или *канонической (жордановой)*[1] форме.) Но соответствующая теория довольно сложна, и мы ограничимся рассмотрением наиболее простых и важных для математической физики классов линейных операторов сначала в комплексном пространстве, а затем — в действительном.

В заключение этого параграфа приведем без доказательства еще два важных свойства матриц:

1. Пусть $P(\lambda)$ есть характеристический полином матрицы A, тогда $P(A)=0$ (теорема Гамильтона — Кели).

2. Если $\lambda_1, \lambda_2, \ldots, \lambda_n$ являются собственными значениями матрицы A, то собственными значениями некоторого матричного многочлена $P(A)$ являются числа $P(\lambda_1)$, $P(\lambda_2), \ldots, P(\lambda_n)$.

Отсюда вытекает, что след степени матрицы равен сумме степеней собственных значений матрицы-основания:

$$\operatorname{Sp} A^m = \lambda_1^m + \lambda_2^m + \ldots + \lambda_n^m.$$

§ 4. Линейные преобразования в унитарном пространстве

Пусть в комплексном евклидовом пространстве задан некоторый линейный оператор $\hat{A}$. Можно доказать, что в этом пространстве всегда существует (и притом только один) сопряженный ему оператор $\hat{A}^+$, удовлетворяющий условию

$$(\hat{A}\vec{x}, \vec{y}) = (\vec{x}, \hat{A}^+\vec{y}), \tag{10}$$

где $\vec{x}$ и $\vec{y}$ — произвольные два вектора унитарного пространства. На основании первой аксиомы скалярного произведения в комплексном пространстве можно определение (10) записать в эквивалентном виде:

$$(\vec{y}, A\vec{x}) = (\vec{x}, \hat{A}^+\vec{y})^*. \tag{10'}$$

Операция сопряжения, т. е. переход от $\hat{A}$ к $\hat{A}^+$, обладает

[1] Канонической называется квадратичная матрица, у которой каждый диагональный блок имеет форму:

$$\begin{Vmatrix} \lambda_k & 1 & 0 \\ 0 & \lambda_k & 1 \\ 0 & 0 & \lambda_k \end{Vmatrix},$$

где размерность подматрицы равна кратности собственного числа λ_k.

вытекающими из определений (10) или (10′) следующими простыми свойствами:

$$(\hat{A}^+)^+ = \hat{A}, \quad (\lambda\hat{A})^+ = \lambda^*\hat{A}^+, \quad (\hat{A}^+)^{-1} = (\hat{A}^{-1})^+,$$
$$(\hat{A}+\hat{B})^+ = \hat{A}^+ + \hat{B}^+, \quad (\hat{A}\cdot\hat{B})^+ = \hat{B}^+\cdot\hat{A}^+.$$

Рассмотрим матрицы сопряженных операторов в некотором ортонормированном базисе $\vec{e}_1, \vec{e}_2, \ldots, \vec{e}_n$. Пусть $A = \|a_{ik}\|$ и $A^+ = \|a^+_{ik}\|$. Применяя операторы $\hat{A}$ и $\hat{A}^+$ к базисным векторам $\vec{e}_i$, легко убеждаемся, что

$$a^+_{ik} = a^*_{ki},$$

т. е. матрицы A и A^+ являются эрмитово-сопряженными: $A^+ = \tilde{A}^*$. Операция эрмитового сопряжения в определенной степени напоминает переход от данного числа α к его комплексно-сопряженному α^*.

Среди комплексных чисел те, для которых $\alpha = \alpha^*$, являются действительными. Аналогичное положение имеет место у линейных операторов. Если линейный оператор $\hat{S}$ равен своему сопряженному оператору:

$$\hat{S} = \hat{S}^+, \tag{11}$$

то он называется *самосопряженным* (или *эрмитовым*). Очевидно, что матрица самосопряженного оператора является эрмитовой, т. е. $a_{ik} = a^*_{ki}$. (В действительном пространстве матрица самосопряженного оператора симметрична.)

Можно доказать следующие утверждения.

1. Любой линейный оператор $\hat{A}$ может быть представлен так:

$$\hat{A} = \hat{S}_1 + i\hat{S}_2,$$

где $\hat{S}_1$ и $\hat{S}_2$ — самосопряженные операторы. (Отсюда вытекает, что среди всех линейных операторов самосопряженные операторы играют такую же роль, какую играют действительные числа среди всех комплексных.)

