Stimmt all dies ?

$$\vec a^{\,2} := \vec a\cdot\vec a = a^2 \quad , \quad |\vec a| = a = \sqrt{\vec a^{\,2}} \quad , \quad \vec a \perp \vec b \hookrightarrow \vec a\cdot\vec b = 0$$

$$\vec a \parallel \vec b \hookrightarrow \vec a\cdot\vec b = ab \quad , \quad |\vec a + \vec b\,| \le a + b \quad , \quad |\vec a\cdot\vec b\,| \le ab \ \text{(Schwarz)}$$

$$(\lambda\vec a)\cdot\vec b = \lambda\left(\vec a\cdot\vec b\right) = \vec a\cdot\left(\lambda\vec b\right) \quad , \quad \vec a\cdot\left(\vec b + \vec c\right) = \vec a\cdot\vec b + \vec a\cdot\vec c$$

$$r_{12} = r_{21} = |\vec r_1 - \vec r_2| = \sqrt{(\vec r_1 - \vec r_2)^2} = \sqrt{r_1^2 + r_2^2 - 2\,\vec r_1\cdot\vec r_2}$$

$$a_j a_j = a^2 \quad , \quad c_k a_j a_\ell b_k \delta_{j\ell} = a^2\left(\vec c\,\vec b\right) \quad , \quad \delta_{j\ell}\delta_{\ell k} = \delta_{jk}$$

$$\delta_{jj} = 3 \quad , \quad \delta_{j\ell}\delta_{\ell m}\delta_{mn}\delta_{nk} = \delta_{jk} \quad , \quad \delta_{j\ell}\delta_{\ell j}\delta_{mn}\delta_{nm} = 9$$

Index $\perp$:= der zum jeweils anderen Vektor senkrechte Anteil :

$$\vec a\times\vec b = \vec a\times\vec b_\perp = \vec a_\perp\times\vec b = -\vec b\times\vec a \quad , \quad \vec a\times\vec a = \vec 0 \quad , \quad \vec a\cdot\left(\vec a\times\vec b\right) = 0$$

$$|\vec a\times\vec b\,| = ab_\perp = a_\perp b \quad , \quad \pm\vec a \parallel \vec b \hookrightarrow \vec a\times\vec b = 0 \quad , \quad \vec a\perp\vec b \hookrightarrow |\vec a\times\vec b\,| = ab$$

$$(\lambda\vec a)\times\vec b = \lambda\left(\vec a\times\vec b\right) = \vec a\times\left(\lambda\vec b\right) \quad , \quad \vec a\times\left(\vec b\times\vec c\right) \ne \left(\vec a\times\vec b\right)\times\vec c$$

$$\vec a\times\left(\vec b + \vec c\right) = \vec a\times\vec b + \vec a\times\vec c \quad , \quad \vec a\times\left(\vec b\times\vec c\right) = \vec b\,(\vec a\,\vec c) - \vec c\left(\vec a\,\vec b\right)$$

$$\vec a\left(\vec b\times\vec c\right) = \left(\vec a\times\vec b\right)\vec c = \vec c\left(\vec a\times\vec b\right) = (\vec c\times\vec a)\,\vec b = \vec b\,(\vec c\times\vec a) = \ldots$$

Hauptachsentransformation : der „Fahrplan"

I. Ist $H = H^T$ erfüllt ? Bei 3×3–Matrizen, zugegeben, sieht man dies sofort, aber bei $\infty\times\infty$ schon weniger. Falls H komplex ist (i enthält), ist nach $H = H^\dagger$ zu fragen, wobei $\dagger := {*T} = {T*}$. Wieso dies ? Es sind genau diese „hermiteschen" Operatoren, deren a l l e Eigenwerte reell sind: $\lambda\,\vec f^{\,*}\,\vec f = \vec f^{\,*} H\,\vec f = \left(H^T\,\vec f^{\,*}\right)\vec f = \left(H^\dagger\,\vec f\right)^*\vec f = \lambda^*\,\vec f^{\,*}\,\vec f$. Wer verlangt reelle λ ? Der Quantiker: Eigenwerte sind die möglichen Meßwerte der Observablen H. Und aus solchen hat sich das i–Gespenst gefälligst fern zu halten.

II. Löse $\det(H - \lambda\cdot 1) = 0$. Dabei wird klar, ob zwei oder mehr λ's zusammenfallen. Mit Blick auf Quantenmechanik (Grundzustands–Energie zuerst) sortiere man von unten nach oben: $\lambda_1 \le \lambda_2 \le \lambda_3 \le \ldots$.

III. Spur–Probe . Ist $\mathrm{Sp}(H) = \lambda_1 + \lambda_2 + \lambda_3$?! (Übrigens muß auch $\det(H) = \lambda_1\lambda_2\lambda_3$ gelten .)

IV. Löse $(H - \lambda\cdot 1)\,\vec f = \vec 0$. Dies ist separat für jeden Eigenwert zu tun. Somit ist klar, zu w e l c h e m Eigenwert w e l c h e r $\vec f$–Vektor gehört. Da es sich um drei linear **ab**hängige Gleichungen handelt, darf jeweils eine nicht–verschwindende $\vec f$–Komponente frei gewählt werden. Das Resultat ist ein dreifaches: $\vec f_1 \sim \begin{pmatrix}\cdots\\\cdots\\\cdots\end{pmatrix}$ zu $\lambda_1 = \ldots$ bis $\vec f_3 \sim \begin{pmatrix}\cdots\\\cdots\\\cdots\end{pmatrix}$ zu $\lambda_3 = \ldots$. Normierung erst unter Pkt. VI (darum das $\sim$ Zeichen).

V. Orthogonalitäts–Probe . Ob paarweise alle Skalarprodukte $\vec f_j\cdot\vec f_k$ verschwinden ($j\ne k$), läßt sich noch vor Normierung kontrollieren. Im Falle von Entartung ist für Orthogonalität im entsprechenden Entartungsunterraum zu s o r g e n .

VI. Normierung, Rechtssystem . Über Rechtssystem (3×3–Fall) kann eine Skizze entscheiden, oder das Spatprodukt. Ggf. ist das Vorzeichen an einem der $\vec f$ umzukehren. Übrigens konnte $\vec f_3$ auch per $\vec f_1\times\vec f_2$ erhalten werden.

VII. Resultat . Was nun insgesamt gewonnen ist, verdient notiert zu werden in der Form

$$H' = \begin{pmatrix}\lambda_1 & 0 & 0\\ 0 & \lambda_2 & 0\\ 0 & 0 & \lambda_3\end{pmatrix} \quad , \quad D = \begin{pmatrix}\text{—} & \vec f_1 & \text{—}\\ \text{—} & \vec f_2 & \text{—}\\ \text{—} & \vec f_3 & \text{—}\end{pmatrix} .$$
