1 Lineare Algebra

1.1 Lineare Vektorräume

Beispiel für Vektoren mit mehr als Komponenten
Quantenmechanik:
MO-LCAO: Molecular Orbitals by Linear Combination of Atomic Orbitals
Das bindende σ-MO im H_2 ist

$$|\sigma\rangle = c_1(|1s_A + |1s_B\rangle) + c_2(|2s_A\rangle + |2s_B\rangle) + c_3(|2p_{zA}\rangle + \dots)$$

MO-Koeffizientenvektor: $(c_1, c_2, c_3, c_4, \dots)$ Def.: Eine Menge V von Vektoren $\vec{a}, \vec{b}, \dots$ heißen linearer Vektorraum, wenn gilt:

- Für alle Elemente $\vec{a}$, $\vec{b}$ Element von V gibt es genau ein Element $\vec{a} + \vec{b}$ Element von V (Die Summe zweier Elemente von V gehört wieder zu V)
- Assoziativgesetz: $\vec{a} + (\vec{b} + \vec{c}) = (\vec{a} + \vec{b}) + \vec{c}$ für $\vec{a}, \vec{b}, \vec{c}$ Element von V
- Kommutativgesetz: $\vec{a} + \vec{b} = \vec{b} + \vec{a}$
- Neutrales Element "Nullstelle $\vec{o}$ Element von V: $\vec{a} + \vec{o} = \vec{a}$
- Inverses Element $-\vec{a}$: $\vec{a} + (-\vec{a}) = 0$

Multiplikation mit reellen/komplexen Zahlen

- Für alle Elemente $\vec{a}$ Element V und z Element C gibt es genau ein Element $z \cdot \vec{a}$ Element V
- Assoziativgesetz
- Distributivgesetz

1.2 Dimension und Basis eines Vektorraums

Def.: Die Vektoren $\vec{a_1}, \dots, \vec{a_n}$ heißen linear unabhängig, wenn $\sum_{k=1}^{n} z_k \vec{a_k} = \vec{o}$ nur für $\vec{z_k} = 0 (k = 1, \dots, \dots)$ erfüllbar ist
Ist mindestens ein $z_k \neq 0$ wählbar, so heißen die Vektoren linear abhängig, d.h. ein Vektor lässt sich als Linearkombination der anderen schreiben:
$\vec{a_k} = -\frac{1}{z_k} \sum_{l=1, l\neq k}^{n} z_l \vec{a_l} = \sum_{l=1, l\neq k}^{a} z_b \vec{a_l}$ $\quad z_b = -\frac{z_l}{z_k}$
Beispiel

$$\left[\begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} \right]$$

$$z_1 \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix} + z_2 \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} + z_3 \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \vec{o}$$

$$z_1 0 + z_2 0 + z_3 1 = 0$$

$$z_1 1 + z_2 0 + z_3 1 = 0$$

$$z_1 1 + z_2 1 + z_3 0 = 0$$

Auflösen nach z_1, z_2, z_3 durch Addition bzw. Subtraktion von Vielfachen der Zeilen (Einzelgleichungen) bis Dreiecksform erreicht wurde, anschließend z_1, z_2, z_3 durch Rück-rechnung ermitteln, dies ist der Gaußsche Algorithmus
Hierbei gibt es 4 Möglichkeiten, dies ist eine Lösung:

$$0, 0, 2|0$$

$$0, -1, 1|0$$

$$1,1,0|0$$

Durch Rückrechnung:

$$z_3 = 0, z_2 = 0, z_1 = 0$$

Die Vektoren sind linear unabhängig voneinandern d.h. (hier) sie lieben nicht in einer Ebene aber auf einer Geraden!
Das von den Vektoren aufgespannte Spat hat ein Volumen $\neq 0$, d.h. die Detrminante ist ungleich 0, hier ergibt die Determinante 2.
Das Spatprodukt geht nur mit 3 3D-Vektoren, die allgemeine Determinantenmethode geht mit n nD-Vektoren
Entstünde beim LGS eine Mullzeile, kann ein Parameter frei gewählt werden, hierbei kann man diesen z.B. durch λ ersetzen. Da i.A. $\lambda \neq 0$ gewählt werden darf, sind die Vektoren linear abhängig, d.h. die liegen in einer Ebene,
$->$ Das von den Vektoren Aufgespannte Spat hat ein Volumen $= 0$, d.h. die Determinante würde hierbei 0 ergeben.

Linear abhängig heißt, dass einige Vektoren durch andere desselben Satzes ausdrückbar sind.

$$\begin{pmatrix} 0 \\ i \\ -i \end{pmatrix} = -i \left[\begin{pmatrix} -1 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \\ 0 \end{pmatrix} \right]$$

Def.: Die Maximalzahl linearunabhängiger Vektoren in der Menge V heißt Dimension des Vektorraums.

