1.9 Hermitesche Operatoren [Arfken 3.4]

Hermitesche Operatoren stellen eine „Verallgemeinerung" selbstadjungierter Operatoren zu komplexen Vektorräumen dar, und spielen eine entscheidende Rolle in der Formulierung der Quantenmechanik.

Die Definition des Skalarprodukts muß aber verfeinert werden: eine Bilinearform kann nicht mehr positiv definit sein, weil $\langle \vec{v}, \vec{v} \rangle > 0$ unbedingt $\langle i\vec{v}, i\vec{v} \rangle = i^2 \langle \vec{v}, \vec{v} \rangle = -\langle \vec{v}, \vec{v} \rangle < 0$ impliziert.

Sesquilinearform: Sei V ein $\mathbb{C}$-Vektorraum. Eine Abbildung $V \times V \to \mathbb{C}$ heißt eine Sesquilinearform, wenn sie in jeder Variable additiv ist, und

$$\langle \lambda \vec{u}, \vec{v} \rangle = \lambda^* \langle \vec{u}, \vec{v} \rangle, \quad \langle \vec{u}, \lambda \vec{v} \rangle = \lambda \langle \vec{u}, \vec{v} \rangle$$

für alle $\lambda \in \mathbb{C}$, $\vec{u}, \vec{v} \in V$ gilt.

Hermitizität: Eine Sesquilinearform heißt hermitesch, wenn

$$\langle \vec{u}, \vec{v} \rangle = \langle \vec{v}, \vec{u} \rangle^*$$

für alle $\vec{u}, \vec{v} \in V$ gilt. Dies ist die Verallgemeinerung der „Symmetrie" des reellen Skalarprodukts (vgl. Seite 13).

Es folgt: $\langle \vec{v}, \vec{v} \rangle = \langle \vec{v}, \vec{v} \rangle^*$, d.h. $\langle \vec{v}, \vec{v} \rangle$ ist reell.

Hermitesches Skalarprodukt: Wenn eine hermitesche Sesquilinearform positiv definit ist, nennen wir sie ein Skalarprodukt.

Beispiel: $\langle \vec{u}, \vec{v} \rangle := \sum_{i=1}^{n} u_i^* v_i$ „Standard-Skalarprodukt"

Unitärer Vektorraum: Ein komplexer Vektorraum mit einem hermiteschen Skalarprodukt heißt ein unitärer Vektorraum.

Eigenschaften: Fast alle „geometrischen" Eigenschaften aus Seiten 14–16 können unverändert definiert werden, insbesondere:

* Orthogonalität: $\vec{u} \perp \vec{v} \Leftrightarrow \langle \vec{u}, \vec{v} \rangle = 0$.
* Norm: $|\vec{v}| := \sqrt{\langle \vec{v}, \vec{v} \rangle}$
  (Mit Standard-Skalarprodukt: $|\vec{v}| := \sqrt{\sum_{i=1}^{n} v_i^* v_i}$.
* ON-Basis: $\langle \vec{v}_i, \vec{v}_j \rangle = \delta_{ij}$.
* Entwicklung in ON-Basis: $\vec{u} = \sum_{i=1}^{n} \langle \vec{v}_i, \vec{u} \rangle \vec{v}_i$.
* Konstruktion einer ON-Basis durch das Gram-Schmidt-Verfahren.
* Cauchy-Schwarz: $|\langle \vec{u}, \vec{v} \rangle| \leq |\vec{u}||\vec{v}|$.

Betrag einer komplexen Zahl: $|z| := \sqrt{z^* z}$

Norm eines Vektors

Unitäre Operatoren:

Als Verallgemeinerung orthogonaler Operatoren (Seite 29) sind unitäre Operatoren lineare Abbildungen $\varphi: V \to V$ die das hermitesche Skalarprodukt erhalten, d.h.

$$\langle \varphi(\vec{u}), \varphi(\vec{v}) \rangle = \langle \vec{u}, \vec{v} \rangle \quad \forall \ \vec{u}, \vec{v} \in V.$$

(Diese Transformationen sind unbedingt invertierbar!
Denn, φ ist injektiv: $\varphi(\vec{u}) = \vec{0} \Rightarrow 0 = \langle \varphi(\vec{u}), \varphi(\vec{u}) \rangle = \langle \vec{u}, \vec{u} \rangle$
$\Rightarrow \vec{u} = \vec{0}$.
Und φ ist surjektiv: $(\varphi(\vec{v}_1), .., \varphi(\vec{v}_n))$ bilden eine ON-Basis
$\Rightarrow \vec{u} = \sum_i c_i \varphi(\vec{v}_i) = \varphi(\sum_i c_i \vec{v}_i)$.)

