

1 数学の基礎

- ノルムの定義

$$\|f(t)\|^p = \int_b^a |f(t)|^p dt$$

- 内積の定義

$$\langle f, g \rangle = \int_b^a f^*(t)g(t)dt$$

- ノルム空間 ノルムが定義された空間
- バナッハ空間 完備なノルム空間
- ヒルベルト空間 H 関数を元とする空間 ($p=2$)
 - H は線形空間である。
 - H には内積が定義されている
 - H は $d(x,y)$ について完備である。

- 計量空間 内積が定義された空間
- コーシー列 収束する点列 $|x_p - x_q| < \varepsilon \rightarrow 0$
- 可分 集合の元が実数と同じくらいつまっていること (可算個の基底が存在、フーリエ級数展開可能) 有理数は可分でなく、実数は可分
- 完備 (complete) その集合が極限操作について閉じている
- コンパクト 有界閉集合で完備な空間
- 閉包 有理数 $\equiv \mathbb{Q}$ なら、 $\overline{\mathbb{Q}} = \mathbb{R}$ (実数)、境界点も含めるという意味
- 弱収束

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \int_{-\pi}^{\pi} \sin nt \phi(t) dt = 0$$

となる列 $\sin nt$ は 0 に弱収束するという。

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \sin nt = 0$$

ヒルベルト空間の可算個の基底は強収束ではなく、弱収束する。

リーマン・ルベーグの定理

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \int_a^b \psi_n(t) \phi(t) dt = 0$$

ψ_n はヒルベルト空間の可算無限個の基底

- 超関数 (distribution)
 - 密度関数が定義できる。
 - D を無限微分可能な関数 (\mathbb{R}^N) で、有界閉集合の外ではゼロになる集合とし、その元を試験関数 ψ とする。超関数は試験関数の汎関数 $T(\psi)$ で、線形性と連続性を満たすもの。

例：超関数

$$T_f(\psi) = \int f(x)\psi(x)dx$$

- 完全性 $x = x_i e_i, x_i = e_i^\dagger x$ より、 $e_i \cdot e_i^\dagger = E$
- 表現 (representation) $x = x_i b_i$ のとき x_i の組を基底 b_j を用いた x の表現という。
- 相似変換 $\hat{A} = Q^{-1} A Q$
- 正準変換 (理 723) 量子力学では状態ベクトルのユニタリ変換をいう。交換関係は不変で演算子の自己共役性も保たれる。正準変換は与えられた物理量の自己共役演算子が対角的になるように表示を変換するために用いる。
- 正準交換関係 量子力学において、座標と運動量の直交座標成分に対応する自己共役演算子 q_k, p_k の間に要請される次の関係

$$[q_k, p_l] = -i\hbar \delta_{kl}, [q_k, q_l] = 0, [p_k, p_l] = 0$$

この要請から座標と運動量の演算子がほぼ一意に定まる。座標表示をとり波動関数 ψ に作用する形にしていえば、

$$q_k \psi = x_k \psi \tag{1}$$

$$p_k \psi = -i\hbar (\partial / \partial x_k) \psi \tag{2}$$

- 正規行列 $A^\dagger A = A A^\dagger$
- 二次形式 $\sum_{ij}^m x_i^* a_{ij} x_j$

- Hermite 形式 $x^\dagger Ax, A$ はエルミート
- 合同変換 $\hat{x} = Q^{-1}x, \hat{A} = Q^\dagger A Q$ 合同変換によって、二次形式の値は変わらない。 $x^\dagger Ax = \hat{x}^\dagger \hat{A} \hat{x}$
- 正値 (positive definite) $x^\dagger Ax > 0$ 、半正値は ≥ 0 、 A が正値ならすべての固有値は正である。
- $x^\dagger x = 1$ のもとで $x^\dagger Ax$ の最小値を求める = 固有値問題

2 ヒルベルト空間

- ヒルベルト空間 H 関数を元とする空間 ($p=2$)

- H は線形空間である。
- H には内積が定義されている
- H は $d(x,y)$ について完備である。

- l_2 空間

n 次元の数ベクトル空間の元 $z = \sum_{n=1}^{\infty} e_n z_n$ について、 $\sum_{n=1}^{\infty} |z_n|^2 < \infty$ となるベクトル全体の集合 ($\langle z_i, z_j \rangle = \delta_{ij}$)

- L_2 空間

区間 $[a, b]$ で定義されたルベーグ自乗可積分関数

$$\int_a^b |f(t)|^2 dt < \infty$$

を満たす関数 $f(t)$ の集合を $L_2[a, b]$ 空間という。実数空間 $-\infty \sim \infty$ を R で表すと、 $L_2[R]$ 空間である。

3 ヒルベルト空間上の線形作用素

- 有界性

演算子 T の定義域 D_T に属しているすべての ϕ に対して

$$\|T\phi\| \leq \gamma \|\phi\|$$

を満たすような正定数 γ が存在するなら、 T は定義域 D_T 上で有界という 有界なら連続である。

- 射影作用素 (自己共役)

M をヒルベルト空間 H 内の閉じた線形多様体とし、 H に属している任意の ϕ に対して、 ϕ の M への射影写像として $\psi = P_M \phi$ を定義する。 P_M は ϕ の M 上への射影作用素と呼ばれる。 $P_M^2 = P_M$ の性質がある。