Beispiel:

Vorstellung	Dimension
Punkt	0
Gerade	1
Ebene	2
Raum	3

$->$ Die Vektoren $\vec{o}, \vec{a}$ sind immer linear abhängig.
$->$ m $>$ n n-dimensionale Vektore sind immer linear abhängig.
Def.: Eine Menge B, die die Maximalzahl lineat unabhängiger Vektoren in der Menge V enthält, heißt Basis des Vekotrraumes V. Jeder Vektor $\vec{a_i}$ Element in V lässt sich als Linearkombination der Basisvektoren $\vec{b_j}$ Element in B c V. darstellen:

$$\vec{a_i} = \sum_{k=1}^{n} \alpha_{ki} \vec{b_k} = (\alpha_{1i}, \alpha_{2i}, \alpha_{3i}, \ldots, \alpha_{ni})$$

Dies ist die Komponentendarstellung

Anmerkung: Im allgemeinen gibt es mehr als nur eine mögliche Basis.
Aber: Die Anzahl der linear unabhängigen Basisvektoren ist immer gleich der Dimensionalität.

Beispiel: 3D-Raum
Basis:

$$i = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, j = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}, k = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

Beliebiger Vektor darstellbar durch

$$\vec{a_i} = \sum_{k=1}^{n} \alpha_{ki} \vec{b_k}$$

Zum Beispiel:

$$\begin{pmatrix} 3 \\ 1 \\ -1 \end{pmatrix} = 3i + j - k$$

Diese abkürzende Schreibweise gibt nur die Koeffizienten α_{ki} an, nicht die Basisvektoren. Sie macht aber ohne Festlegung der Basisvektoren keinen Sinn, denn in anderer Basis sind die Koeffizienten im Allgemeinen anders.

Neue Basis (ausgedrückt in alter Basis i, j, k)

$$\vec{l} = \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}_{ijk} = i + j$$

$$\vec{m} = \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \\ 0 \end{pmatrix}_{ijk} = i - j$$

$$\vec{n} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ -1 \end{pmatrix}_{ijk} = -k$$

Selber Vektor von oben in neuer Basis:

$$\begin{pmatrix} 3 \\ 1 \\ -1 \end{pmatrix}_{ijk} = 2 \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}_{ijk} + \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \\ 0 \end{pmatrix}_{ijk} + \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ -1 \end{pmatrix}_{ijk}$$

$$\begin{pmatrix} 3 \\ 1 \\ -1 \end{pmatrix}_{ijk} = 2\vec{l} + \vec{m} + \vec{n} = \begin{pmatrix} 2 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix}_{lmn}$$

Beispiel: $\left\{1, x, x^2, \dots\right\}$ bilden die Basis der unendlich dimensionalen Vektorraums der Polynome.

$$P_5\left(x\right) = 7 + 3x^2 + 4x^3 - x^5$$

ist darstellbar als

$$(7, 0, 3, 4, 0, -1)$$

Dies sind die jeweiligen Koeffizienten.
Def.: Eine Teilmenge von Vektoren eines Vektorraums $\mathbb{V}$ bildet einen Untervektorraum $\mathbb{U}$, wenn alle Kriterien einer Vektorraumes erfüllt werden.
Trivial: $\{\vec{o}\}$ sowie $\mathbb{V}$ sind Untervektorräume von $\mathbb{V}$.
Beispiel:
Gerade ist eindimensionaler Unterraum einer Ebene. Ebene ist zweidimensionaler Unterraum des 3D-Raums.

1.3 Spezielle lineare Vektorräume

1.3.1 Euklidische Vektorräume

a) Def.: Eine mathematische Operation φ, die zwei Vektoren eines Vektorraums $\mathbb{V}$ eine reelle Zahl zuordnet, heißt Skalarprodukt, wenn gilt:
für $\vec{a}, \vec{b}, \vec{c} \in \mathbb{V}$

1) Distributivgesetz
2) Kommutativgesetz
3) Homogenität $x \in \mathbb{R}$

   $\varphi\left(x\vec{a}, \vec{b}\right) = \varphi\left(\vec{a}, x\vec{b}\right) = x\varphi\left(\vec{a}, \vec{b}\right)$

- positive Definitheit

  $\varphi\left(\vec{a}, \vec{a}\right) > 0$ für $\vec{a} \neq \vec{0}$

Beispiel: Skalarprodukt zwischen

$$\vec{a} = (x_a, y_a), \vec{b} = (x_b, y_b)$$

$$=> \vec{a}\vec{b} = x_a x_b + y_a y_b$$

Beispiel Skalarprodukt zwischen $|a\rangle = a(x), |b\rangle = b(x)$

$$=> \varphi(a, b) =< a|b\rangle = \int a(x)b(x)dx$$

b) Def.: Die Norm (Länge) eines Vektors $\vec{a} \in \mathbb{V}$ ist von der Definition her:

$$||\vec{a}|| = \sqrt{\varphi(\vec{a}, \vec{a})} = \sqrt{\vec{a} \cdot \vec{a}}$$

