ディラック記法による線形代数

平成21年6月13日

目 次

第1章　ベクトル空間

1.1　ベクトル空間

ベクトル空間

集合 V の要素 $|u\rangle, |v\rangle$ と複素数の全体 $\boldsymbol{C}$ の要素 c について, **和** $|u\rangle + |v\rangle$ と**スカラー倍** $|u\rangle c$ が定められているとする．これらが

$$\begin{aligned} |u\rangle + |v\rangle &\in V \\ |u\rangle c \quad &\in V \end{aligned} \tag{1.1}$$

を満たすとき, V を $\boldsymbol{C}$ 上の**ベクトル空間**といい, V の要素を**ベクトル**という．V の部分集合 $V_\clubsuit$ がそれ自身ベクトル空間となるとき $V_\clubsuit$ を V の**部分ベクトル空間** という．任意のベクトル $|u\rangle$ に対して

$$\mathbf{0} + |u\rangle = |u\rangle \tag{1.2}$$

を満たす特別なベクトル $\mathbf{0}$ を**零ベクトル**という． また, k 個のベクトル $|a_1\rangle, \cdots, |a_k\rangle$ について,

$$|a_1\rangle c_1 + \cdots + |a_k\rangle c_k \tag{1.3}$$

の形の和を $|a_1\rangle, \cdots, |a_k\rangle$ の**一次結合**という．さらに, この一次結合が

$$|a_1\rangle c_1 + \cdots + |a_k\rangle c_k = \mathbf{0} \tag{1.4}$$

を満たすのが

$$c_1 = 0, \cdots, c_k = 0 \tag{1.5}$$

である場合に限るとき, $|a_1\rangle, \cdots, |a_k\rangle$ は**一次独立**であるという．そうでないとき $|a_1\rangle, \cdots, |a_k\rangle$ は**一次従属**であるという．

基底と次元

V において一次独立なベクトルとして選べるそれらの最大個数 n を V の

次元といい $\dim V$ で表す．これら一次独立な n 個のベクトル $|a_1\rangle, \cdots, |a_n\rangle$ を用いると, V の任意のベクトル $|u\rangle$ は

$$|u\rangle = |a_1\rangle u_1^a + \cdots + |a_n\rangle u_n^a = \sum_{i=1}^{n} |a_i\rangle u_i^a \tag{1.6}$$

と一意的に展開できる．このとき

$$a = \{\!\{|a_1\rangle, \cdots, |a_n\rangle\}\!\} \tag{1.7}$$

を V の**基底**という．逆に, 一次独立な n 個のベクトル $|a_1\rangle, \cdots, |a_n\rangle$ が与えられたとき, $|a_1\rangle, \cdots, |a_n\rangle$ の一次結合 (1.6) の全体 V はベクトル空間となる．このとき $|a_1\rangle, \cdots, |a_n\rangle$ は V の 1 つの基底である．基底としては一次独立な n 個のベクトルであれば何を選んでもよいが, 基底の選び方によっては便利であるかないかの差が生じ得る．

ベクトルの列ベクトル表示

基底 a によって (1.6) のように展開されたベクトル $|u\rangle$ を

$$|u\rangle \stackrel{a}{=} \begin{bmatrix} u_1^a \\ \vdots \\ u_n^a \end{bmatrix} \tag{1.8}$$

と表したものを, ベクトル $|u\rangle$ の基底 a による**列ベクトル表示**という．特に, i 番目の基底ベクトル $|a_i\rangle$ の基底 a 自身による列ベクトル表示は

$$|a_i\rangle \stackrel{a}{=} \begin{bmatrix} 0 \\ \vdots \\ 0 \\ 1 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{bmatrix} \begin{matrix} \\ \\ \\ \leftarrow i \text{ 番目} \\ \\ \\ \\ \end{matrix} \tag{1.9}$$

である．ベクトル $|u\rangle$ の列ベクトル表示は基底の選び方によってまったく変わってしまう．これは大変重要であるので注意しよう．

ベクトル空間としての複素数の全体

複素数の全体 $\boldsymbol{C}$ はそれ自身一つのベクトル空間と考えられる．つまり, c,

$d \in \boldsymbol{C}$ について

$$\begin{aligned} c + d &\in \boldsymbol{C} \\ c \cdot d\ &\in \boldsymbol{C} \end{aligned} \tag{1.10}$$