Matrixdarstellung:

Sei A die zugehörige Matrix, $A: \mathbb{C}^n \to \mathbb{C}^n$, mit $A(\vec{e}_i) = \vec{a}_i$. Die Abbildung ist unitär bzgl. des Standard-Skalarprodukts, wenn

$$A^+ A = A A^+ = E$$

gilt, d.h. $\boxed{A^+ = A^{-1}}$. Hier ist $A^+ := (A^*)^T$.

(Beweis: (vgl. Seite 29)
$$\begin{aligned}(A^+A)_{ij} &= \sum_k (A^+)_{ik} (A)_{kj} \\ &= \sum_k a^*_{ki} a_{kj} \\ &= \langle \vec{a}_i, \vec{a}_j \rangle = \langle A(\vec{e}_i), A(\vec{e}_j) \rangle \\ &= \langle \vec{e}_i, \vec{e}_j \rangle = \delta_{ij}.\end{aligned}$$
)

Unitäre Gruppe:

Die unitären $n \times n$-Matrizen bilden die sogenannte unitäre Gruppe

$$U(n) := \{ A \in M(n \times n, \mathbb{C}) \mid A^+A = E \}.$$

Die Untergruppe

$$SU(n) := \{ A \in U(n) \mid \det A = 1 \}$$

heißt die spezielle unitäre Gruppe.

— ∘ — ∘ —

Nachtrag zum hermiteschen Skalarprodukt: In euklidischen Vektorräumen kann $\langle \vec{u}, \vec{v} \rangle$ mittels $q(\vec{u}) := \langle \vec{u}, \vec{u} \rangle$ reproduziert werden, vgl. Seite 13. Und jetzt?

$$* \quad |\vec{u}+\vec{v}|^2 = \langle \vec{u}+\vec{v}, \vec{u}+\vec{v} \rangle = |\vec{u}|^2 + |\vec{v}|^2 + \langle \vec{u}, \vec{v} \rangle + \langle \vec{v}, \vec{u} \rangle$$
$$= |\vec{u}|^2 + |\vec{v}|^2 + \langle \vec{u}, \vec{v} \rangle + \langle \vec{u}, \vec{v} \rangle^*$$
$$* \quad |\vec{u}+i\vec{v}|^2 = \langle \vec{u}+i\vec{v}, \vec{u}+i\vec{v} \rangle = |\vec{u}|^2 + |\vec{v}|^2 + \langle \vec{u}, i\vec{v} \rangle + \langle i\vec{v}, \vec{u} \rangle$$
$$= |\vec{u}|^2 + |\vec{v}|^2 + i(\langle \vec{u}, \vec{v} \rangle - \langle \vec{u}, \vec{v} \rangle^*)$$

$\Rightarrow$ Ja, $\langle \vec{u}, \vec{v} \rangle^*$ kann eliminiert werden!

Hermitesche Operatoren: Als Verallgemeinerung eines selbstadjungierten Operators (Seite 30) wird ein $\mathbb{C}$-linearer Operator in einem endlichdimensionalen unitären Vektorraum hermitesch genannt, wenn

$$\langle \varphi(\vec{u}), \vec{v} \rangle = \langle \vec{u}, \varphi(\vec{v}) \rangle$$

für alle $\vec{u}, \vec{v} \in V$ gilt.

Matrixdarstellung: Wenn $(\vec{v}_1, \dots, \vec{v}_n)$ eine ON-Basis ist, ist die zugehörige Matrix bzgl. dieser Basis hermitesch, d.h.

$$\boxed{A^+ = A} \qquad \text{(vgl. Seite 30)}.$$

(Beweis: $\varphi(\vec{v}_i) = \sum_j a_{ji} \vec{v}_j$

$$\Rightarrow a_{ji} = \langle \vec{v}_j, \varphi(\vec{v}_i) \rangle = \langle \varphi(\vec{v}_i), \vec{v}_j \rangle^* = \langle \vec{v}_i, \varphi(\vec{v}_j) \rangle^* = a_{ij}^* \quad \square.)$$

Eigenschaften:

* Alle Eigenwerte eines hermiteschen Operators sind reell.

(Beweis: Sei $\varphi(\vec{v}) = \lambda \vec{v}$, $\vec{v} \neq \vec{0}$.