Anmerkung: Das ist eine von unendlich vielen möglichen Norm-Definitionen
Einheitsvektor, normierter Vektor $\hat{a} : ||\hat{a}|| = 1$

$$\hat{a} = \frac{\vec{a}}{||\vec{a}||}$$

für $\vec{a} \neq \vec{o}$
Winkel zwischen zwei Vektoren

$$\cos\gamma = \frac{\varphi\left(\vec{a}, \vec{b}\right)}{||\vec{a}|| \cdot ||\vec{b}||} = \frac{\vec{a}\vec{b}}{||\vec{a}|| \cdot ||\vec{b}||}$$

Zwei Vektoren sind orthogonal, wenn $\varphi\left(\vec{a}, \vec{b}\right) = \vec{a}\vec{b} = 0$ gilt:
Spezialfall $\vec{o}\vec{a} = 0$ für alle $\vec{a}$
Anmerkung: Bisher war der Betrag des Vektors $\vec{a}\,(x_a, y_a)$ gegeben als:

$|\vec{a}| = \sqrt{x_a^2 + y_a^2 + z_a^2}$

Warum als $||\vec{a}||$?

Verallgemeinerung auf Funktionen erfordert eine Unterscheidung.
Betragsbildung:

$$f(x) = -x^2, |f| = |-x^2| = x^2; x \in \mathbb{R}$$

Normbildung:

$$f(x) = -x^2, ||f|| = \left[\int_{x_1}^{x_2} \left(-x^2\right)^2 \, dx\right]^{\frac{1}{2}}$$

$$= \left[\int_{x_1}^{x_2} x^4 \, dx\right]^{\frac{1}{2}} = \left[\frac{x^5}{5}|_{x_1}^{x_2}\right]^{\frac{1}{2}} = \text{Zahl}$$

c) Def.: Ein Satz von Basisvektoren $\{\vec{e_i}\}$ heißt Orthonormalsystem (orthonomiert), wenn gilt:

$$\varphi(\hat{e_i}, \hat{e_j}) = \hat{e_i}\hat{e_j} = \delta_{ij} = 1\,(i = j)\,\text{bzw.}0\,(i \neq j)$$

Ist die Anzahl der Basisvektoren gleich der DImension des Vektorraums, so geiüt die Basis vollständig. (<u>V</u>ollständig <u>O</u>rtho<u>N</u>ormal<u>S</u>ystem, VONS)
Satz: Sind die $m \leq n$ Vektoren $\vec{e_1}, \vec{e_2}, \vec{e_3}, \ldots, \vec{e_m}$ in $\mathbb{V}^n$ paarweise zueinander orthogonal, so sind sie auch linear unabhängig. (Die Untersuchung des Satzes gilt nicht!)
Beispiel: Basisvektoren $\left\{\hat{i}, \hat{j}, \hat{k}\right\}$ des dreidimensionalen Raums: karthesisches Koordinatensystems
Jeder Vektor $\vec{a} \in \mathbb{V}$ lässt sich nach einem VONS entwickeln.

$$\vec{a} = \sum_{i=1}^{n} a_i\hat{e_i} = (a_1, a_2, \ldots, a_n)$$

$\vec{a} = \begin{pmatrix} 3 \\ 2 \\ 1 \end{pmatrix}$ nach $\hat{i}, \hat{j}, \hat{k}$ entwickeln: $\vec{a} = 3\hat{i} + 2\hat{j} + \hat{k}$ Komponentendarstellung des Skalarprodukts (in einem Orthonormalsystem)

$$\vec{a} \cdot \vec{b} = \left(\sum_{i=1}^{n} a_i \hat{e_i} \right) \left(\sum_{j=1}^{n} b_j \hat{e_j} \right) = \sum_{i=1}^{n} \sum_{j=1}^{n} a_i b_j (\hat{e_i} \hat{e_j}) = \sum_{i=1}^{n} a_i b_i$$

Wobei $\hat{e_i}\hat{e_j} = \delta_{ij}$ c) Konsturktion eines ONS aus linear unabhängigen Vektoren
Das Gramschmidsche Orthogonalitätsverfahren.

gegeben: linear unabhängiger, jedoch nicht notwendigerweise normierter und nicht notwendigerweise orthogonale Vektoren $\{\vec{a_i}\}$.

gesucht:ONS im von $\{\vec{a_i}\}$ aufgespannten Vektorraum.

