1 Operatory: Symetryczne/Hermitowskie, Ortogonalne/ Unitarne

W rozdziale tym zakładamy, że mamy do czynienia z przestrzeniami wektorowymi z iloczynem skalarnym oznaczanym, jak dotąd, przez $(\cdot|\cdot)$. Przestrzenie te mogą być zarówno nad $\mathbb{R}$ (euklidesowe), jak i nad $\mathbb{C}$ (unitarne).

1.1 Operator sprzężony

Niech F będzie endomorfizmem V. Utwórzmy iloczyn skalarny $(x|Fy)$.

Def. *Operatorem sprzężonym* do F nazywamy taki operator $F^\dagger$, że dla dowolnych wektorów $x, y \in V$ zachodzi

$$(x|Fy) = (F^\dagger x|y). \tag{1}$$

Łatwo sprawdzić, że $F^\dagger$ jest operatorem *liniowym*, tzn. dla dowolnych $x_1, x_2 \in V$, $\lambda \in \mathbb{K}$ spełnia:

$$F^\dagger(x_1 + x_2) = F^\dagger x_1 + F^\dagger x_2, \qquad F^\dagger(\lambda x) = \lambda F^\dagger x. \tag{2}$$

Weźmy np.:

$$(x_1 + x_2|Fy) = (x_1|Fy) + (x_2|Fy) = (F^\dagger x_1|y) + (F^\dagger x_2|y) = (F^\dagger x_1 + F^\dagger x_2|y),$$

a z drugiej strony

$$(x_1 + x_2|Fy) = (F^\dagger(x_1 + x_2)|y);$$

z porównania lewych stron i faktu, że wektory x_1, x_2, y są dowolne, mamy pierwszą z własności (2). Co do drugiej, mamy

$$(\lambda x|Fy) = \bar{\lambda}(x|Fy) = \bar{\lambda}(F^\dagger x|y) = (\lambda F^\dagger x|y),$$

oraz

$$(\lambda x|Fy) = (F^\dagger(\lambda x)|y);$$

porównując prawe strony, mamy drugą z własności (2).

Stw. Operacja sprzężenia posiada własności:

1. $(F + G)^\dagger = F^\dagger + G^\dagger$.
2. $(\lambda F)^\dagger = \bar{\lambda} F^\dagger$.
3. $(F^\dagger)^\dagger = F$.
4. $(F \circ G)^\dagger = G^\dagger \circ F^\dagger$.

Dow. Sprawdza się te własności prosto, korzystając z definicji sprzężenia i własności iloczynu skalarnego. Wł. **1.** jest banalna. Sprawdźmy (aby się nie myliła z *liniowością* $F^\dagger$), własność **2.**:

$$(x|(\lambda F)y) = (x|\lambda Fy) = \lambda(x|Fy) = \lambda(F^\dagger x|y) = (\bar{\lambda} F^\dagger x|y),$$

a że, z drugiej strony, wyraz, z którego startowaliśmy, to

$$(x|(\lambda F)y) = ((\lambda F)^\dagger x|y),$$

to przez porównanie prawych stron otrzymamy **2.**.

Teraz **3.**:

$$(x|Fy) = (F^\dagger x|y) = \overline{(y|F^\dagger x)} = \overline{((F^\dagger)^\dagger y|x)} = (x|(F^\dagger)^\dagger y).$$

Sprawdźmy jeszcze wł. **4.**:

$$(x|(F\circ G)y) = (x|F(G(y))) = (F^\dagger x|Gy) = (G^\dagger(F^\dagger x)|y) = ((G^\dagger \circ F^\dagger)x|y);$$

a że z drugiej strony

$$(x|(F\circ G)y) = ((F\circ G)^\dagger x|y)$$

to przez porównanie prawych stron otrzymujemy własność 4.

