

2. Hilbert 空間上の operator.

作用素 \approx 行列

$$A: \mathcal{H} \longrightarrow \mathcal{H}$$

$$\begin{array}{c} \downarrow \\ |x\rangle \longmapsto A|x\rangle \\ \text{linear} \end{array}$$

2.1 リースの表現定理

例 $\mathcal{H} = \mathbb{C}^n = \left\{ \begin{pmatrix} x_1 \\ \vdots \\ x_n \end{pmatrix} \mid x_1, \dots, x_n \in \mathbb{C} \right\}$

内積 $\langle x, y \rangle = \sum_{i=1}^n \bar{x}_i y_i$

\mathcal{H} 上の線形汎関数

$$f: \mathcal{H} \longrightarrow \mathbb{C}$$

$$\begin{array}{c} \downarrow \\ |x\rangle \longmapsto f(x) \\ \text{linear} \end{array}$$

$$f(x) = \sum_{i=1}^n \omega_i x_i \quad \text{と書ける.}$$

[\therefore 線形 \rightarrow 1次式

$$f(\vec{0}) = 0 \rightarrow \text{定数項} = 0$$

よって $y_f = \begin{pmatrix} \bar{\omega}_1 \\ \vdots \\ \bar{\omega}_n \end{pmatrix}$ とおくと、 f は内積の形でかける。すなわち

$$f(x) = \langle y_f, x \rangle$$

Thm (1)- λ の表現定理, Riesz' representation theorem)

$\forall f \in \mathcal{H}^*$ に対し

$\exists y_f \in \mathcal{H}, f(x) = \langle y_f, x \rangle \quad (\forall x \in \mathcal{H})$ しかも一意.

2.2 sesqui-linear form
(歪 - 線形形式)
(双)

$$\varphi: \underbrace{(\mathcal{H}, \mathcal{H})}_{\mathcal{H} \times \mathcal{H}} \longmapsto \underbrace{\mathbb{C}}_{\mathbb{C}} \varphi(x, y)$$

が内積の条件(1)(2)が成り立つとき Sesqui-linear form という

Lem sesqui-linear form φ に対し,

$\exists A$ operator, $\varphi(x, y) = \langle x, Ay \rangle$ しかも A は一意.

☹ $f_y(x) := \overline{\varphi(x, y)}$

$$f_y: \underbrace{|\mathcal{H}\rangle}_{\mathcal{H}} \longmapsto \underbrace{\overline{\varphi(x, y)}}_{\mathbb{C}}$$

linear

1)- λ 表現より, $\exists z_y \in \mathcal{H}$

$$f_y(x) = \langle z_y, x \rangle$$

$$\begin{array}{ccc} \# & & \\ y & \longmapsto & z_y \\ \uparrow & & \uparrow \\ \mathcal{H} & & \mathcal{H} \end{array}$$

この対応は線形

$$\begin{cases} z_{\alpha y} = \alpha z_y & (\alpha \in \mathbb{C}) \\ z_{y_1 + y_2} = z_{y_1} + z_{y_2} \end{cases}$$

これは線形 operator $\therefore \exists A = \text{operator}$

$$z_y = Ay$$

$$f_y(x) = \langle Ay, x \rangle$$

よ、 τ .

$$\varphi(x, y) = \overline{f_y(x)}$$
$$= \overline{\langle Ay, x \rangle}$$

$$= \langle x, Ay \rangle \quad \square$$

2.3 エルミート共役 (Hermite conjugate)

例

$$\mathcal{H} = \mathbb{C}^n, \quad \text{行列 } A = (a_{ij}) \quad A^* = \overline{A^T} = (\overline{a_{ji}})$$

$\overline{A}: \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}$ given lin. operator.

$$\varphi(x, y) := \langle x, Ay \rangle \quad \text{is sesqui-lin. form.}$$

$$f(y, x) := \overline{\varphi(x, y)} = \langle Ay, x \rangle \quad \text{is sesqui-lin. form}$$

との τ . $\exists! A^* : \text{operator.}$

$$f(y, x) = \langle y, A^*x \rangle$$

$$\varphi(x, y) = \langle x, Ay \rangle$$

"

$$\overline{f(y, x)} = \overline{\langle y, A^*x \rangle}$$

$$= \langle A^*x, y \rangle$$

定義 (エルミート共役)

A に対して

$$\langle x, Ay \rangle = \langle A^*x, y \rangle$$

となる A^* が唯一存在する。

この A^* を A のエルミート共役という。

Lem

$$(\alpha A)^* = \bar{\alpha} A^* \quad (\alpha \in \mathbb{C})$$

$$(A+B)^* = A^* + B^*$$

$$(AB)^* = B^* A^*$$

2.4 エルミート (Hermite, 自己共役) operator

定義 (エルミート作用素)

$A^* = A$ のとき.

A を エルミート作用素 という.

定義 (作用素の固有値, 固有ベクトル)

A を 一般の作用素 とする. $x \in \mathcal{H}, \lambda \in \mathbb{C}$ で

$$Ax = \lambda x$$

となるとき.

λ : 固有値 eigen value.

x : 固有ベクトル eigen vector という.

以下 A を エルミート作用素 とする.

○ エルミート作用素の固有値は実数.

∵ x を eigen vec. λ を eigen value とする.

$$\langle x, Ax \rangle = \langle x, \lambda x \rangle = \lambda \langle x, x \rangle$$

A のエルミート性より.

$$\langle x, Ax \rangle = \langle Ax, x \rangle = \langle \lambda x, x \rangle = \bar{\lambda} \langle x, x \rangle$$

よって.

$$(\lambda - \bar{\lambda}) \langle x, x \rangle = 0 \quad \langle x, x \rangle \neq 0 \text{ より } \lambda - \bar{\lambda} = 0$$

よって $\lambda = \bar{\lambda}$ なのだから $\lambda \in \mathbb{R}$. \square

○ A : エルミート とする. A に対し, 固有値 $\lambda \neq \mu$ があり
それぞれ固有ベクトルを x, y とする. つまり,

$$Ax = \lambda x$$

$$Ay = \mu y$$

このとき $\langle x, y \rangle = 0$. つまり x と y は直交する.