Vorgehen:

1) Normierung von $\vec{a_1} : \hat{a}_1 = \frac{\vec{a_1}}{||\vec{a_1}||}$
2) Setze $i = 2$
3) Orthogonalisierung von $\vec{a_i}$ auf alle $\vec{a_j}$ mit $j < i$

   $\vec{a_1}' = \vec{a_i} - \sum_{j=1}^{i-1} (\hat{a}_j \vec{a_i}) \hat{a}_j$

   wobei $\hat{a}_j \vec{a_i}$ die Komponente von $\vec{a_i}$ in Richtung von $\hat{a}_j$ ist

   Notiz: **Das Skalarprodukt eines Vektors $\vec{\mathbf{r}}$ mit einem Einheitsvektor $\hat{\mathbf{e}}$ ergibt die Projektion von $\vec{\mathbf{r}}$ auf die Richtung von $\hat{\mathbf{e}}$**

4) Normierung von $\vec{a_i}' : \hat{a}_i = \frac{\vec{a_i}'}{||\vec{a_i}||}$
5) Erhöhe i um 1 für $i < n$ und gehe zurück zu 3), ansonsten fertig, wenn $i = n$

Beispiel:
VONS aus

$$\left\{ \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix} \right\} = \{\vec{a_1}, \vec{a_2}, \vec{a_3}\}$$

Lineare Unabhängigkeit, da das Bilden der Determinanten $\neq 0$ als Ergebnis liefert.

1) Normierung von $\vec{a_1} : \hat{a}_1 = \frac{\vec{a_1}}{||\vec{a_1}||} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}$
2) Orthogonalisierung von $\vec{a_2}$ auf $\hat{a}_1$:

$$(\vec{a_2} \cdot \hat{a}_1) = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} = \frac{1}{-}\sqrt{2}$$

$$(\vec{a_2} \cdot \hat{a}_1)\, \hat{a}_1 = \frac{1}{\sqrt{2}} \cdot \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}$$

$$\vec{a_2}' = \vec{a_2} - (\vec{a_2} \hat{a}_1)\, \hat{a}_1 = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} - \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{1}{2} \\ -\frac{1}{2} \\ 1 \end{pmatrix} \approx \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \\ 2 \end{pmatrix}$$

3) Normierung von $\vec{a_2}'$

$\hat{a_2} = \frac{\vec{a_2}'}{||\vec{a_2}'||} = \frac{1}{\sqrt{6}} \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \\ 2 \end{pmatrix}$

4) Orthogonalisierung von $\vec{a_3}$ auf $\hat{a_1}$ und $\vec{a_2}$

$$\vec{a_3}' = \vec{a_3} - (\vec{a_3}\hat{a_1})\,\hat{a_1} - (\vec{a_3}\hat{a_2})\,\hat{a_2}$$

$$(\vec{a_3}\hat{a_1}) = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}}$$

$$(\vec{a_3}\hat{a_1})\,\hat{a_1} = \frac{1}{\sqrt{2}}\frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}$$

$$(\vec{a_3}\hat{a_2}) = \frac{1}{\sqrt{6}} \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \\ 2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{6}}\,(-1+2) = \frac{1}{\sqrt{6}}$$

$$(\vec{a_3}\hat{a_2})\,\hat{a_2} = \frac{1}{\sqrt{6}}\frac{1}{\sqrt{6}} \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \\ 2 \end{pmatrix} = \frac{1}{6} \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \\ 2 \end{pmatrix}$$

$$\vec{a_3}' = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix} - \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} - \frac{1}{6} \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \\ 2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -\frac{4}{6} \\ \frac{4}{6} \\ \frac{4}{6} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \\ -1 \end{pmatrix}$$

5) Normierung von $\vec{a_3}'$: $\hat{a_3} = \frac{\vec{a_3}'}{||\vec{a_3}'||} = \frac{1}{\sqrt{3}} \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \\ -1 \end{pmatrix}$

Test:

$$\det(\hat{a_1}, \hat{a_2}, \hat{a_3}) = \frac{1}{\sqrt{2}}\frac{1}{\sqrt{6}}\frac{1}{\sqrt{3}} \begin{vmatrix} 1 & 1 & 1 \\ 1 & -1 & -1 \\ 0 & 2 & 1 \end{vmatrix} = \frac{1}{6}\,(1+2+2+1) = 1$$

Das Ergebnis eines VONS-Rechtssystemes ist **IMMER** 1!

1.4 Lineare Operatoren

1.4.1 Grundlagen

Def.: Ein Operator A ist eine (Rechen-) Vorschrif, durch welche einem Vektor $|a\rangle$ (einer Funktion a) ein Vektor $|b\rangle$ (eine Funktion b) zugeorddnet werden kann.

$$A|a\rangle = |b\rangle$$

Für einen linearen Operator gilt:

$$A\,(|a\rangle + |b\rangle) = A|a\rangle + A|b\rangle$$

$$A\,(\alpha|a\rangle) = \alpha\,(A|a\rangle)$$

Dies gilt für alle $|a\rangle, |b\rangle \in \mathbb{V}$ und $\alpha \in \mathbb{R}$

Satz: Ist A, B linear, so ist auch $(A+B), (A \cdot B)$ linear

Beispiele: Translation, Rotation, Inversion, ...

