

Przestrzenie Hilberta i operatory liniowe

Wprowadzenie do fizyki układów złożonych: wykład 01

A. Krawiecki

Politechnika Warszawska
Wydział Fizyki

Przestrzeń metryczna

Zbiór niepusty X z funkcją $\rho : X \times X \rightarrow \mathbb{R}_+$ (metryką) spełniającą warunki

$$\begin{aligned}\forall x, y \in X \quad \rho(x, y) &= 0 \Leftrightarrow x = y, \\ \forall x, y \in X \quad \rho(x, y) &= \rho(y, x), \\ \forall x, y, z \in X \quad \rho(x, y) &\leq \rho(x, z) + \rho(z, y).\end{aligned}$$

Przykłady

- (i.) $x, y \in \mathbb{R}, \mathbb{C}, \rho(x, y) = |x - y|$ (metryka naturalna),
- (ii.) $\forall x, y \in X \quad x \neq y \Rightarrow \rho(x, y) = 1$ (metryka dyskretna).

Przestrzeń metryczna zupełna

Przestrzeń metryczna jest zupełna, jeśli każdy ciąg x_n spełniający warunek Cauchy'ego

$$\forall \varepsilon > 0 \quad \exists N \in \mathbb{N} \quad \forall n, m > N \quad \rho(x_n, x_m) < \varepsilon$$

jest zbieżny (ma granicę) w tej przestrzeni.

Przykład Przedział $(0, 1)$ z metryką naturalną nie jest przestrzenią metryczną zupełną, ponieważ np. ciąg $x_n = \frac{1}{n}$ spełnia warunek Cauchy'ego, a nie jest zbieżny w tej przestrzeni.

Przestrzeń liniowa

Przestrzeń liniowa X nad ciałem K liczb rzeczywistych $\mathbb{R}$ lub zespolonych $\mathbb{C}$ spełnia następujące aksjomaty

$$\forall x, y \in X \quad x + y = y + x$$

$$\forall x, y, z \in X \quad (x + y) + z = x + (y + z)$$

$$\exists 0 \in X \quad \forall x \in X \quad x + 0 = x$$

$$\forall x \in X \quad \exists -x \in X \quad x + (-x) = 0$$

$$\forall \lambda \in K \quad \forall x, y \in X \quad \lambda(x + y) = \lambda x + \lambda y$$

$$\forall \lambda, \mu \in K \quad \forall x \in X \quad (\lambda + \mu)x = \lambda x + \mu x$$

$$\forall \lambda, \mu \in K \quad \forall x \in X \quad \lambda(\mu x) = (\lambda\mu)x$$

$$\forall x \in X \quad 1x = x$$

Przestrzeń unormowana

Przestrzeń liniowa X z funkcją $x \rightarrow \|x\|$ (normą) spełniającą warunki

$$\forall x \in X \quad \|x\| = 0 \Leftrightarrow x = 0,$$

$$\forall x \in X \forall \lambda \in \mathbb{C} \quad \|\lambda x\| = |\lambda| \|x\|,$$

$$\forall x, y \in X \quad \|x + y\| \leq \|x\| + \|y\|.$$

Przestrzeń unormowaną X można uważać za przestrzeń metryczną z naturalnie określoną metryką

$$\forall x, y \in X \quad \rho(x, y) = \|x - y\|.$$

Przestrzeń Banacha

Przestrzeń Banacha to przestrzeń unormowana zupełna.

Iloczyn skalarny

Dla $u, v \in H$, $\alpha, \beta \in \mathbb{C}$ iloczyn skalarny jest formą dwuliniową,

$$\begin{aligned}(v, v) &> 0 \\(u, v) &= (v, u)^* \\(u, \alpha v_1 + \beta v_2) &= \alpha(u, v_1) + \beta(u, v_2)\end{aligned}$$

Przykłady

- (i.) $u, v \in \mathbb{C}^3 \Rightarrow (u, v) = u_1^* v_1 + u_2^* v_2 + u_3^* v_3,$
- (ii.) $f, g \in L^2(\mathbb{R}) \Rightarrow (f, g) = \int_{-\infty}^{\infty} f^*(x)g(x)dx.$

Uwaga: $L^2(\mathbb{R})$ jest przestrzenią funkcji całkowalnych z kwadratem modułu, ważną w mechanice kwantowej.

Przestrzeń Hilberta

Przestrzeń Hilberta to przestrzeń unormowana zupełna z iloczynem skalarnym. Iloczyn skalarny w sposób naturalny definiuje normę (metrykę) w przestrzeni Hilberta,

$$\|u\|^2 = (u, u)$$

Przykład

$$f \in L^2(\mathbb{R}) \Rightarrow \|f\|^2 = \int_{-\infty}^{\infty} |f(x)|^2 dx$$

Operator liniowy

$$u, v \in H, \alpha, \beta \in \mathbb{C} \Rightarrow \hat{A}(\alpha u + \beta v) = \alpha \hat{A}u + \beta \hat{A}v$$

Norma operatora $\|\hat{A}\| = \sup_{v \in H: \|v\|=1} \|\hat{A}v\|$,

Iloczyn operatorów $\hat{A}\hat{B}v = \hat{A}(\hat{B}v)$,

Operator odwrotny $\hat{A}\hat{A}^{-1} = \hat{A}^{-1}\hat{A} = \hat{I}$

Komutator operatorów $[\hat{A}, \hat{B}] = \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}$,