が成り立つ．ベクトル空間としての $\boldsymbol{C}$ の次元 $\dim\boldsymbol{C}$ は 1 である．$\boldsymbol{C}$ をベクトル空間とみなすときは, $\boldsymbol{C}$ の基底として常に 1 を選ぶことにする．このとき, c の列ベクトル表示は c 自身である．

1.2　線形写像

線形写像

ベクトル空間 V からベクトル空間 Λ への写像 $X : V \to \Lambda$ がベクトル $|u\rangle$, $|v\rangle \in V$ と複素数 $c \in \boldsymbol{C}$ に対し,

$$\begin{aligned} X\left(|u\rangle + |v\rangle\right) &= X|u\rangle + X|v\rangle \\ X\left(|u\rangle c\right) &= \left(X|u\rangle\right) c \end{aligned} \tag{1.11}$$

を満たすとき, X を**線形写像**という．このとき $X|u\rangle$, $X|v\rangle \in \Lambda$ であり, また, X は $|u\rangle$, $|v\rangle$ に左から作用するという．2 つの線形写像 X, Y の和とスカラー倍はそれぞれ

$$\begin{aligned} (X+Y)\,|u\rangle &= X|u\rangle + Y|u\rangle \\ (cX)\,|u\rangle &= \left(X|u\rangle\right) c \end{aligned} \tag{1.12}$$

によって定義される．この和とスカラー倍により線形写像の全体もベクトル空間となる．$X|u\rangle$ の全体は Λ の部分ベクトル空間であり, これを X による V の Λ における**像**といい $X(V)$ で表す．$X(V)$ の次元を X の**階数**といい $\mathrm{rank}X$ で表す．また, $X|u\rangle = \boldsymbol{0}$ となる $|u\rangle$ の全体は V の部分ベクトル空間であり, これを X の**核**といい $\mathrm{Ker}X$ で表す．このとき

$$\dim\left(\mathrm{Ker}X\right) + \mathrm{rank}X = \dim V \tag{1.13}$$

である．なお, 2 つの線形写像 $Y : \Omega \to V$, $X : V \to \Lambda$ の積 $XY : \Omega \to \Lambda$ を

$$(XY)\,|\omega\rangle = X\left(Y|\omega\rangle\right) \tag{1.14}$$

によって定義する．ここで $|\omega\rangle$ は Ω の任意のベクトルである．

線形変換

V から V 自身への線形写像を特に V の**線形変換**という．また，線形変換 X はベクトル $|u\rangle$ をベクトル $X|u\rangle$ に**変換する**という．このとき，V の 2 つの線形変換 X, Y の積 XY も V の線形変換である．任意のベクトル $|u\rangle$ に対して

$$I|u\rangle = |u\rangle \tag{1.15}$$

を満たす線形変換を**恒等変換**という．つまり，恒等変換 I は $|u\rangle$ に何もしない線形変換である．さらに，

$$X^{-1}X = XX^{-1} = I \tag{1.16}$$

を満たす線形変換 X^{-1} が存在するとき，これを X の**逆変換**という．逆変換 X^{-1} が存在する線形変換 X は**正則**であるという．最後に重要な線形変換として**射影**について述べる．射影とは

$$I_\clubsuit^2 = I_\clubsuit \tag{1.17}$$

を満たす線形変換をいう．$I_\clubsuit|u\rangle$ の全体

$$V_\clubsuit = I_\clubsuit(V) \tag{1.18}$$

は V の部分ベクトル空間となる．これを強調して $I_\clubsuit$ を V から $V_\clubsuit$ への射影という．$I_\clubsuit$ が与えられれば $V_\clubsuit$ は一意的に決まる．これに対し，$V_\clubsuit$ が与えられただけでは $I_\clubsuit$ は一意的には決まらないという点に注意しよう．これについては 2.1 節で詳しく説明する．なお，

$$\mathrm{dim} V_\clubsuit = \mathrm{rank} I_\clubsuit \tag{1.19}$$

である．

線形写像の行列表示

V(n 次元) に基底 a, Λ(m 次元) に基底 α をとる．このとき，

$$X|a_j\rangle = |\alpha_1\rangle X_{1j}^{\alpha a} + \cdots + |\alpha_m\rangle X_{mj}^{\alpha a} = \sum_{i=1}^{m} |\alpha_i\rangle X_{ij}^{\alpha a} \tag{1.20}$$

