3.4.5. Diagonalisierung hermitescher/symmetrischer Matrizen

Generell betrachten wir nun Matrizen mit komplexen Elementen.
[Erinnerung: mit a^* wird die konjugiert komplexe Zahl zu a bezeichnet]

Eine Matrix $\underline{A}$ heißt **hermitesch**, wenn $(a_{ik}) = (a_{ki}^*)$, d.h. $\underline{A} = (\underline{A}^T)^*$

[vergleiche: Operator Â heißt hermitesch, wenn $\langle\Phi|\,\hat{A}\,|\Psi\rangle = \langle\Psi|\,\hat{A}\,|\Phi\rangle^*$]

Reelle symmetrische Matrix als Spezialfall: $(a_{ik}) = (a_{ki})$, d.h. $\underline{A} = \underline{A}^T$

Hermitesche und somit auch reelle symmetrische Matrizen vom Typ (n, n) besitzen <u>reelle Eigenwerte</u> und genau n <u>orthogonale</u> Eigenvektoren.

Die Eigenvektoren zu verschiedenen Eigenwerten sind von vornherein orthogonal, nach Normierung sind sie orthonormal. Aus den s_i linear unabhängigen Eigenvektoren zu einem s_i-fach entarteten Eigenwert (s_i-fache Nullstelle der Säkulardeterminante, auch charakteristisches Polynom genannt) kann ein Satz aus s_i orthonormalen Eigenvektoren erzeugt werden (Schmidtsches Orthogonalisierungsverfahren, siehe Literatur).

Für eine Matrix $\underline{X}$, die aus orthonormalen Vektoren $\underline{x}^{(1)} \ldots \underline{x}^{(n)}$ als Spalten gebildet wird, folgt nach den allgemeinen Regeln der Matrizenmultiplikation:

$$\begin{pmatrix} x_1^{(1)} & x_2^{(1)} & \ldots & x_n^{(1)} \\ x_1^{(2)} & x_2^{(2)} & \ldots & x_n^{(2)} \\ \ldots & \ldots & \ldots & \ldots \\ x_1^{(n)} & x_2^{(n)} & \ldots & x_n^{(n)} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1^{(1)} & x_1^{(2)} & \ldots & x_1^{(n)} \\ x_2^{(1)} & x_2^{(2)} & \ldots & x_2^{(n)} \\ \ldots & \ldots & \ldots & \ldots \\ x_n^{(1)} & x_n^{(2)} & \ldots & x_3^{(n)} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & \ldots & 0 \\ 0 & 1 & \ldots & 0 \\ \ldots & \ldots & \ldots & \ldots \\ 0 & 0 & \ldots & 1 \end{pmatrix}$$

d. h. $\underline{X}^T\,\underline{X} = \underline{E}$ also $\underline{X}^T = \underline{X}^{-1}$

Die Diagonalisierung einer symmetrischen Matrix $\underline{A}$ gelingt somit über: $\underline{X}^T\,\underline{A}\,\underline{X} = \underline{\lambda}$,
wobei $\underline{X}$ die aus den Eigenvektoren als Spalten gebildete Matrix darstellt.

Für eine hermitesche Matrix $\underline{A}$ gilt analog: $\underline{X}^+\,\underline{A}\,\underline{X} = \underline{\lambda}$

wobei $\underline{X}^+ \equiv (\underline{X}^*)^T$ als die **hermitesch konjugierte Matrix** zu $\underline{X}$ bezeichnet wird.

Terminologie: falls für Matrix $\underline{R}$ gilt $\underline{R}^{-1} = \underline{R}^T$, heißt $\underline{R}$ **orthogonal**
falls für Matrix $\underline{S}$ gilt $\underline{S}^{-1} = \underline{S}^+$, heißt $\underline{S}$ **unitär**

Die Transformation eines Vektors mittels orthogonaler Matrix (orthogonale Transformation), $\underline{y} = \underline{R}\,\underline{x}$, lässt die Länge/den Betrag des Vektors unverändert (z. B. Drehung des Koordinatensystems)

Beweis:

Mit den Spaltenvektoren

$$\underline{y} = \begin{pmatrix} y_1 \\ y_2 \\ \dots \\ y_n \end{pmatrix} \quad \text{und} \quad \underline{x} = \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \dots \\ x_n \end{pmatrix}$$

kann man schreiben $\underline{y} = \underline{R}\,\underline{x}$

oder als Zeilenvektoren: $\underline{y}^T = \underline{x}^T \underline{R}^T$

Multiplikation dieser beiden Gleichungen liefert: $\underline{y}^T \underline{y} = \underline{x}^T \underline{R}^T \underline{R}\,\underline{x}$

da $\underline{R}^T = \underline{R}^{-1}$, wird $\underline{y}^T \underline{y} = \underline{x}^T \underline{x}$

Es gilt aber $\underline{y}^T \underline{y} = |\underline{y}|^2$ bzw. $x^T \underline{x} = |\underline{x}|^2$, also $|\underline{y}| = |\underline{x}|$ q. e. d.

<u>Bedingung für Orthogonalität</u> einer Matrix $\underline{R}$: $\underline{R}^T \underline{R} = \underline{E}$, also

$$\sum_{k=1}^{n} r_{ik}^{\mathbf{T}} r_{kj} = \delta_{ij} \quad \text{oder} \quad \boxed{\sum_{k=1}^{n} r_{ki} r_{kj} = \delta_{ij} \qquad i, j = 1, \dots, n}$$

Analog gilt für unitäre Transformation $\underline{y} = \underline{S}\,\underline{x}$ mit $\underline{S}^+ = \underline{S}^{-1}$: $\underline{y}^+ \underline{y} = \underline{x}^+ \underline{x}$

<u>Bedingung für Unitarität</u> einer Matrix $\underline{S}$: $\boxed{\sum_{k=1}^{n} s^*_{ki} s_{kj} = \delta_{ij} \qquad i, j = 1, \dots, n}$