Komplexní unitární prostory

Komplexní unitární prostor dimenze n je vektorový prostor $\mathbb{C}^n$ se skalárním součinem. Pokud $\alpha = a + bi$, $a, b \in \mathbb{R}$ budeme značit α^* číslo komplexně sdružené s α, tedy $a - bi$.

Připomeňme, že skalární součin, který budeme na chvíli značit symbolem $\odot$, je zobrazení $\mathbb{C}^n \times \mathbb{C}^n \to \mathbb{C}$ splňující následující vztahy:

- $u \odot (v + w) = u \odot v + u \odot w$;
- $u \odot (\alpha v) = \alpha(u \odot v)$;
- $v \odot u = (u \odot v)^*$;
- $u \odot u > 0$ pro $u \neq 0$.

Čtvrtá podmínka tiše předpokládá, že $u \odot u$ je reálné číslo, což je ovšem zaručeno třetí podmínkou. Nejdůležitější je uvědomit si, že z podmínek plyne $(\alpha u) \odot v = \alpha^*(u \odot v)$, skalární součin tedy **není** lineární v první složce. Je ovšem lineární ve složce druhé.

Hilbertův prostor dimenze n, označovaný symbolem $\mathbb{H}_n$, je vlastně totéž co n-dimenzionální komplexní unitární prostor. Rozdíl mezi pojmy unitární prostor a Hilbertův prostor je dán dodatečnou podmínkou, že Hilbertův prostor musí být úplný vzhledem k normě definované skalárním součinem. Tato podmínka je ovšem pro konečně dimenzionální prostory splněna vždy, a proto oba pojmy na konečné dimenzi splývají.

Skutečnost, že proměnná u označuje prvek vektorového prostoru, bývá někdy označována jako $\vec{u}$. My budeme používat značení zavedené Diracem, běžné v kvantové fyzice, které prvek vektorového prostoru označuje symbolem $|u\rangle$.

Jak už jsme řekli, je skalární součin lineární ve druhé složce, tedy zobrazení $\tilde{u} : \mathbb{C}^n \to \mathbb{C}$ dané předpisem $\tilde{u}(v) = u \odot v$, je lineární forma, neboli lineární zobrazení z vektorového prostoru do tělesa (nebo, ekvivalentně, do jednodimenzionálního vektorového prostoru). Lineární formy samy tvoří vektorový prostor, kterému se říká *duální prostor*. Protože je to, v maticovém zápisu, prostor řádkových vektorů z $\mathbb{C}^n$, je duální prostor isomorfní $\mathbb{C}^n$, ve kterém podle konvence používáme vektory sloupcové. Duální vektor $\tilde{u}$ k vektoru u píšeme v Diracově značení jako $\langle u|$. Původ tohoto značení je v tom, že skalární součin $u \odot v$ je nyní po vynechání znaménka $\odot$ možné psát jako $\langle u|v\rangle$, což je značení pro skalární součin běžně používané. Z anglického slova pro závorku, *bracket*, vzniklo označení *bra*-vektor pro prvky $\langle u|$ duálního prostoru a *ket*-vektor pro prvky $|v\rangle$ původního prostoru.

V konečně dimenzionálním prostoru jsme zvyklí zapisovat vektory jako n-tice pomocí jejich souřadnic vzhledem ke zvolené bázi. Je dobré si všimnout samozřejmosti, že v případě aritmetického vektorového prostoru, jako je např. $\mathbb{C}^n$, a při volbě kanonické báze $K = (\mathbf{e}_1, \ldots, \mathbf{e}_n)$ je n-tice chápaná jako vektor stejná jako n-tice chápaná jako souřadnice vzhledem ke K. Formálně,

$$\begin{pmatrix} a_1 \\ \vdots \\ a_n \end{pmatrix} = \left\{ \begin{pmatrix} a_1 \\ \vdots \\ a_n \end{pmatrix} \right\}_K .$$

Skalární součin se snadno vyjádřuje pomocí souřadnic vůči ortonormální bázi, tedy vůči bázi $B = (\mathbf{b}_1, \dots, \mathbf{b}_n)$ splňující $\langle \mathbf{b}_i | \mathbf{b}_j \rangle = \delta_{ij}$. Pak pro

$$u = \begin{pmatrix} a_1 \\ \vdots \\ a_n \end{pmatrix}$$

platí

$$\langle u| = (a_1^*, \dots, a_n^*).$$

To můžeme zapsat jako $\langle u| = (|u\rangle^*)^{\mathrm{T}}$, nebo zkráceně jako $\langle u| = |u\rangle^\dagger$.

Platí také

$$\langle u|u\rangle = \sum_{i=1}^{n} |a_i|^2.$$

Připomeňme, že skalární součin umožňuje definovat normu vektoru $\|u\|$ jako $\sqrt{\langle u|u\rangle}$. Všimněme si, že $|\alpha| = \|\alpha\|$, pokud α chápeme jednou jako komplexní číslo a jednou jako jednodimenzionální vektor.

Spektrální vlastnosti lineárních operátorů

Lineární zobrazení (neboli homomorfismy) vektorových prostorů se také nazývají (zejména ve fyzice) *lineární operátory*. Každý operátor $\varphi : \mathbb{C}^m \to \mathbb{C}^n$ lze, jak známo, reprezentovat násobením maticí A velikosti $n \times m$. Tato matice je dána volbou bází M a N prostorů $\mathbb{C}^m$ a $\mathbb{C}^n$ a platí

$$A \cdot \{|u\rangle\}_M = \{\varphi|u\rangle\}_N.$$

Z předchozího zápisu plyne, proč budeme vektory $\mathbb{C}^n$ chápat jako **sloupce, nikoli řádky**: je to přirozenější kvůli konvenci, že vektor násobíme maticí operátoru zleva. Matice nás zajímají právě proto, že to jsou (spolu s násobením) lineární operátory. Mluvíme-li tedy o matici, máme na mysli příslušný operátor. Budeme proto obvykle psát $A|u\rangle$, namísto $A \cdot \{|u\rangle\}_M$.