2. Если $\hat{S}_1$ и $\hat{S}_2$ — самосопряженные линейные операторы, то их произведение $\hat{S}_1\cdot\hat{S}_2$ будет самосопряженным тогда и только тогда, когда операторы $\hat{S}_1$ и $\hat{S}_2$ между собой коммутируют.

3. **Если самосопряженные операторы $\hat{S}_1$ и $\hat{S}_2$ коммутируют, то все их n собственных векторов совпадают.** (Справедлива также обратная теорема.)

Выбрав в качестве базиса единую систему собственных векторов, мы обе самосопряженные матрицы S_1 и S_2 одновременно приведем к диагональному виду.

Поскольку самосопряженные операторы широко используются в квантовой механике, то познакомимся подробнее с их свойствами.

1. **Собственные значения самосопряженного оператора действительны.**

В самом деле, пусть $\vec{x}$ — собственный вектор, а λ — соответствующее собственное значение эрмитового оператора $\hat{S}$, т. е. $\hat{S}\vec{x}=\lambda\vec{x}$. Тогда согласно (10) $(\hat{S}\vec{x}, \vec{x}) = (\vec{x}, \hat{S}^+\vec{x})$. Но в силу самосопряженности $\hat{S}^+=\hat{S}$, поэтому, подставляя вместо $\hat{S}\vec{x}$ равную ему величину $\lambda\vec{x}$, получаем:

$$(\lambda\vec{x}, \vec{x}) = (\vec{x}, \lambda\vec{x}).$$

Поскольку мы рассматриваем комплексное евклидово пространство, то, вынося λ за скобки, имеем:

$$\lambda(\vec{x}, \vec{x}) = \lambda^*(\vec{x}, \vec{x}),$$

откуда

$$\lambda = \lambda^*,$$

что и доказывает действительность числа λ.

2. **Если $\hat{S}$ — самосопряженный оператор в n-мерном унитарном пространстве, то все его n собственных векторов взаимно ортогональны.**

Если выбрать в качестве базиса указанные взаимно ортогональные собственные векторы, то матрица оператора примет диагональный вид.

Итак, в комплексном евклидовом пространстве векторы самосопряженных операторов, являющихся обобщением понятия симметричных преобразований действительного пространства, образуют n-мерную систему ортонормированных векторов.

Аналогичным свойством обладает другой класс комплексных операторов — *унитарные*. Линейный оператор $\hat{U}$

называется унитарным, если

$$\hat{U} \cdot \hat{U}^* = \hat{I}. \tag{12}$$

Отсюда сразу следует, что $\hat{U}^+ = \hat{U}^{-1}$.

Чтобы подробнее познакомиться с унитарными операторами, рассмотрим скалярное произведение $(\hat{U}\vec{x}, \hat{U}\vec{y})$. Применяя к нему условие сопряженности (10), приходим к равенству

$$(\hat{U}\vec{x}, \hat{U}\vec{y}) = (\vec{x}, \hat{U}^+ \cdot \hat{U}\vec{y}).$$

Принимая во внимание условие унитарности (12), получаем окончательно:

$$(\hat{U}\vec{x}, \hat{U}\vec{y}) = (\vec{x}, \vec{y}).$$

Всякий унитарный оператор $\hat{U}$ в унитарном пространстве сохраняет скалярное произведение для любых двух векторов этого пространства.

В частности, при $\vec{x} = \vec{y}$

$$(\hat{U}\vec{x}, \hat{U}\vec{x}) = (\vec{x}, \vec{x}).$$

Унитарный оператор не меняет длин векторов.

Выясним условия, которым удовлетворяют унитарные матрицы U, соответствующие унитарным операторам.

