Spur einer Matrix / eines Operators

→ unverzichtbar in Q.M. und Statistischer Physik !

Spur (trace) einer $n \times n$ Matrix $A = (A_{ij}) = \begin{pmatrix} A_{11} & \cdots & A_{1n} \\ \vdots & & \vdots \\ A_{n1} & \cdots & A_{nn} \end{pmatrix}$

$$\boxed{\operatorname{tr} A := \sum_{i=1}^{n} A_{ii} = \text{Summe der Diagonalelemente}}$$

Eigenschaften:

(i) $\operatorname{tr}(A + \lambda B) = \operatorname{tr} A + \lambda \operatorname{tr} B$ (Linearität)

(ii) $\operatorname{tr}(A^{+}) = (\operatorname{tr} A)^{*}$

(iii) $\operatorname{tr}(AB) = \operatorname{tr}(BA)$

(iv) $\operatorname{tr} \mathbb{1}_n = n$

(v) $\quad A \sim B \quad \Rightarrow \quad \mathrm{tr}\, A = \mathrm{tr}\, B$

(vi) $\quad A$ diagonalisierbar mit EWen $\lambda_1, \dots, \lambda_\ell$, $\dim E_{\lambda_i} = d_i$

$$\Rightarrow \quad \mathrm{tr}\, A = \sum_{i=1}^{\ell} d_i \lambda_i$$

$\ulcorner$ (i): ✓ ; (ii): $(A^+)_{ii} = A^*_{ii}$; (iv) ✓ ,

(iii): $\mathrm{tr}(AB) = \sum_i (AB)_{ii} = \sum_i \sum_\ell A_{i\ell} B_{\ell i} = \sum_\ell \underbrace{\sum_i B_{\ell i} A_{i \ell}}_{= (BA)_{\ell\ell}} = \mathrm{tr}(BA)$

(v): $A \sim B \leadsto A = S^{-1} B S \leadsto \mathrm{tr}\, A = \mathrm{tr}(S^{-1} B S) \underset{(iii)}{=} \mathrm{tr}(\underbrace{S S^{-1}}_{=1} B)$

$= \mathrm{tr}\, B$

(vi): $\tilde{A} = S^{-1} A S = \begin{pmatrix} \lambda_1 & & & & & & 0 \\ & \ddots & & & & & \\ & & \lambda_1 & & & & \\ & & & \lambda_2 & & & \\ & & & & \ddots & & \\ & & & & & \lambda_2 & \\ 0 & & & & & & \ddots \end{pmatrix} \begin{array}{l} \left.\vphantom{\begin{matrix}a\\a\\a\end{matrix}}\right\} d_1 \\ \left.\vphantom{\begin{matrix}a\\a\\a\end{matrix}}\right\} d_2 \\ \vphantom{a} \end{array} \leadsto \mathrm{tr}\, A \overset{(iv)}{=} \mathrm{tr}\, \tilde{A} = \sum_i d_i \lambda_i$ $\lrcorner$

Spur eines Operators $A: V \to V$

$$\boxed{\operatorname{tr} A := \operatorname{tr} {}_{B}A_{B} \quad , \text{ wobei } B \text{ beliebige Basis von } V}$$

- Basisunabhängigkeit klar nach (iv) und ${}_{B}A_{B} \sim {}_{B'}A_{B'}$
- Eigenschaften (i) – (v) gelten ebenso
- A Operator auf eukl/unit. VR V mit ONB $(b_1, \ldots, b_n)$

$$\Rightarrow \quad \boxed{\operatorname{tr} A = \sum_{i=1}^{n} \langle b_i , A b_i \rangle}$$

$$\left(\text{denn } \left({}_{B}A_{B} \right)_{ii} = \langle b_i , A b_i \rangle \right)$$

Anwendung: Skalarprodukt für Matrizen / Operatoren

$\rightarrow$ $M(n,n)$ / $\mathcal{L}(V,V)$ euklidischer ($K=\mathbb{R}$)

bzw. unitärer ($K=\mathbb{R}$) Vektorraum!

$$\boxed{\langle A, B \rangle_{HS} := tr(A^+ B)}$$

$\leftarrow$ Hilbert-Schmidt-Skalarprodukt: (i) linear

(ii) symmetrisch

(iii) positiv (vgl. Übg.)

a) Erwartungswert einer Größe $A(x)$ bzgl. Zufallsgröße x mit Wkt. $p(x)$:

$$\bar{A} = \int_a^b dx\, p(x) A(x) \equiv \langle p, A \rangle$$

$$\langle f, g \rangle := \int_a^b f^*(x) g(x) dx$$

b) q.m. Erwartungswert einer Größe $\hat{A}$ bzgl. q.m. Dichteoperator ρ:

$$\bar{A} = \langle \rho, \hat{A} \rangle_{HS} = tr(\rho^+ \hat{A})$$