K operátoru φ definujeme *adjungovaný* operátor $\varphi^\dagger$ vztahem

$$\langle \varphi^\dagger(u)|v\rangle = \langle u|\varphi(v)\rangle,$$

kde $\varphi^\dagger(u)$ je pro přehlednost zkratkou za $\varphi^\dagger|u\rangle$, a $\varphi(v)$ za $\varphi|v\rangle$. Tento zápis může být z formálního hlediska (které fyziky obvykle tolik netrápí) trochu matoucí, ale bez Diracovy notace ho můžeme zapsat jako

$$\varphi^\dagger(u) \odot v = u \odot \varphi(v).$$

Není těžké ověřit, že v maticovém zápisu operátoru má symbol $\dagger$ obvyklý význam Hermitovsky sdružené matice (transponované a komplexně sdružené), ve kterém jsme ho použili už výše při charakterizaci $\langle u|$. Zejména v kontextu kvantové mechaniky se Hermitovsky sdružené matici říká jednoduše matice *adjungovaná* (ačkoli tento termín bývá v lineární algebře často používán pro matici definovanou pomocí subdeterminantů).

Pro vlastnosti operátorů jsou rozhodující jejich *vlastní čísla* a *vlastní vektory*. Vlastní vektory (které jsou podle definice nenulové) určují jednodimenzionální podprostory, které se operátorem zobrazují samy na sebe (jsou tedy invariantem zobrazení). Je-li tedy $|u\rangle$ vlastní vektor operátoru φ, platí

$$\varphi|u\rangle = \lambda \cdot |u\rangle,$$

kde λ je komplexní číslo, nazývané vlastním číslem příslušným (lineárnímu obalu) vektoru $|u\rangle$. Množina vlastních čísel se nazývá *spektrum* operátoru. Následující seznam charakterizuje matice operátorů, které mají nějaké pěkné spektrální vlastnosti.

- Matice A je *diagonalizovatelná* pokud existuje regulární matice P taková, že $P^{-1}AP$ je diagonální. To nastává právě tehdy, pokud existuje báze vlastních vektorů operátoru A. Matice P je přitom maticí přechodu od kanonické báze k bázi vlastních vektorů.
- Matice A se nazývá *normální* pokud platí rovnost

$$AA^\dagger = A^\dagger A,$$

  tedy pokud zobrazení komutuje se svým adjungovaným zobrazením. Jedna z nejdůležitějších vět komplexní lineární algebry je **věta o spektrálním rozkladu normálních operátorů**, která říká, že operátor je normální právě tehdy, pokud jeho vlastní vektory tvoří ortonormální bázi (vzhledem k tomu, že vlastní vektory jsou dány až na násobek, bylo by přesnější říct, že tvoří ortogonální bázi, kterou je ovšem možné normováním převést na ortonormální). Existují dvě důležité podtřídy normálních matic:
  - Matice A je *Hermitovská*, neboli *samoadjungovaná*, pokud platí

$$A = A^\dagger.$$

    Hermitovské matice jsou zjevně normální a navíc mají reálná vlastní čísla.
  - Matice U se nazývá *unitární*, pokud zachovává skalární součin. To platí právě tehdy, když

$$U^\dagger U = E,$$

    což je v Diracově značení pěkně vidět:

$$\langle u|v\rangle = \langle u|U^\dagger U|v\rangle.$$

    Rovnost $U^\dagger U = E$ rovněž ukazuje, že sloupce (řádky) matice U tvoří ortonormální bázi. Unitární matice jsou zjevně normální.

  Větu o spektrálním rozkladu normálních operátorů můžeme nyní také formulovat tak, že operátor je normální, právě když je unitárně diagonalizovatelný, tedy když příslušná matice přechodu je unitární. To musí platit, protože jak výchozí, tj. kanonická báze, tak cílová báze vlastních vektorů jsou ortonormální. (Kanonická báze je ortonormální z definice; jinak řečeno, operátory zapisujeme podle dohody vždy v bázi, která je v daném unitárním prostoru ortonormální.)

Diracovo značení umožňuje elegantní zápis operátorů projekce P_v na zvolený vektor v. Platí:

$$P_v = |v\rangle\langle v|.$$

Součinem aritmetického (tj. souřadnicového) zápisu vektorů $|v\rangle$ a $\langle v|$ v tomto pořadí je čtvercová matice. Že se jedná o projekční operátor, je vidět ze zápisu

$$P_v|u\rangle = |v\rangle\langle v|u\rangle$$

a z faktu, že skalární součin $\langle v|u\rangle$ určuje velikost projekce vektoru u na vektor v.

Snadno se také nahlédne, že každý normální operátor lze napsat jako lineární kombinaci projekcí na vlastní vektory $v_1, v_2, \ldots, v_n$ (tvořící ortonormální bázi). Tedy

$$A = \sum_{i=1}^{n} a_i |v_i\rangle\langle v_i|,$$

kde a_i je vlastní číslo příslušné vektoru v_i.

To také unmožňuje definovat standardní funkce komplexních čísel pro operátory. Je-li $f : \mathbb{C} \to \mathbb{C}$ nějaká funkce, znamená $f(A)$ operátor

$$f(A) = \sum_{i=1}^{n} f(a_i) |v_i\rangle\langle v_i|.$$