den beiden letzten auch sofort

$$\langle v_1|x\, v_2\rangle = x\langle v_1|v_2\rangle, \qquad \langle v_1|v_2 + v_3\rangle = \langle v_1|v_2\rangle + \langle v_1|v_3\rangle.$$

Für euklidische $\mathbb{R}^3$- oder $\mathbb{C}^3$-Vektoren verwendet man als solches Skalarprodukt typischerweise

$$\langle v_1|v_2\rangle \coloneqq \vec{v}_1^\dagger \vec{v}_2 \coloneqq v_{11}^* v_{21} + v_{12}^* v_{22} + v_{13}^* v_{23}.$$

Was könnte man für den Funktionenvektorraum verwenden? Hier erweist sich

$$\langle v_1|v_2\rangle \coloneqq \int_a^b dx\, v_1^*(x)\, v_2(x)$$

als gute Wahl (wir hatten den Funktionen-Vektorraum auf dem Intervall $[a, b]$ definiert). Es ist leicht einzusehen, dass diese Definition obige Axiome für das Skalarprodukt offensichtlich erfüllt.

ORTHONORMALBASIS:

Nun, da wir ein Skalarprodukt haben, können wir uns Gedanken, über eine *orthogonale* Basis machen, also eine Basis $B = \{|b_1\rangle, |b_2\rangle, \dots\} \subset V$, deren Vektoren bzgl. des jeweiligen Skalarprodukts orthogonal sind, das heißt

$$\langle b_i|b_j\rangle \sim \delta_{ij}.$$

Wie könnte eine solche Basis für den Funktionenvektorraum aussehen? Unsere oben vorgeschlagene Basis $\{1, x, x^1, x^2, \dots\}$ erfüllt diese Eigenschaft nicht (zumindest nicht, mit dem üblichen Skalarprodukt für Funktionen-Vektorräume):

$$\langle x^n|x^m\rangle \coloneqq \int_a^b dx\, x^n x^m \neq \delta_{nm}.$$

[1] Tatsächlich ist noch eine weitere Bedingung, die *Vollständigkeit*, nötig. Lasst uns das hier ignorieren; Hilbert und Co. sollen ja auch noch was zu tun haben.

Auf diese Basis sind wir durch die Taylorreihe gestoßen. Wenn das nicht klappt, vielleicht sollten wir es mal mit der Fourierreihe versuchen? Diese zerlegt beliebige Funktionen (auf symmetrischen Intervallen) in Linearkombinationen von $\sin nx$ und $\cos nx$. Somit ist auch

$$B = \{1, \sin x\,, \cos x\,, \sin 2x\,, \cos 2x\,, \dots\}$$

eine Basis des Funktionen-Vektorraums (die 1 kommt von $1 = \cos 0x$; der $\sin 0x = 0$ trägt offensichtlich zu keiner Linearkombination bei, ihn können wir vergessen). Tatsächlich kann man zeigen, dass zum Beispiel für das Intervall $[a, b] = [-\pi, \pi]$

$$\int_{-\pi}^{\pi} dx \sin nx \; \sin mx = \pi\delta_{nm}, \qquad \int_{-\pi}^{\pi} dx \cos nx \; \cos mx = \pi\delta_{nm}, \qquad \int_{-\pi}^{\pi} dx \sin nx \; \cos mx = 0$$

gilt. Mit $|b_1\rangle = 1, |b_2\rangle = \sin x\,, |b_3\rangle = \cos x\,, |b_4\rangle = \sin 2x$, usw. bedeutet das gerade, dass

$$\langle b_i | b_j \rangle = \pi\delta_{ij}.$$

Wenn wir die Basisvektoren mit $\pi^{-1/2}$ multiplizieren, bekommen wir sogar eine Ortho*normal*basis.

Tatsächlich gibt es in *Lemma von Zorn*, dass besagt, dass zu *jedem* Hilbertraum eine Orthonormalbasis konstruiert werden kann.

Operatoren

DEFINITION:

Operatoren sind Abbildungen zwischen Vektoren. Das heißt, A ist ein Operator, wenn $A|v\rangle$ für $|v\rangle \in V$ auch wieder ein Vektor in V ist, also

$$A|v\rangle \in V.$$

Für den $\mathbb{R}^3$-Vektorraum sind vor allem Matrizen Operatoren, aber zum Beispiel auch Skalare können als – zugegebenermaßen relativ triviale – Operatoren interpretiert werden.

Was ist unter Operatoren in Funktionen-Vektorräumen zu verstehen? Was bildet eine Funktion auf eine andere ab? Zum einen natürlich auch einfach Skalare, insbesondere aber auch Kombinationen von Ableitung und Funktionsvariablen, zum Beispiel

$$A = 2x^2 + \pi\frac{\partial^3}{\partial x^3} + \frac{\partial}{\partial x}.$$

Für $|v\rangle = x^2$ bekämen wir dann zum Beispiel

$$A|v\rangle = \left(2x^2 + \pi\frac{\partial^3}{\partial x^3} + \frac{\partial}{\partial x}\right)x^2 = 2x^4 + 2x = |v'\rangle,$$

wobei $|v'\rangle \in V$ ist, da es auch eine Funktion ist.

MATRIXDARSTELLUNG:

Mal angenommen, alle Bras und Kets, die wir notieren, seien *normierte* Vektoren (dann enthielte eine Vektorraum eben nicht mehr die Menge $\{|v_1\rangle, |v_2\rangle, \dots\}$, sondern $\{x_1 \odot |v_1\rangle, x_2 \odot |v_2\rangle, \dots | x_i \in \mathbb{R}\}$). Dann hätte der obige Operator A dieselbe Wirkung auf $|v\rangle$, wie das Objekt $|v'\rangle\langle v|$:

$$A|v\rangle = |v'\rangle, \qquad (|v'\rangle\langle v|)|v\rangle = |v'\rangle \underbrace{\langle v|v\rangle}_{=1} = |v'\rangle.$$

Offensichtlich macht also auch ein Objekt aus Ket und Bra wie $|v'\rangle\langle v|$ aus einem alten einen neuen Vektor und ist somit auch ein Operator. Natürlich gilt *nicht* unbedingt $A = |v'\rangle\langle v|$, denn dafür müsste die Wirkung dieser Objekte auf *alle* $|v\rangle \in V$ identisch sein, also etwa auch für $|v''\rangle \in A$:

$$A|v''\rangle \overset{?}{=} |v'\rangle\langle v|v''\rangle \qquad \forall\, |v''\rangle \in V.$$

Dies ist nun noch lange nicht der Fall. Dennoch; es sollte doch eine Möglichkeit geben, einen Operator durch eine *geeignete* Kombination aus Bras und Kets auszudrücken, sodass sie auf *alle* Vektoren gleich wirken. In Aufgabe 4a von Blatt 2 zeigen wir, dass wir für eine Basis $B = \{|b_1\rangle, |b_2\rangle, \dots\}$ einen Operator schreiben können als

$$A = \sum_{ij} a_{ij} |b_i\rangle\langle b_j|, \qquad \text{wobei} \qquad a_{ij} \coloneqq \langle b_i|A|b_j\rangle \coloneqq \langle b_i|Ab_j\rangle \overset{\text{Funktionen-}}{\underset{\text{Vektorraum}}{=}} \int dx\, b_i^*(x)\, A\, b_j(x).$$

Die *Matrix* mit Komponenten a_{ij} bezeichnet man als *Matrixdarstellung* des *Operators* A bzgl. der Basis B.