Пусть в некотором ортонормированном базисе в n-мерном унитарном пространстве оператору $\hat{U}$ соответствует матрица

$$U = \begin{Vmatrix} u_{11} & u_{12} & \dots & u_{1n} \\ u_{21} & u_{22} & \dots & u_{2n} \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ u_{n1} & u_{n2} & \dots & u_{nn} \end{Vmatrix}.$$

Тогда сопряженному оператору $\hat{U}^+$ будет соответствовать матрица

$$U^* = \begin{Vmatrix} u_{11}^* & u_{21}^* & \dots & u_{n1}^* \\ u_{12}^* & u_{22}^* & \dots & u_{n2}^* \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ u_{1n}^* & u_{2n}^* & \dots & u_{nn}^* \end{Vmatrix}.$$

Из условия унитарности следует, что

$$U \cdot U^* = I = \begin{pmatrix} 1 & & & & \\ & 1 & & & \\ & & \cdot & & \\ & & & \cdot & \\ & & & & \cdot \\ & & & & & 1 \end{pmatrix}.$$

Следовательно, в соответствии с правилом умножения матриц

$$\sum_k U_{ik} U^*_{jk} = \begin{cases} 1 & \text{при } i = j, \\ 0 & \text{при } i \neq j. \end{cases} \qquad (12')$$

Матрица U является унитарной, если сумма произведений элементов какой-либо строки (столбца) на соответствующие комплексно-сопряженные элементы другой строки (столбца) равны 0, а сумма квадратов модулей элементов любой строки (столбца) равна единице.

Условие (12′) имеет простой геометрический смысл. Пусть $\vec{e}_1, \vec{e}_2, \ldots, \vec{e}_n$ — некоторый ортонормированный базис. Тогда, как несложно убедиться, векторы $\hat{U}\vec{e}_1$, $\hat{U}\vec{e}_2, \ldots, \hat{U}\vec{e}_n$ также образуют ортонормированный базис, так как

$$(\hat{U}\vec{e}_i, \hat{U}\vec{e}_k) = \begin{cases} 1 & \text{при } i = k, \\ 0 & \text{при } i \neq k. \end{cases}$$

Линейный оператор $\hat{U}$ является унитарным, если он переводит ортонормированный базис в другой, также ортонормированный базис.

Матрицы унитарного оператора $\hat{U}$, как и самосопряженного оператора, можно привести к простейшему диагональному виду:

$$U = \begin{pmatrix} \lambda_1 & & & & \\ & \lambda_2 & & & \\ & & \cdot & & \\ & & & \cdot & \\ & & & & \cdot \\ & & & & & \lambda_n \end{pmatrix}.$$

Здесь собственные числа $\lambda_1, \lambda_2, \ldots, \lambda_n$ по модулю равны 1.

Итак, мы установили, что самосопряженные и унитарные операторы обладают системой взаимно ортого-

нальных собственных векторов. Оказывается, что и самосопряженные, и унитарные операторы являются частными типами более широкого класса нормальных операторов, обладающих указанным свойством.

Оператор N называется нормальным, если он коммутирует со своим сопряженным:

$$\hat{N}\cdot\hat{N}^{+}=\hat{N}^{+}\cdot\hat{N}. \qquad (13)$$

Теорема: Для того чтобы у оператора $\hat{N}$ существовал ортогональный базис, необходимо и достаточно, чтобы $\hat{N}$ был нормальным оператором, т. е. удовлетворял условию (13).

Докажем сначала необходимость. Пусть в некотором ортогональном базисе (который без ограничения общности можно считать нормированным) матрица A имеет диагональный вид:

$$A=\begin{pmatrix}\lambda_1 & & & & \\ & \lambda_2 & & & \\ & & \cdot & & \\ & & & \cdot & \\ & & & & \lambda_n\end{pmatrix}.$$

Тогда в этом базисе сопряженная матрица A^*, очевидно, равна:

$$A^*=\begin{pmatrix}\lambda_1^* & & & & \\ & \lambda_2^* & & & \\ & & \cdot & & \\ & & & \cdot & \\ & & & & \lambda_n^*\end{pmatrix},$$

т. е. она также является диагональной. Но диагональные матрицы между собой всегда перестановочны: $AA^*=A^*A$. Следовательно, оператор A нормальный.

Из основного свойства нормальных операторов вытекает, что их матрицы всегда можно привести к диагональному виду.

§ 5. Линейные операторы в действительном евклидовом пространстве

Хотя вещественное евклидово пространство является частным случаем комплексного евклидова (унитарного) пространства, свойства линейных операторов, действующих в этих пространствах, могут существенно отличаться.