1.4.2 Verknüpfung von Operatoren

a) Summe: $(A + B)|a\rangle = A|a\rangle + B|b\rangle$

b) Produkt: $(A \cdot B)|a\rangle = A(B|a\rangle) \neq B(A|a\rangle)$
Im Allgemeinen Nichtvertauschbarkeit von A und B

Beispiel:

A: "Quadrieren", Skalarproduktbildung mit sich selbst.

B: Multiplizieren mit $\alpha \in \mathbb{R}$

$$AB|a\rangle = A|\alpha a\rangle = \langle a\alpha|\alpha a\rangle = \alpha^2\langle a|a\rangle$$
$$BA|a\rangle = B\langle a|a\rangle = \alpha\langle a|a\rangle$$

Das heißt: $(AB - BA)|a\rangle \neq 0$
Definition $[A, B] = [A, B]_- = AB - BA$ Kommutator
$[a, B]_+ = AB + BA$ Antikommutator

Zwei Operatoren heißen vertauschbar (kommutieren), wenn gilt: $[A, B] = 0$

Beispiel:

A: Drehung um $\frac{\pi}{2}$ (gegen den Uhrzeigersinn)

B: Spiegelung an $y = 0$ (x-Achse)

1.5 Matrizen

1.5.1 Matrixdarstellung von Operatoren

Gegeben: VONS $\{|\hat{e}_i\rangle\}$, linearer Operator A

Alle Informationen über die Wirkungsweise von A steckt in den den Bildvektoren $\{|A\hat{e}_i\rangle\}$!

$$A|a\rangle = A\sum_{i=1}^{n} a_i|\hat{e}_i\rangle = \sum_{i=1}^{n} a_i(A|\hat{e}_i\rangle) = |b\rangle$$

quadratisches Zahlenschema mit $A|\hat{e}_i\rangle$ als i-te Spalte
Matrixdarstellung von A in der Basis $\{|\hat{e}_i\rangle\}$ (Basisabhängig)

Es gilt:

$$|b\rangle = \sum_k b_k\vec{e}_k = A\sum_l a_l\vec{e}_l = \sum_l a_l A\vec{e}_l$$

Multipliziere mit $\vec{e}_j$ ergibt

$$\sum_k b_k\vec{e}_j\vec{e}_k = \sum_l a_l\vec{e}_j A\vec{e}_l = b_j = \sum_l A_{jl}a_l$$

$\vec{e}_j\vec{e}_k = \delta_{jk}$ und $\vec{e}_j A\vec{e}_l = A_{jl}$

Beispiel: Spiegelung an der xz-Ebene und die Streckung um den Faktor 2
VONS $\left\{\hat{\imath}, \hat{\jmath}, \hat{k}\right\}$

$A\hat{\imath} = 2\hat{\imath}$

$A\hat{\jmath} = -2\hat{\jmath}$

$A\hat{k} = 2\hat{k}$

$$A = \begin{pmatrix} 2 & 0 & 0 \\ 0 & -2 & 0 \\ 0 & 0 & 2 \end{pmatrix} = 2 \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

Spiegelung des Vektors $\vec{a} = (1, 2, 3)$ an der xz-Ebene und Streckung um den Faktor 2.

$$A|a\rangle = \sum_i a_i \left(A|\hat{e}_i\rangle\right) \Rightarrow \left(A|a\rangle\right)_j = \sum_i a_i A_{ji}$$

Merkschema: Matrix A mal Vektor a

$$A\vec{a} = \begin{pmatrix} 2 & 0 & 0 \\ 0 & -2 & 0 \\ 0 & 0 & 2 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} 1 \\ 2 \\ 3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 2 \cdot 1 & 0 \cdot 2 & 0 \cdot 3 \\ 0 \cdot 1 & -2 \cdot 2 & 0 \cdot 3 \\ 0 \cdot 1 & 0 \cdot 2 & 2 \cdot 3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 2 \\ -4 \\ 6 \end{pmatrix}$$

1.5.2 Addition und Multiplikation von Matrizen

(A,B sind Matrixdarstellungen linearer Operatoren)
Addition:

$$(A + B)|a\rangle = A|a\rangle + B|a\rangle$$

i-te Komponente:
Linke Seite:

$$\left[(A + B)\,|a\rangle\right]_i = \sum_{j=1}^{n} (A + B)_{ij}\, a_j$$

Rechte Seite:

$$= \left[A|a\rangle\right]_i + \left[B|a\rangle\right]_i = \sum_{j=1}^{n} A_{ij} a_j + \sum_{j=1}^{n} B_{ij} a_j$$