により定まる $X_{ij}^{\alpha a}$ の集まりを線形写像 X の基底 a, α による**行列表示**といい,

$$X \overset{\alpha a}{=} \begin{bmatrix} X_{11}^{\alpha a} & \cdots & X_{1n}^{\alpha a} \\ \vdots & & \vdots \\ X_{m1}^{\alpha a} & \cdots & X_{mn}^{\alpha a} \end{bmatrix} \tag{1.21}$$

と表す．また, これを $[X]_{m\times n}^{\alpha a}$ と略記する．(1.21) は m 行 n 列の行列である．特に, 線形変換の場合は $\Lambda = V$ であるから $\alpha = a$ と選ぶならば,

$$X|a_j\rangle = |a_1\rangle X_{1j}^a + \cdots + |a_n\rangle X_{nj}^a = \sum_{i=1}^{n} |a_i\rangle X_{ij}^a \tag{1.22}$$

である．つまり, $[X]_{n\times n}^a$ は

$$X \overset{a}{=} \begin{bmatrix} X_{11}^{a} & \cdots & X_{1n}^{a} \\ \vdots & & \vdots \\ X_{n1}^{a} & \cdots & X_{nn}^{a} \end{bmatrix} \tag{1.23}$$

となる．(1.23) は n 次正方行列である．特に, 恒等変換の行列表示 は

$$I \overset{a}{=} \begin{bmatrix} 1 & & O \\ & \ddots & \\ O & & 1 \end{bmatrix} \tag{1.24}$$

であり, n 次単位行列で与えられる．また, X の逆変換の行列表示は

$$X^{-1} \overset{a}{=} \begin{bmatrix} X_{11}^{-1a} & \cdots & X_{1n}^{-1a} \\ \vdots & & \vdots \\ X_{n1}^{-1a} & \cdots & X_{nn}^{-1a} \end{bmatrix} \tag{1.25}$$

であり, $[X]_{n\times n}^a$ の逆行列 $[X^{-1}]_{n\times n}^a$ で与えられる．最後に, 線形変換 X の**トレース** $\mathrm{tr}X$ を

$$\mathrm{tr}X = X_{11}^a + \cdots + X_{nn}^a = \sum_{i=1}^{n} X_{ii}^a \tag{1.26}$$

によって定義する．このとき

$$\begin{aligned} \mathrm{tr}\,(X+Y) &= \mathrm{tr}X + \mathrm{tr}Y \\ \mathrm{tr}\,(cX) \quad &= c\,\mathrm{tr}X \end{aligned} \tag{1.27}$$

である．以上が線形写像の行列表示についての基本であるが，ベクトルの列ベクトル表示の場合と同じく，線形写像の行列表示は基底の選び方によってまったく変わってしまう．これは大変重要であるので注意しよう．

線形写像としてのベクトル

ベクトル $|u\rangle$ は，複素数 $c \in \boldsymbol{C}$ に対して

$$|u\rangle : c \mapsto |u\rangle c \in V \tag{1.28}$$

と作用するとみることにより，$\boldsymbol{C}$ から V への線形写像とみなせる．このとき $|u\rangle$ の行列表示は，

$$|u\rangle \cdot 1 = |u\rangle = |a_1\rangle u_1^a + \cdots + |a_n\rangle u_n^a \overset{a}{=} \begin{bmatrix} u_1^a \\ \vdots \\ u_n^a \end{bmatrix} \tag{1.29}$$

である．これは $[u]_{n\times 1}^a$ という n 行 1 列の行列，つまり，n 次元縦ベクトルである．したがって，$|u\rangle$ の列ベクトル表示 (1.8) は $|u\rangle$ を $\boldsymbol{C}$ から V への線形写像とみなすときのその行列表示であるともいえる．

1.3　双対基底

線形形式と双対空間

V から $\boldsymbol{C}$ への線形写像 f を考える．f の行列表示は，

$$f|a_j\rangle = 1 \cdot f_{1j}^{1a} = \bar{f}_j^a \tag{1.30}$$

である．これは $[f]_{1\times n}^a$ という 1 行 n 列の行列，つまり，n 次元横ベクトルである．したがって，f の全体は V と同じく n 次元のベクトル空間となる．これを強調するため f を特に $\langle f|$ と表し，これを**線形形式**という．この記法によると (1.30) は

$$\langle f|a_j\rangle = \bar{f}_j^a \tag{1.31}$$

と表される．また，線形形式 $\langle f|$ の行列表示

$$\langle f| \overset{a}{=} \begin{bmatrix} \bar{f}_1^a & \cdots & \bar{f}_n^a \end{bmatrix} \tag{1.32}$$