1.2 Macierz operatora hermitowsko sprzężonego w bazie ortonormalnej

Zadajmy w przestrzeni V bazć e ortonormalną $e = (e_1, \ldots, e_n)$. Niech A będzie macierzą operatora F w tej bazie, zaś B niech będzie macierzą operatora $F^\dagger$ w tej bazie:

$$A = ({a^i}_j) = {[F]^e}_e \quad , \qquad B = ({b^i}_j) = {[F^\dagger]^e}_e.$$

Pomiędzy elementami macierzy A oraz B zachodzi następujący związek:

$${a^i}_j = (e_i|Fe_j) = (F^\dagger e_i|e_j) = \overline{(e_j|F^\dagger e_i)} = \bar{b}^j_i$$

Możemy tę własność wypowiedzieć słowami: Macierz B jest macierzą *transponowaną* (zamiana $i \longleftrightarrow j$) i *sprzężoną* (w sensie zespolonym). Wypowiadamy to krócej, mówiąc, że macierz B jest *hermitowsko sprzężona* do macierzy A. Oznaczamy ją tak samo jak dla operatorów:

$$B = A^\dagger.$$

Uwaga. Gdy $\mathbb{K} = \mathbb{R}$, to sprzężenie zespolone nie występuje i macierz B jest po prostu *transponowaną* macierzą A.

Uwaga. Powyższy związek pomiędzy macierzami $A = [F^e]_e$ oraz $B = {[F^\dagger]^e}_e$, mówiący, że $B = A^\dagger$, zachodzi tylko *w bazie ortonormalnej.* Gdy baza nie jest ortonormalna, związek ten jest bardziej skomplikowany. Może Czytelnik spróbuje wyprowadzić go w tym ogólniejszym przypadku?

1.3 Operatory zachowujące iloczyn skalarny

Def. Mówimy, że $F \in \operatorname{End} V$ *zachowuje iloczyn skalarny*, jeżeli dla dowolnych $x, y \in V$ zachodzi

$$(Fx|Fy) = (x|y) \tag{3}$$

Operatory zachowujące iloczyn skalarny posiadają następujące własności:

1. Są izomorfizmami. Warunek (3) można przepisać jako: $||Fx|| = ||x||$, tzn. $Fx = \mathbf{0} \Longleftrightarrow x = \mathbf{0}$, tzn. $\operatorname{Ker} F$ jest trywialny, więc F jest odwracalny.

2. Zachowują odległość:
$$d(Fx,Fy) = ||Fx - Fy|| = ||F(x-y)|| = ||x-y|| = d(x,y).$$
3. Tworzą *grupę* względem operacji składania. Element neutralny to odwzorowanie identycznościowe. Istnienie elementu odwrotnego wynika z 1), zaś złożenie dwóch operatorów F, G zachowujących iloczyn skalarny też zachowuje iloczyn skalarny:
$$(Fx|Fy) = (x|y), \quad (Gx|Gy) = (x|y) \implies (G \circ Fx|G \circ Fy) = (Fx|Fy) = (x|y),$$
tzn. $G \circ F$ też zachowuje iloczyn skalarny.

Operatory zachowujące iloczyn skalarny inaczej się nazywają w przestrzeniach nad $\mathbb{C}$ i $\mathbb{R}$.
Def.

- Dla $\mathbb{K} = \mathbb{C}$, operatory zachowujące iloczyn skalarny nazywają się *unitarne*. Grupa wszystkich operatoró unitarnych w przestrzeni $n-$wymiarowej oznaczana jest $U(n)$.
- Dla $\mathbb{K} = \mathbb{R}$, operatory zachowujące iloczyn skalarny nazywają się *ortogonalne*. Grupa wszystkich operatoró ortogonalnych w przestrzeni $n-$wymiarowej oznaczana jest $O(n)$.

Przykł.

1. Operator obrotu o kąt α w płaszczyźnie (tzn. $V = \mathbb{R}^2$, $\mathbb{K} = \mathbb{R}$) jest operatorem ortogonalnym.
2. Niech $V = \mathbb{R}^3$, $\mathbb{K} = \mathbb{R}$. Operator odbicia w płaszczyźnie przechodziącej przez środek jest operatorem ortogonalnym.