Somit:

$$= \left(A_{ij} + B_{ij}\right) a_j$$

$\rightarrow$ Matrizen werden addiert (subtrahiert), indem man ihre Elemente addiert (subtrahiert):

$$(A \pm B)_{ij} = A_{ij} \pm B_{ij}$$

Beispiel:

$$\begin{pmatrix} 1 & 2 \\ 3 & 4 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 1 & 3 \\ 2 & 4 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 2 & 5 \\ 5 & 8 \end{pmatrix}$$

Multiplikation:

$$(AB)|a\rangle = A(B|a\rangle)$$

i-te Komponente: linke Seite:

$$\left[(AB)\,|a\rangle\right]_i = \sum_{j=1}^{n} (AB)_{ij}\, a_j =$$

rechte Seite:

$$\left[A\,(B)\,|a\rangle\right]_i = \sum_{l=1}^{n} A_{il} \left[B|a\rangle\right]_l = \sum_{l=1}^{n} A_{il} \sum_{j=1}^{n} B_{lj} a_j$$

$$= \sum_{j=1}^{n} \sum_{l}^{n} A_{il} B_{lj} a_j$$

Das ij-te Element der Produktmatrix (AB) ist das Skalarprodukt der i-ten Teile von A und der j-ten Spalte von B.

$$(AB)_{ij} = \sum_{l=1}^{n} A_{il} B_{li}$$

Es ist keine Matrixdivision definiert - wohl aber eine Inversion A^{-1}
Beispiele: Pauli-Spinmatrizen

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

$$\sigma_x\sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -i & 0 \\ 0 & i \end{pmatrix}$$

$$\sigma_y\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -i & 0 \\ 0 & i \end{pmatrix}$$

Beispiel: Aus A^2 folgt nicht $A = 0$!

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

1.6 Matrizen mit speziellen Eigenschaften

1.6.1 Die Einheitsmatrix E (auch $I, 1$)

$$E_{ij} = \delta_{ij} = \begin{matrix} 0 \text{ für } i \neq j \\ 1 \text{ für } i = j \end{matrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

Es gilt: $AE = EA = A$ mit $E|a\rangle = |a\rangle$
ij-tes Element

$$(AE)_{ij} = \sum_{l=1}^{n} A_{il}\delta_{lj} = A_{ij}$$

$$(EA)_{ij} = \sum_{l=1}^{n} \delta_{il}A_{lj} = A_{ij}$$

i-te Komponente

$$(E|a\rangle)_i = \sum_{j=1}^{n} E_{lj}a_j = \sum_{j=1}^{n} \delta_{ij}a_j = a_i$$

1.6.2 Digitalmatrix D

Besonderheit: $AB = BA$, wenn A und B beide diagonal sind.
Die <u>Spur</u> einer Matrix ist die Summe ihrer Diagonalelemente.

$$Sp(D) = \sum_i d_i, Sp(E) = n$$

allgemein:

$$Sp(A) = \sum_i A_{ii}$$

$$Sp(AB) = Sp(BA)$$

Es gilt: D^m ist die Matrx im $(D^m)_{ij} = d_i^m\delta_{ij}$ für $, \in \mathbb{R}$
Beispiel:

$$(D^2)_{ij} = \sum_{l=1}^{n} D_{il}D_{lj} = \sum_{l=1}^{n} d_i d_j \delta_{il}\delta_{lj} = d_i^2\delta_{ij}$$

1.6.3 Die inverse Matrix

Definition:

$$A \cdot A^{-1} = A^{-1} \cdot A = E$$

A^{-1} repräsentiert diejenige Operation, die die durch A repräsentierte Operation rückgängig macht
A^{-1} existiert, falls $\det(A) \neq 0$ gilt: A heißt dann reguläre Matrix und ist invertierbar (sonst ist A singulär)

Beispiel: Inverse Matrix von $A = \begin{matrix} 1 & 0 \\ -1 & 1 \end{matrix}$

$\det(A) = 1$, d.h. A ist regulär, A^{-1} existiert.

$$AA^{-1} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ -1 & 1 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} = E$$

1)

$$a = 1, -a + c = 0 \rightarrow c = 1$$

2)

$$b = 0, -b + d = 1 \rightarrow d = 1$$

somit:

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

1.6.4 Die transponierte Matrix $\tilde{A}, A^T, A^+$

Def.:

$$(\tilde{A})_{ij} = A_{ji}$$

$\tilde{A}$ entsteht aus A durch Vertauschen von Zeilen und Spalten bzw. durch Spiegelung der Matrix an der Hauptdiagonalen
Def.: Symmetrische Matrix: $\tilde{A} = A$ Beispiel:

