Stopa matice a pozitivní operátory

Stopa čtvercové matice A je součet jejích diagonálních prvků. Značíme ji $\operatorname{tr}(A)$ podle anglického „trace“. Stopa splňuje cyklickou vlastnost:

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

Je dobré si všimnout, že z toho neplyne, a obecně neplatí $\operatorname{tr}(ABC) = \operatorname{tr}(BAC)$. Plyne však odsud, že $\operatorname{tr}(A) = \operatorname{tr}(QAQ^{-1})$ pro libovolnou regulární matici Q. Stopa je tedy stejná pro podobné matice, což také naznačuje její důležitost: je to vlastnost lineárního operátoru, nikoli pouze jeho konkrétního maticového zápisu. Má-li např. operátor A bázi vlastních vektorů, je možné součtem diagonály (v libovolné bázi) získat součet vlastních čísel (počítáno včetně násobnosti).

Další užitečnou vlastností stopy je vztah $\langle\psi|A|\psi\rangle = \operatorname{tr}(A|\psi\rangle\langle\psi|)$, který platí pro libovolný jednotkový vektor $|\psi\rangle$, jak snadno plyne z rovnosti

$$\operatorname{tr}(A|\psi\rangle\langle\psi|) = \sum_i \langle i|A|\psi\rangle\langle\psi|i\rangle = \langle\psi|A|\psi\rangle,$$

kde suma probíhá přes nějakou ortonormální bázi obsahující $|\psi\rangle$.

Operátor A nazýváme *pozitivní*, pokud pro každý vektor $|\psi\rangle$ platí $\langle\psi|A|\psi\rangle \geq 0$. (Všimněte si, že je to zkratka pro operátor, resp. matici, pozitivně semidefinitní.) Pro pozitivní operátor A speciálně platí, že $\langle\psi|A|\psi\rangle$ je reálné číslo pro každé $|\psi\rangle$. Z toho plyne, že pozitivní operátory jsou Hermitovské (viz poznámku níže).

Snadno ověříme, že pozitivní jsou operátory tvaru $A^\dagger A$, tedy specielně také všechny projekce $|\psi\rangle\langle\psi|$. Takové operátory tedy mají diagonální tvar s nezápornými vlastními čísly. Diagonální tvar $|\psi\rangle\langle\psi|$ je přitom matice s jedinou nenulovým koeficientem, jedničkou na diagonále odpovídající vlastnímu vektoru $|\psi\rangle$.

*

Poznámka: Pro diagonalizovatelné pozitivní operátory je zřejmé, že jsou Hermitovské. Pro obecné operátor plyne pro libovolné $|x\rangle$ z pozitivity $\langle x|A|x\rangle \in \mathbb{R}$, a tedy $\langle x|A|x\rangle = \langle x|A^\dagger|x\rangle$. Nyní můžeme použít polarizační vztah:

$$\begin{aligned} 4\langle x|A|y\rangle &= \langle x+y|A|x+y\rangle - \langle x-y|A|x-y\rangle \\ &\quad - i\langle x+iy|A|x+iy\rangle + i\langle x-iy|A|x-iy\rangle\,. \end{aligned}$$

Zneužíváme Diracovo značení a píšeme $|x+\lambda y\rangle$ namísto $|x\rangle + \lambda|y\rangle$; a $\langle x+\lambda y|$ namísto $(|x\rangle + \lambda|y\rangle)^\dagger$.

Alternativně si můžeme všimnout, že platí $A = C + iD$, kde C a D jsou Hermitovské operátory

$$C = \frac{A + A^\dagger}{2},$$
$$D = \frac{iA^\dagger - iA}{2}\,.$$

Potom $\langle x|A|x\rangle = \langle x|C|x\rangle + i\langle x|D|x\rangle$, kde $\langle x|C|x\rangle, \langle x|D|x\rangle \in \mathbb{R}$. Tedy $\langle x|D|x\rangle = 0$ pro každé x. Vzhledem k tomu, že D je Hermitovský, a tedy diagonalizovatelný, dostáváme $D = 0$.