Funkcja operatora definiowana jest przez rozwinięcie w szereg Taylora,

$$f(\hat{A}) = f(0)\hat{I} + f'(0)\hat{A} + \frac{1}{2}f''(0)\hat{A}^2 + \dots$$

Przykłady

$$f(\hat{A}) = \frac{1}{\hat{I} - \hat{A}} = \hat{I} + \hat{A} + \hat{A}^2 + \hat{A}^3 + \dots,$$

$$f(\hat{A}) = \exp(\alpha \hat{A}) = \hat{I} + \alpha \hat{A} + \frac{1}{2}\alpha^2 \hat{A}^2 + \frac{1}{3!}\alpha^3 \hat{A}^3 + \dots,$$

W szczególności **operator przesunięcia** definiowany jest przez rozkład na szereg Taylora,

$$\exp\left(a \frac{d}{dx}\right) f(x) = f(0) + a \left. \frac{df}{dx} \right|_{x=0} + \frac{1}{2}a^2 \left. \frac{d^2f}{dx^2} \right|_{x=0} + \dots = f(a)$$

Operator sprzężony

$$\forall u, v \in H \Rightarrow (\hat{A}^\dagger u, v) = (u, \hat{A} v).$$

Przykłady

(i.) Dla macierzy rzędu n

$$(u, \hat{A} v) = \sum_{j=1}^n \sum_{i=1}^n u_j^* A_{ji} v_i = \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n (A_{ji}^* u_j)^* v_i = ((\hat{A}^*)^T u, v) \Rightarrow \hat{A}^\dagger = (\hat{A}^*)^T$$

(ii.) Dla pochodnej ($f(x \rightarrow \pm\infty), g(x \rightarrow \pm\infty) \rightarrow 0$)

$$\begin{aligned} \left(f, \frac{d}{dx} g\right) &= \int_{-\infty}^{\infty} f^*(x) \frac{d}{dx} g(x) dx = f^*(x) g(x) \Big|_{-\infty}^{\infty} - \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d}{dx} f^*(x) g(x) dx \\ &= - \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d}{dx} f^*(x) g(x) dx = \left(-\frac{d}{dx} f, g\right) \Rightarrow \left(\frac{d}{dx}\right)^\dagger = -\frac{d}{dx} \end{aligned}$$

Operator samosprężony (hermitowski)

$$\hat{A}^\dagger = A$$

Przykład Macierz jest hermitowska, jeśli $A_{ij} = A_{ji}^*$.

Operator unitarny

$$\hat{A}^\dagger = A^{-1} \Rightarrow (Au, Av) = (u, v)$$

Przykład Macierz, której kolumny są wzajemnie ortogonalne, jest macierzą unitarną

$$\delta_{i,k} = \sum_{j=1}^n A_{ji}^* A_{jk} = \sum_{j=1}^n (A_{ij}^*)^T A_{jk} = \sum_{j=1}^n A_{ij}^\dagger A_{jk}$$

Reprezentacja macierzowa operatorów

Niech $B = \{\vec{e}_1, \vec{e}_2, \dots, \vec{e}_n\}$ będzie bazą ortonormalną, $(\vec{e}_i, \vec{e}_j) = \delta_{i,j}$.

$$\hat{A} \equiv M_B^B(\hat{A}) \Leftrightarrow A_{ij} \equiv [M_B^B(\hat{A})]_{ij} = (\vec{e}_i, \hat{A} \vec{e}_j)$$

Przy przejściu do nowej bazy B' , ponieważ macierz $[M_{B'}^{B'}(\text{Id})]$ jest unitarna,

$$A'_{ij} = M_{B'}^{B'}(\hat{A}) = M_{B'}^B(\text{Id}) M_B^B(\hat{A}) M_B^{B'}(\text{Id}); \quad M_{B'}^B(\text{Id}) = [M_{B'}^{B'}(\text{Id})]^{-1} = [M_{B'}^{B'}(\text{Id})]^\dagger$$

Ślad operatora

$$\text{Tr} \hat{A} = \sum_{j=1}^n A_{jj}$$

Ślad operatora nie zależy od wyboru bazy

$$\begin{aligned} \text{Tr} \hat{A}' &= \sum_{m=1}^n A'_{mm} = \sum_{m=1}^n \sum_{i,j=1}^n M_{B'}^B(\text{Id})_{mi} A_{ij} M_B^{B'}(\text{Id})_{jm} \\ &= \sum_{j,i=1}^n A_{ij} \sum_{m=1}^n M_B^{B'}(\text{Id})_{jm} M_{B'}^B(\text{Id})_{mi} = \sum_{i,j=1}^n A_{ij} \delta_{i,j} = \sum_{i=1}^n A_{ii} = \text{Tr} \hat{A} \end{aligned}$$

Wartości i wektory własne operatora

$$\hat{A}v = \lambda v, \quad \lambda \in \mathbb{C}$$

Przykład

Dla macierzy wartości własne są pierwiastkami równania charakterystycznego

$$\det(\hat{A} - \lambda \hat{I}) = 0$$

Wartości własne operatora hermitowskiego są rzeczywiste

$$\hat{A}v = \lambda v \Rightarrow \lambda^*(v, v) = (Av, v) = (v, Av) = \lambda(v, v) \Rightarrow \lambda^* = \lambda$$

Wektory własne odpowiadające różnym wartościom własnym operatora hermitowskiego są ortogonalne

$$\begin{aligned}\hat{A}v_1 &= \lambda_1 v_1, \quad \hat{A}v_2 = \lambda_2 v_2, \quad \lambda_1 \neq \lambda_2, \quad \lambda_1, \lambda_2 \in \mathbb{R} \\ \lambda_2(v_2, v_1) &= (\hat{A}v_2, v_1) = (v_2, \hat{A}v_1) = \lambda_1(v_2, v_1) \Rightarrow (v_2, v_1) = 0.\end{aligned}$$