

STOPA MATICE A POZITIVNÍ OPERÁTORY

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

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

Je dobré si všimnout, že z toho neplyne, a obecně neplatí $\text{tr}(ABC) = \text{tr}(BAC)$. Plyne však odsud, že $\text{tr}(A) = \text{tr}(Q A Q^{-1})$ 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 $\langle \psi | A | \psi \rangle = \text{tr}(A | \psi \rangle \langle \psi |)$, který platí pro libovolný jednotkový vektor $|\psi\rangle$, jak snadno plyne z rovnosti

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

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 speciálně 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 positivity $\langle x | A | x \rangle \in \mathbb{R}$, a tedy $\langle x | A | x \rangle = \langle x | A^\dagger | x \rangle$. Nyní můžeme použít polarizační vztah:

$$4\langle x | A | y \rangle = \langle x + y | A | x + y \rangle - \langle x - y | A | x - y \rangle - i\langle x + iy | A | x + iy \rangle + i\langle x - iy | A | x - iy \rangle.$$

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 $D = 0$.