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

Def.: Orthogonale Matrix $\tilde{A} = A^{-1}$
Beispiel:

$$A = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \end{pmatrix}, \tilde{A} = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

Eigenschaften orthogonaler Matrizen:
1.

$$AA^{-1} = E = A\tilde{A}$$

Wobei $A\tilde{A}$ das Skalarprodukt der i-ten und j-ten Teilen von A ergibt δ_{ij}, das heißt Zeilenvektoren sind othonormiert.
2.

$$1 = \det(E) = \det(AA^{-1}) =^* \det(A)\det(A^{-1}) = \det(A)\det(\tilde{A}) = [\det(A)]^2$$

* - Eigenschaften von Determinanten det:

- $\det(A) = \det(\tilde{A})$
- $\det(AB) = \det(A) \cdot \det(B)$

Es muss gelten:

$$\det(A) = \pm 1, \text{ falls} A \text{ eine orthogonale Matrix ist}$$

Ganz allgemein:

$$(AB)^T = B^T A^T$$

1.6.5 Die adjungierte Matrix A^+

Erweiterung der Transporniertenbildung auf komplexe Matrizen
Def.:

$$A^+ = (\tilde{A})^*$$

Def.: selbstadjungierte Matrix (hermitische Matrix)

$$A^+ = A$$

(entspircht symmetrischen Matrizen im Komplexen)
Beispiel: alle quantenmechanische Operatoren sind hermitische

$$s_y = \frac{1}{2}\sigma_y = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}$$

$$s_y^+ = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}^* = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} = s_y$$

Def.: Unitäre Matrizen $A^+ = A^-1$ entsprechen orthogonalen Matrizen im komplexen Zahlenraum

1.7 Determinanten

1.7.1 Definition

Die Determinante einer quadratischen Matrix A der Dimension n ist eine Zahl, welche durch Anwendung der folgenden Rechenvorschrift bestimmt wird.

$$\det(A) = \begin{vmatrix} A_{11} & A_{12} & \dots \\ A_{21} & A_{22} & \dots \\ \vdots & \vdots & \ddots \end{vmatrix} =^{Def} \sum_p (-1)^{j(p)} \cdot A_{1i_1} \cdot A_{2i_2} \cdot A_{3i_3} \cdot \dots \cdot A_{ni_n}$$

$\sum_p$ gibt somit die Summer über alle möglichen Permutationen der Zahlen $1, 2, \dots, n$ an.
$j(p)$ ist die Anzahl der INversionen der Permutationen $p = \begin{pmatrix} 1 & 2 & \dots & n \\ i_1 & i_2 & \dots & i_n \end{pmatrix}$.
Beispiel:

$$\begin{vmatrix} 3 & 1 & 2 \\ 0 & 4 & -1 \\ 2 & 1 & 7 \end{vmatrix} = \begin{array}{ccccccc} A_{1i_1}\cdot & A_{2i_2}\cdot & A_{3i_3} & i_1 & i_2 & i_3 & j \\ (+)3\cdot & 4\cdot & 7 & (1 & 2 & 3) & 0 \\ -3\cdot & (-1)\cdot & 1 & (1 & 3 & 2) & 1 \\ -1\cdot & 0\cdot & 7 & (2 & 1 & 3) & 1 \\ (+)1\cdot & (-1)\cdot & 2 & (2 & 3 & 1) & 2 \\ (+)2\cdot & 0\cdot & 1 & (3 & 1 & 2) & 2 \\ -2\cdot & 4\cdot & 2 & (3 & 2 & 1) & 1 \end{array}$$

$$84 + 2 - 0 - 2 + 0 - 16 = 69$$

Bemerkungen:
- Determinanten stellen eine Kerngröße für eine Matrix dar. **1.** Laplace'scher Entwicklungssatz:

- Entwischlung nach der i-ten Zeile

$$\det(A) = \sum_{k=1}^{n} (-1)^{i+k} A_{ik} D_{ik}$$

Wobei D_{ik} eine Unterdeterminante ist das heißt, Determinante der $(n-1) \times (n-1)$ Matrix, die entsteht, wenn von A die i-te Zeile und k-te Spalte gestrichen wird.
2. Entwicklung nach der Spalte

$$det(A) = \sum_{i=1}^{n} (-1)^{i+k} A_{ik} D_{ik}$$

Wiederholte Anwendung des Entwicklungssatzes: Zurückführen auf Unterdeterminanten 3.Ordnung und 2. Ordnung

$$\begin{vmatrix} a & b & c \\ d & e & f \\ g & h & i \end{vmatrix} = a \begin{vmatrix} e & f \\ h & i \end{vmatrix} - b \begin{vmatrix} d & f \\ g & i \end{vmatrix} - c \begin{vmatrix} d & e \\ g & h \end{vmatrix} = aei + bfg + cdh - ceg - bdi - afh$$