を $\langle f|$ の行ベクトル表示とよぶ．線形形式 $\langle f|$ 全体のつくるベクトル空間を $V^\star$ で表す．$V^\star$ を V の**双対空間**という．一般のベクトル $|u\rangle$ に対する $\langle f|$ の左からの作用は,

$$\langle f|u\rangle = \bar{f}^a_1 u^a_1 + \cdots + \bar{f}^a_n u^a_n = \begin{bmatrix} \bar{f}^a_1 & \cdots & \bar{f}^a_n \end{bmatrix} \begin{bmatrix} u^a_1 \\ \vdots \\ u^a_n \end{bmatrix} \tag{1.33}$$

である．$\langle f|u\rangle$ を $\langle f|$ と $|u\rangle$ の**スカラー積**という．スカラー積 $\langle f|u\rangle$ は 1 つの複素数である．次に, 線形写像の線形形式に対する右からの作用を定義する．線形写像 $X : V \to \mathit{\Lambda}$ が与えられたとき, 線形形式 $\langle\phi| \in \mathit{\Lambda}^\star$ に対する X の右からの作用を

$$(\langle\phi|X)\,|u\rangle = \langle\phi|\,(X|u\rangle) \tag{1.34}$$

によって定義する．線形形式への右からの作用としてみた X は, $\mathit{\Lambda}^\star$ から $V^\star$ への線形写像である．特に, X が線形変換のとき, つまり, $\mathit{\Lambda} = V$ のときは

$$(\langle f|X)\,|u\rangle = \langle f|\,(X|u\rangle) \tag{1.35}$$

である．このとき, 線形形式に対する右からの作用としてみた X は $V^\star$ の線形変換である．なお, 線形形式 $\langle\phi|$ と線形写像 X の積 $\langle\phi|X$ は 2 つの線形写像の積 (1.14) の特別な場合とみなせる．

双対基底

ベクトル $|u\rangle$ を基底 $a = \{\!\!\{|a_1\rangle, \cdots, |a_n\rangle\}\!\!\}$ で展開したとき, その i 番目の成分をとりだす線形形式を $\langle\bar{a}_i|$ と表すことにする．つまり,

$$\langle\bar{a}_i|u\rangle = \langle\bar{a}_i|a_1\rangle u^a_1 + \cdots + \langle\bar{a}_i|a_n\rangle u^a_n = \sum_{j=1}^{n} \langle\bar{a}_i|a_j\rangle u^a_j = u^a_i \tag{1.36}$$

である．これは,

$$\langle\bar{a}_i|a_j\rangle = \delta_{ij} \tag{1.37}$$

であることと同等である．したがって, $\langle\bar{a}_i|$ の基底 a による行ベクトル表示は i 番目の成分が 1 で他はすべて 0 の n 次元横ベクトル

$$\langle\bar{a}_i| \overset{a}{=} \begin{bmatrix} 0 & \cdots & 0 & 1 & 0 & \cdots & 0 \end{bmatrix} \tag{1.38}$$
$$\uparrow i\,\text{番目}$$

である．このことから，

$$\bar{a}^\star = \{\!\{\langle \bar{a}_1|, \cdots, \langle \bar{a}_n|\}\!\} \tag{1.39}$$

を $V^\star$ の基底として選べることがわかる．この $V^\star$ の基底 $\bar{a}^\star$ を V の基底 a の**双対基底**という．$V^\star$ の任意の線形形式 $\langle f|$ は基底 $\bar{a}^\star$ によって

$$\langle f| = \bar{f}_1^a \langle \bar{a}_1| + \cdots + \bar{f}_n^a \langle \bar{a}_n| = \sum_{i=1}^n \bar{f}_i^a \langle \bar{a}_i| \tag{1.40}$$