① $\langle x, Ay \rangle = \langle x, \mu y \rangle = \mu \langle x, y \rangle$

エルミート性より

$$\langle x, Ay \rangle = \langle Ax, y \rangle = \langle \lambda x, y \rangle = \lambda \langle x, y \rangle$$

(λ は実数)

よって,

$$(\mu - \lambda) \langle x, y \rangle = 0 \quad \mu - \lambda \neq 0 \text{ より}$$

$$\langle x, y \rangle = 0$$

Thm

A をエルミート行列 とする.

$\dim \mathcal{H}$ を n とすると, A の固有値は重複を許せば n 個あり, それらの固有ベクトルを正規直交基底にとることができる. つまり,

$\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_n$: 固有値

$\updownarrow \quad \updownarrow \quad \updownarrow$
 $|e_1\rangle, |e_2\rangle, \dots, |e_n\rangle$: 固有ベクトル

$\lambda_1, \dots, \lambda_n$ は同じものがあってもよい.

$|e_1\rangle, \dots, |e_n\rangle$ を正規直交基底にとることができる. (証明略) ref. 線形代数のtext

※ 正規直交基底 (Orthogonal Normal System: ONS)

$$\|x\| = \langle x, x \rangle^{\frac{1}{2}} : \|x\| \geq 0, \text{長} \pm \text{ と} \text{し} \text{と}$$

$$\forall i \in \{1, \dots, n\} \quad \|e_i\| = 1$$

$$\forall i, j \in \{1, \dots, n\} \quad \langle e_i, e_j \rangle = \begin{cases} 1 & i=j \\ 0 & i \neq j \end{cases}$$

δ_{ij} のクロネッカーのデルタ

これより、

$$A = \sum_{i=1}^n \lambda_i \overbrace{|e_i\rangle\langle e_i|}^{\text{行列}} \quad - \textcircled{*}$$

と書ける。

∵ $|e_1\rangle, \dots, |e_n\rangle$ ONS の行先で operator が定まる。
 $k \in \{1, \dots, n\}$

$$A|e_k\rangle = \lambda_k |e_k\rangle$$

一方、

$$\begin{aligned} \left(\sum_{i=1}^n \lambda_i |e_i\rangle\langle e_i| \right) |e_k\rangle &= \sum_{i=1}^n \lambda_i |e_i\rangle \underbrace{\langle e_i, e_k \rangle}_{\delta_{ik}} \\ &= \lambda_k |e_k\rangle \end{aligned}$$

よって、基底での変化が同じなので、 A と $\sum \lambda_i |e_i\rangle\langle e_i|$ は同じ作用素である。

⊛ を固有値分解 (Schatten 分解)

Remark

固有値に重複がある場合：分解は一意的でない。

(一意的でないところをうまくとることか問題となる)

2.6 非負定値 operator

定義 operator $A: \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}$ が

$$\forall x \in \mathcal{H}, \langle x, Ax \rangle \geq 0$$

のとき A は非負定値 (半正定値, non negative definite) という

$$A \geq 0 \text{ とかく.}$$

$$\forall x \in \mathcal{H}, \langle x, Ax \rangle > 0$$

のとき A は正定値 (positive definite) という.

$$A > 0 \text{ とかく.}$$

Lem. 以下は同値.

(1) $A \geq 0$

(2) A は エルミート, 固有値が全て非負.

(証明)

(1) \Rightarrow (2)

$$A \geq 0 \stackrel{\text{def}}{\iff} \forall x \in \mathcal{H} \quad \langle x, Ax \rangle \geq 0, \quad \langle x, Ax \rangle \in \mathbb{R} \text{ より}$$

$$\langle x, Ax \rangle = \langle A^*x, x \rangle = \overline{\langle A^*x, x \rangle} = \langle x, A^*x \rangle$$

より,

$$\forall x \in \mathcal{H} \quad \langle x, (A - A^*)x \rangle = 0.$$

Fact. 以下は同値.

(1) $A = 0$

(2) $\forall x, \forall y \in \mathcal{H}, \langle x, Ay \rangle = 0$

(3) $\forall x \in \mathcal{H}, \langle x, Ax \rangle = 0$

(1) \Rightarrow (2) \Rightarrow (3) は明らか

(3) \Rightarrow (1) は省略

上の Fact より $A = A^*$

(2) \Rightarrow (1)

固有値分解

$$A = \sum_{i=1}^n \lambda_i |e_i\rangle\langle e_i|$$

ここで $\forall i \in \{1, \dots, n\} \quad \lambda_i \geq 0$.

$\forall x \in \mathcal{H} \quad \text{つまり}$

$$\langle x, Ax \rangle = \langle x, \left(\sum_{i=1}^n \lambda_i |e_i\rangle\langle e_i| \right) x \rangle$$

$$= \sum_{i=1}^n \lambda_i \underbrace{\langle x | e_i \rangle \langle e_i | x \rangle}_{\langle e_i | x \rangle^2}$$

$$= \sum_{i=1}^n \lambda_i \underbrace{|\langle e_i | x \rangle|^2}_{\geq 0} \leftarrow \mathbb{C} \text{ の絶対値 abs. val.}$$

$$\geq 0$$

\therefore 定義より $A \geq 0$.