$$\begin{vmatrix} a & b \\ c & d \end{vmatrix} = ad - bc$$

Beispiel:

$$\begin{vmatrix} (+)2 & 7 & 1 & 4 \\ (-)5 & (+)0 & (-)0 & (+)3 \\ -1 & 2 & 1 & 0 \\ 4 & 5 & -1 & 1 \end{vmatrix} = -5 \begin{vmatrix} 7 & 1 & 4 \\ 2 & 1 & 0 \\ 5 & -1 & 1 \end{vmatrix} + 3 \begin{vmatrix} 2 & 7 & 1 \\ -1 & 2 & 1 \\ 4 & 5 & -1 \end{vmatrix}$$

Hier wurde nach der 2. Zeile entwickelt, da nur 2 Unterdeterminanten notwendig sind.

$$-5(7 - 8 - 20 - 2) + 3(-4 + 28 - 5 - 8 - 10 - 7) = 97$$

Spezialfall: Determinante einer Dreiecksmatrix ist das Produkt der Diagonalelemente

$$\begin{vmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 3 & 2 & 0 & 0 \\ 7 & -1 & 3 & 0 \\ 5 & 0 & 6 & 4 \end{vmatrix} = 4 \begin{vmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 3 & 2 & 0 \\ 7 & -1 & 3 \end{vmatrix} = 4 \cdot 3 \begin{vmatrix} 1 & 0 \\ 3 & 2 \end{vmatrix} = 4 \cdot 3 \cdot 2 \cdot 1 = 24$$

Hier wurde jeweils nach der letzten Spalte entwickelt.

1.7.2 Eigenschaften von Determinanten

a) Eine Determinante verschwindet (hat den Wert 0), wenn Zeilen (doer Spalten) linear abhängig (oder identisch) sind.

Beweis: Laplace-Entwicklung bis zur Unterdeterminante 2.Ordnung

$$\begin{vmatrix} \lambda a & \lambda b \\ a & b \end{vmatrix} = \lambda ab - \lambda ab = 0$$

$$\begin{vmatrix} \lambda a & a \\ \lambda b & b \end{vmatrix} = \lambda ab - \lambda ab = 0$$

b) Die Bildung der transponierten Matrix ändert nicht den Wert der Determinante.

Beweis: zeilen bzw. Spalten spielen bei der Definition der Determinante bzw. im Laplace-Entwicklungssatz dieselbe Rolle.

$$\begin{vmatrix} a & b \\ c & d \end{vmatrix} = ad - bc, \begin{vmatrix} a & c \\ b & d \end{vmatrix} = ad - bc$$

c) Ein gemeinsamer Faktor in <u>einer</u> Zeile (Spalte) kann vor die Determinante gezogen werden.

Beweis: Entwicklung nach der Zeile (Spalte), aus der λ herausgezogen werden soll:

$$\sum_{k=1}^{n} (-1)^{i+k} (\lambda A_{ik}) D_{ik} = \lambda \sum_{k=1}^{n} (-1)^{i+k} A_{ik} D_{ik} \text{ für } i\text{-te Zeile}$$

d) Die Vertauschung zweier Zeilen bzw. Spalten ändert das Vorzeichen der Determinanten

Beweis: Rückführung auf Unterdeterminante 2.Ordnung mit dem Laplace-Entwicklungssatz, wobei diese die Elemente der zu vertauschenden Zeilen (Spalten) enthalten.

$$\begin{vmatrix} a & b \\ c & d \end{vmatrix} = ad - cb = -(bc - ad) - \begin{vmatrix} c & b \\ a & b \end{vmatrix} = - \begin{vmatrix} b & a \\ d & c \end{vmatrix}$$

e) Zeilen bzw. Spalten in Determinanten können beliebig linearkombiniert werden, ohne dass sich der Wert der Determinanten ändert.

$$\begin{vmatrix} a & b \\ c + \lambda a & d + \lambda b \end{vmatrix} = ad + \lambda ab - bc - \lambda ab = ad - bc$$

f) Multiplikationssatz für Determinanten: $\det(AB) = \det(A)\det(B)$

$$\det(A)\det(B) = \begin{pmatrix} ae + bg & af + bh \\ ce + dg & cd + dh \end{pmatrix} = AB$$

$$\begin{aligned} \det(AB) &= (ae + bg)(cf + dh) - (ce + dg)(af + bh) = acef + adeh + befg + bdgh - acef - bceh - adfg - bdgh \\ &= (ad - cb)(eh - fg) = \det(A)\det(B) \end{aligned}$$

Warnung: Es gilt <u>nicht</u>: $\det(A + B) = \det(A) + \det(B)$