Es gilt: $\langle \vec{v}, \varphi(\vec{v}) \rangle = \langle \vec{v}, \lambda \vec{v} \rangle = \lambda \langle \vec{v}, \vec{v} \rangle$

$= \langle \varphi(\vec{v}), \vec{v} \rangle = \langle \lambda \vec{v}, \vec{v} \rangle = \lambda^* \langle \vec{v}, \vec{v} \rangle$,

d.h. $\lambda^* = \lambda$ (weil $|\vec{v}|^2 = \langle \vec{v}, \vec{v} \rangle \neq 0$ bei $\vec{v} \neq \vec{0}$).)

* Eigenvektoren eines hermiteschen Operators zu verschiedenen Eigenwerten sind senkrecht aufeinander.

(Beweis: Seien $\varphi(\vec{u}) = \lambda \vec{u}$ und $\varphi(\vec{v}) = \mu \vec{v}$.

Es folgt: $\lambda^* \langle \vec{u}, \vec{v} \rangle = \langle \lambda \vec{u}, \vec{v} \rangle = \langle \varphi(\vec{u}), \vec{v} \rangle$

$= \langle \vec{u}, \varphi(\vec{v}) \rangle = \langle \vec{u}, \mu \vec{v} \rangle = \mu \langle \vec{u}, \vec{v} \rangle$

$$\Rightarrow (\lambda^* - \mu) \langle \vec{u}, \vec{v} \rangle = 0$$

Weil die Eigenwerte reell sind, impliziert $\lambda \neq \mu$ auch $\lambda^* \neq \mu$ und deshalb $\langle \vec{u}, \vec{v} \rangle = 0 \quad \square$.)

* Jeder hermitesche Operator auf einem endlichdimensionalen unitären Vektorraum liefert eine ON-Basis für V aus Eigenvektoren.

(Beweis: Induktiv nach Dimension, wie auf Seite 30.)

Diagonalisierung hermitescher Matrizen: (vgl. Seite 31)

Ist A eine hermitesche $n\times n$-Matrix, d.h. ist $A^+ = A$, so gibt es eine unitäre Matrix $S \in U(n)$, mit $S^+ = S^{-1}$, so dass

$$D := S^+ A S$$

in Diagonalgestalt ist.

Beweis: Wie auf Seite 31 kann auch hier S konstruiert werden. Und zwar:

$$S := (\vec{u}_1, \dots, \vec{u}_n),$$

wobei die $\vec{u}_i$ die Eigenvektoren von A sind: $A\vec{u}_i = \lambda_i \vec{u}_i$.

Dann gilt nämlich

$$AS = (\lambda_1 \vec{u}_1, \dots, \lambda_n \vec{u}_n),$$

und

$$S^+ A S = (\vec{u}_1, \dots, \vec{u}_n)^+ (\lambda_1 \vec{u}_1, \dots, \lambda_n \vec{u}_n)$$

$$= \begin{pmatrix} \vec{u}_1^+ \lambda_1 \vec{u}_1 & \dots & \vec{u}_1^+ \lambda_n \vec{u}_n \\ \vdots & & \vdots \\ \vec{u}_n^+ \lambda_1 \vec{u}_1 & \dots & \vec{u}_n^+ \lambda_n \vec{u}_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \lambda_1 & & 0 \\ & \ddots & \\ 0 & & \lambda_n \end{pmatrix}.$$

Spektraldarstellung hermitescher Operatoren:

Sei $\varphi: V \to V$ ein hermitescher Operator auf einem endlichdimensionalen Vektorraum, $\lambda_1, \dots, \lambda_r \in \mathbb{R}$ seine verschiedenen Eigenwerte, und P_k die Orthogonalprojektion auf den k-ten Eigenraum. Dann gilt

$$\varphi = \sum_{k=1}^{r} \lambda_k P_k .$$

(Beweis: wie auf Seite 31).

Quadratische Formen: (vgl. Seite 32)

Im komplexen Fall haben quadratische Formen die Gestalt

$$q(\vec{z}) = \vec{z}^+ A \vec{z} = \sum_{i,j} z_i^* a_{ij} z_j .$$

Diese ist reell: $[q(\vec{z})]^* = \sum_{i,j} z_i a_{ij}^* z_j^* = \sum_{i,j} z_i a_{ji} z_j^* = \sum_{j,i} z_j^* a_{ji} z_i = q(\vec{z})$.

Diagonalisierung läuft wie früher:

$$\vec{z}^+ A \vec{z} = \underbrace{\vec{z}^+ S}_{(\vec{z}')^+} \underbrace{S^+ A S}_{D} \underbrace{S^+ \vec{z}}_{=:\vec{z}'} .$$

$E = SS^+$

— o —