**厄米矩阵**

2014/12/15

预备知识: 矢量空间的子空间

厄米矩阵是复数域的矩阵, 它是实数矩阵中对称阵(词条未完成)的复数拓展. 事实上对称矩阵的转置运算就是其厄米共轭(因为实数的复共轭是其本身). 正因如此, 对称矩阵满足的性质都有对应的厄米矩阵拓展.

在量子力学中, 物理量的算符(链接未完成)对应的矩阵就是厄米矩阵.

**定义**

厄米共轭等于本身的矩阵叫做厄米矩阵(矩阵元可为复数).

**一些外观上的性质**

1.厄米矩阵是方阵(因为厄米共轭操作包括一次转置, 而厄米共轭后矩阵规格不变).

2.矩阵中任意两个关于主对角线对称的矩阵元互为复共轭(因为矩阵转置后, 这两个对角元互换).

3.矩阵主对角线上的矩阵元都是实数(因为这些矩阵元转置后位置不变, 只有实数的复共轭等于自身)

**关于本征值和本征矢的性质**

**定理1**. 厄米矩阵的本征值(矩阵的本征方程本征值和本征矢(链接未完成))为实数.

**定理2**. *N*阶厄米矩阵一定存在*N*个线性无关的本征矢.

**定理3**. 若厄米矩阵的两个本征值不相等, 对应的两个本征矢正交.

**定理4**. 若一个本征值是本征行列式的*k*重根, 那么这个本征值对应的所有本征矢可以组成一个*k*维子空间.

**推论.** *N*阶厄米矩阵一定存在*N*个正交归一的本征矢.

**定理5**. 正交归一后的本征矢组成的幺正矩阵可以把该厄米矩阵对角化.

**定理1的证明** (厄米矩阵的本征值为实数)

为了是读者熟悉矩阵运算的三种表示方法, 下面每一条步都分别用狄拉克符号(超链接未完成, 狄拉克符号词条需要更详细, 例如), 普通矩阵和矢量, 求和表达式三种方法表示同一个过程.

厄米矩阵的本征方程为

    

两边左乘的厄米共轭, 得

    

左右同时取复共轭得(一个数可看成的矩阵, 复共轭与厄米共轭相同)

 (利用性质) 



(利用了性质, 请自行证明该性质)





(求和式的下标名称改变不影响结果)

证毕.

**定理2的证明**超出了本书范围, 只需记住结论即可.

**定理3的证明** (矩阵的两个本征值不相等, 对应的两个本征矢正交)

令, .

则





第二条式子两边取复共轭(一个数的厄米共轭)得

   (利用性质和)

对比第一条式子得, 即. 由于, 所以, 即与正交.

**定理4的证明** (若一个本征值是本征行列式的*k*重根, 那么这个本征值对应的所有本征矢可以组成一个*k*维子空间)

M的本征行列式为



行列式展开后得到关于的*N*阶负系数多项式. 在复数域内, *N*阶负系数多项式在复数域内有*N*个解(包括重根)(厄米矩阵的神奇性质让这*N*个解都成了实数)

如果是重根, 那么矩阵的秩就会是(这是证明中最关键的一步, 可惜超纲了, 所以证明略). 而本征矢满足



由高斯消元法可知

当时, 方程的通解是的形式, *c*是任意常数. 这可以看成一维矢量空间.

当时, 方程的通解是*k*个线性无关矢量的任意线性组合(*k*个任意常数). 为了以后使用方便, 通常把施密特正交归一化(链接未完成). 由子空间的定义可知, 方程的解集是一个维矢量空间.

证毕.

**推论的证明** (*N*阶厄米矩阵一定存在*N*个正交归一的本征矢)

设矩阵不同的本征值为. 若其中是重根(满足), 则存在个正交归一本征矢(子空间的正交归一基底)对应. 又因为不同对应的本征矢正交, 所以把所有子空间的正交归一基底组成一个*N*个矢量的集合, 集合中的矢量同样满足归一正交的性质.

**定理5的证明** (归一后的本征矢组成的幺正矩阵可以把该厄米矩阵对角化)

根据上述推论的结论, 集合中的*N*个正交归一的矢量都是厄米矩阵*M*的本征矢, 第*i*个记为. 其中有个对应本征值, 个对应本征值,等等. 把这个本征矢表示成列矢量并横向组成一个矩阵(命名为), 即



由于的所有列互相正交归一, 根据定义, 是一个幺正矩阵(链接未完成), 其逆矩阵(未完成, 需要在幺正矩阵词条中补充该性质, 但这里不需要链接).

令 (其中是第*n*列的本征矢), 得



(等于对的每一列作用, 而的每一列都是的本征矢, 所以相当于把每一列乘以对应的本征值, 而这等于).