と一意的に展開される．次に，線形写像 $X : V \to \Lambda$ を考えよう．$\Lambda^\star$ の双対基底を $\bar{\alpha}^\star$ とすると，

$$\langle \bar{\alpha}_i | \alpha_j \rangle = \delta_{ij} \tag{1.41}$$

である．したがって，線形写像の行列表示の (i, j) 成分は (1.20) から

$$X_{ij}^{\alpha a} = \langle \bar{\alpha}_i | X | a_j \rangle \tag{1.42}$$

と表される．特に，線形変換の行列表示の (i, j) 成分は (1.22) から

$$X_{ij}^{a} = \langle \bar{a}_i | X | a_j \rangle \tag{1.43}$$

と表される．最後に双対基底 $\bar{a}^\star$ についての注意点を述べておく．i 番目の基底線形形式 $\langle \bar{a}_i|$ は i 番目の基底ベクトル $|a_i\rangle$ が与えられただけでは決まらないという点が重要である．つまり，$\langle \bar{a}_i|$ はすべての基底ベクトルに対して (1.37) を満たさなければならないため，$|a_i\rangle$ だけでなく残りすべての基底ベクトルが与えられてはじめて決まるのである．

第2章　完全性関係

2.1　完全性関係

基底ベクトルへの射影

はじめに, ベクトル $|\lambda\rangle \in \Lambda$ と線形形式 $\langle f| \in V^\star$ の**テンソル積** $|\lambda\rangle\langle f|$ を導入しよう. V の任意のベクトル $|u\rangle$ に対する $|\lambda\rangle\langle f|$ の左からの作用を

$$(|\lambda\rangle\langle f|)\,|u\rangle = |\lambda\rangle\,(\langle f|u\rangle) \tag{2.1}$$

によって定義する. $|\lambda\rangle\langle f|$ は, まず $|u\rangle$ に対し $\langle f| : |u\rangle \mapsto \langle f|u\rangle$ を行い, 続いて $|\lambda\rangle : \langle f|u\rangle \mapsto |\lambda\rangle\langle f|u\rangle$ を行うという 2 つの線形写像 $|\lambda\rangle$ と $\langle f|$ の積である. したがって, $|\lambda\rangle\langle f|$ は V から Λ への線形写像である. 特に $\Lambda = V$ のとき, これは V の線形変換となる. V の基底を $a = \{\!\{|a_1\rangle, \cdots, |a_n\rangle\}\!\}$ とするとき線形変換

$$|a_i\rangle\langle\bar{a}_i| \tag{2.2}$$

を基底ベクトル $|a_i\rangle$ への射影という. 以下にみるように, $|a_i\rangle\langle\bar{a}_i|$ は射影の定義 (1.17) を満たす. $|a_i\rangle\langle\bar{a}_i|$ を $|u\rangle$ に作用させると

$$|a_i\rangle\langle\bar{a}_i|u\rangle = |a_i\rangle u^a_i \tag{2.3}$$

となることから, $|a_i\rangle\langle\bar{a}_i|$ は $|u\rangle$ から i 番目の基底ベクトルの部分をとりだす操作であることがわかる. つまり, $|a_i\rangle\langle\bar{a}_i|$ は V から $|a_i\rangle$ を基底とする 1 次元部分ベクトル空間への射影である. 基底ベクトルへの射影は

$$|a_i\rangle\langle\bar{a}_i| \cdot |a_j\rangle\langle\bar{a}_j| = |a_i\rangle\langle\bar{a}_i|\delta_{ij} \tag{2.4}$$

を満たす. つまり, $i = j$ のとき (1.17) を満たし,

$$(|a_i\rangle\langle\bar{a}_i|)^2 = |a_i\rangle\langle\bar{a}_i| \tag{2.5}$$

が成り立つ．一方, $i \neq j$ のとき

$$|a_i\rangle\langle\bar{a}_i| \cdot |a_j\rangle\langle\bar{a}_j| = 0 \tag{2.6}$$

である．さらに, 2 つの射影の和

$$|a_i\rangle\langle\bar{a}_i| + |a_j\rangle\langle\bar{a}_j| \tag{2.7}$$

は, $i \neq j$ のとき, $|u\rangle$ から i 番目と j 番目の基底ベクトルの部分をとりだす操作である．つまり, $|a_i\rangle\langle\bar{a}_i| + |a_j\rangle\langle\bar{a}_j|$ は V から $|a_i\rangle$, $|a_j\rangle$ を基底とする 2 次元部分ベクトル空間への射影である．実際, (2.5) と同様に射影の定義 (1.17)

$$(|a_i\rangle\langle\bar{a}_i| + |a_j\rangle\langle\bar{a}_j|)^2 = |a_i\rangle\langle\bar{a}_i| + |a_j\rangle\langle\bar{a}_j| \tag{2.8}$$