- ヒルベルト・シュミットの積分作用素 K

$$\psi(x) \equiv K\phi \equiv \int_a^b k(x,y)\phi(y)dy$$

- 共役作用素 T^\dagger

共役作用素は $\langle T\phi, \psi \rangle = \langle \phi, T^\dagger \psi \rangle$ を満たす。内積 $\langle T\phi, \psi \rangle$ で作られる空間を共役空間 (双対空間) と呼ぶ。マトリックスではこれに対応するものを随伴マトリックスと呼ぶ。 H の正規直交系 ϕ_i で有界線形作用素 A をマトリックスの要素 $a_{jk} = \langle \phi_j, A\phi_k \rangle$ で表現することを考える。 A の共役作用素はマトリックスの要素によって以下の式で表せる。

$$a_{jk}^\dagger = \langle \phi_j, A^\dagger \phi_k \rangle = \langle \phi_k, A\phi_j \rangle^* = a_{kj}^*$$

- 自己共役作用素 (エルミート作用素)

$T^\dagger = T$ 、エルミート作用素は量子力学で重要

- ユニタリ作用素 $U^\dagger U = U U^\dagger = I$ 、 $\|U\psi\| = \|\psi\|$

4 演算子

4.1 エルミート演算子 (L_2 空間)

固有値は実数、固有関数は直交性、規格化、完全性を満たし、スツルム・リュービル系の微分方程式の解である。

エルミート演算子 \hat{F} の異なった固有値 f_i, f_j に対応する波動関数 ψ_i, ψ_j は直交する。

$$\int \psi_i^* \psi_j dq = 0$$

4.2 スペクトル分解

ヒルベルト・シュミットの展開式¹

$$K = \sum \lambda_i |\phi_i\rangle \langle \phi_i|, Kf = \sum \lambda_i |\phi_i\rangle \langle \phi_i|f\rangle = \sum \lambda_i \langle \phi_i|f\rangle |\phi_i\rangle$$

$$Kf(t) = \sum_{n=1}^{\infty} \lambda_n \langle \phi_n, f \rangle \phi_n \quad (3)$$

ここで、

$$K|\phi_i\rangle = \lambda_i|\phi_i\rangle$$

i 番目の固有値 λ_i に属する固有関数 ϕ_i に対応する固有空間 M_i は上式を満たすすべての ϕ_i にゼロを加えた週報である。 M_i への射影作用素を P_i とすると、

$$P_i f = \sum_{k=1}^{n_i} \langle \phi_k | f \rangle \phi_k \quad (4)$$

n_i は λ_i の重複度である。この式を書き換えると、

$$P_i f = \sum_{k=1}^{n_i} |\phi_k\rangle \langle \phi_k | f \rangle \quad (5)$$

であり、これは一般フーリエ級数展開である。これらの関係より、作用素の関係式が得られる。

$$K = \sum_{i=1}^{\infty} \lambda_i P_i$$

4.3 一般フーリエ級数展開

完全正交関数系 $\phi_n(t)$ による一般フーリエ級数展開

$$\phi(t) = \sum_{n=1}^{\infty} \langle \phi_n | \phi \rangle \phi_n \quad (6)$$

$$= \sum_{n=1}^{\infty} |\phi_n\rangle \langle \phi_n | \phi \rangle \quad (7)$$

パーセルの等式 ($a_n = \langle \phi_n | \phi \rangle$)

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\phi(t)|^2 dt = \sum_{n=-\infty}^{\infty} |a_n|^2 \quad (8)$$

4.4 フレドホルムの積分方程式

$$\phi(t) - \mu \int_a^b k(t, x) \phi(x) dx = f(t)$$

K : 積分作用素 (コンパクト作用素) として、

$$K\phi(t) = \int_a^b k(t, x) \phi(x) dx$$

なら、

$$\phi(t) - \mu K\phi(t) = f(t)$$

$\lambda = 1/\mu$ として、 $\lambda \neq \lambda_n$ のとき²、

$$\phi(t) = f(t) + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\lambda_n \langle \phi_n, f \rangle \phi_n}{\lambda_n - \lambda} \quad (9)$$

$$= |f\rangle + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\lambda_n |\phi_n\rangle \langle \phi_n|}{\lambda_n - \lambda} |f\rangle \quad (10)$$

5 微小回転の演算子

微小回転の演算子は $x \rightarrow x'$ の微小回転 (z 軸周り) を考えて、

$$f'(x) = f(x) = f(R^{-1}x') = f(x) + \omega(\mathbf{x} \times \nabla)_1 f(x)$$

$$(\mathbf{x} \times \nabla)_1 = \left(x_2 \frac{\partial}{\partial x_3} - x_3 \frac{\partial}{\partial x_2} \right)$$

よって、 $Uf(x) = f'(x)$ (U : 回転に対応する演算子) であり、

$$U_{\omega}^{(j)} = 1 + \omega(\mathbf{x} \times \nabla)_j$$

量子力学では運動量が $\mathbf{p} = (\hbar/i)\nabla$ で定義されるため、軌道角運動量は $\mathbf{L} = \mathbf{x} \times \mathbf{p}$ であるので、これを用いると以下のようなになる。

$$U_{\omega}^j = 1 + \omega(i/\hbar)L_j$$

また、以下の交換関係が成り立つ

$$[x_i, p_j] = i\hbar\delta_{ij}$$

$$[L_i, L_j] = i\hbar \sum_k^3 \varepsilon_{ijk} L_k$$

量子力学では L_j がどのような固有値を持つかが問題になる。その固有値が物理系の取りうる軌道角運動量の値をあらわすからである。

² λ_n は K の固有値