Stw. Dla $F \in \operatorname{End} V$ następujące warunki są równoważne:

1. F zachowuje iloczyn skalarny.
2. $F^\dagger F = I$.
3. $F^\dagger = F^{-1}$.
4. macierz $A = [F]^e{}_e$ operatora F w pewnej (a więc i każdej) bazie ortonormalnej spełnia warunek $A^\dagger A = I$.
5. F przekształca pewną (a więc i każdą) bazę o.n. w bazę o.n.

Dow. Równoważność 1. i 2. wynika natychmiast z definicji operatora sprzężonego (1) i warunku zachowywania iloczynu skalarnego (3) – wystarczy tylko zapisać ten ostatni jako
$$(Fx|Fy) = (F^\dagger Fx|y) = (x|y)$$
Równoważność 2., 3. i 4. jest oczywista. Pokażemy, że $1 \iff 5$.

$1 \implies 5$: Jeżeli e jest bazą ortonormalną, to
$$(Fe_i|Fe_j) = (e_i|e_j) = \delta_{ij},$$

a więc zbiór wektorów $(Fe_1, \ldots, Fe_n)$ też jest bazą ortonormalną.

$5 \Longrightarrow 1$: Jeśli F przekształca bazę ortonormalną e w bazę ortonormalną $(Fe_1, \ldots, Fe_n)$, to

$$(Fx|Fy) = (F(\sum_{i=1}^{n} x^i e_i)|F(\sum_{j=1}^{n} y^j e_j)) = \sum_{i=1}^{n}\sum_{j=1}^{n} \bar{x}^i y^j (Fe_i|Fe_j)$$
$$= \sum_{i=1}^{n}\sum_{j=1}^{n} \bar{x}^i y^j \delta_{ij} = \sum_{i=1}^{n} \bar{x}^i y^i = (x|y)$$

(skorzystaliśmy tu z faktu, że w bazie o.n. iloczyn skalarny ma postać kanoniczną).

Uwagi.

1. Warunek $A^\dagger A = I$ oznacza, że $A^{-1} = A^\dagger$. Tak więc macierz odwrotna do macierzy ortogonalnej (unitarnej) to macierz transponowana (hermitowsko sprzężona).

2. Równość $A^\dagger A = I$ oznacza, że $\sum_{j=1}^{n} \bar{a}_i^j a^j{}_k = \delta_{ik}$; a to z kolei znaczy, że kolumny $a_1, a_2, \ldots, a_n$ macierzy A tworzą *bazę ortonormalną* w $\mathbb{K}^n$. Analogiczna sytuacja ma miejsce z wierszam – wynika to z równości $AA^\dagger = I$.

1.4 Operatory hermitowsko samosprzężone (hermitowskie)

Def. Mówimy, że operator $F \in \operatorname{End} V$ jest *hermitowsko samosprzężony* lub *hermitowski* (używa się też terminu *samosprzęóny*), gdy zachodzi

$$F^\dagger = F.$$

Samosprzężoność operatora sprawdza się łatwo, gdy mamy bazę o.n. i wypiszemy macierz $A = [F]^e{}_e$ operatora w tej bazie. Wówczas warunek samosprzężoności jest

$$a^i{}_j = \bar{a}_i^j.$$

Macierz, spełniającą powyższy warunek, nazywamy:

- *macierzą hermitowską*, gdy $\mathbb{K} = \mathbb{C}$;
- *macierzą symetryczną*, gdy $\mathbb{K} = \mathbb{R}$.

1.4.1 Znaczenie operatorów hermitowskich

1. Kwadryki i ich klasyfikacja w $\mathbb{R}^2$ i $\mathbb{R}^3$: Postać kanoniczna po zaaplikowaniu transformacji *ortogonalnej*

2. Drgania normalne układu sprzężonych oscylatorów harmonicznych: Doprowadzenie przez *transformację ortogonalną* do sumy kwadratów *współrzędnych normalnych.* Sens fizyczny wartości własnych: *częstości własne.*

3. Mechanika kwantowa: Operatory odpowiadające wielkościom obserwowalnym są *operatorami samosprzężonymi* na przestrzeni stanów (przestrzeń wektorowa z iloczynem skalarnym – tzw. *przestrzeń Hilberta.*