を満たす．3 つ以上の異なる $|a_i\rangle\langle\bar{a}_i|$ の和についても同様であり, これらも射影となる．任意のベクトルから $i \in \spadesuit$ の基底ベクトルの部分をとりだす操作は

$$I_\spadesuit = \sum_{i\in\spadesuit} |a_i\rangle\langle\bar{a}_i| \tag{2.9}$$

で与えられ, これは射影の定義 (1.17)

$$I_\spadesuit^2 = I_\spadesuit \tag{2.10}$$

を満たす．つまり, $I_\spadesuit$ は V から $\{\!\{|a_i\rangle \mid i \in \spadesuit\}\!\}$ を基底とする部分ベクトル空間 $V_\spadesuit = I_\spadesuit(V)$ への射影である．最後に射影についての注意点を述べておく．基底ベクトルのうち $\{\!\{|a_i\rangle \mid i \in \spadesuit\}\!\}$ が与えられれば $V_\spadesuit$ は一意的に決まる．これに対し, $\{\!\{|a_i\rangle \mid i \in \spadesuit\}\!\}$ が与えられただけでは $I_\spadesuit$ は一意的には決まらないという点が重要である．(2.9) からわかるように, $I_\spadesuit$ を決めるには $\{\!\{\langle\bar{a}_i| \mid i \in \spadesuit\}\!\}$ が必要である．ところが 1.3 節の最後で述べたように, i 番目の基底線形形式 $\langle\bar{a}_i|$ を決めるには, i 番目の基底ベクトル $|a_i\rangle$ だけでなく残りすべての基底ベクトルが必要である．したがって, $\{\!\{\langle\bar{a}_i| \mid i \in \spadesuit\}\!\}$ は $\{\!\{|a_i\rangle \mid i \in \spadesuit\}\!\}$ だけでは決まらない．これが, $\{\!\{|a_i\rangle \mid i \in \spadesuit\}\!\}$ が与えられただけでは $I_\spadesuit$ は一意的には決まらないことの理由である．

完全性関係

ここで**完全性関係**とよばれる重要な関係式

$$I = |a_1\rangle\langle\bar{a}_1| + \cdots + |a_n\rangle\langle\bar{a}_n| = \sum_{i=1}^{n} |a_i\rangle\langle\bar{a}_i| \tag{2.11}$$

について述べる．(2.11) において I は V の恒等変換である．完全性関係の意味を以下に説明しよう．任意のベクトル $|u\rangle$ は基底 a によって

$$|u\rangle = |a_1\rangle u_1^a + \cdots + |a_n\rangle u_n^a \tag{2.12}$$

と展開される．$|u\rangle$ に (2.11) の右辺を作用させると

$$\begin{aligned}\left(\sum_{i=1}^{n}|a_i\rangle\langle\bar{a}_i|\right)|u\rangle &= |a_1\rangle\langle\bar{a}_1|u\rangle + \cdots + |a_n\rangle\langle\bar{a}_n|u\rangle \\ &= |a_1\rangle u_1^a + \cdots + |a_n\rangle u_n^a = |u\rangle\end{aligned} \tag{2.13}$$

と元に戻る．上式では，まずベクトル $|u\rangle$ を n 個すべての基底ベクトルへ射影し，次にそれら n 個すべての和をとっている．この操作が $|u\rangle$ に何もしない操作，つまり，恒等変換 I であるというのが完全性関係の意味である．完全性関係を用いると線形写像 X は

$$X = \sum_{i=1}^{m}\sum_{j=1}^{n}|\alpha_i\rangle\langle\bar{\alpha}_i|X|a_j\rangle\langle\bar{a}_j| = \sum_{i=1}^{m}\sum_{j=1}^{n}|\alpha_i\rangle X_{ij}^{\alpha a}\langle\bar{a}_j| \tag{2.14}$$

と表され，特に，線形変換は

$$X = \sum_{i=1}^{n}\sum_{j=1}^{n}|a_i\rangle\langle\bar{a}_i|X|a_j\rangle\langle\bar{a}_j| = \sum_{i=1}^{n}\sum_{j=1}^{n}|a_i\rangle X_{ij}^{a}\langle\bar{a}_j| \tag{2.15}$$

と表される．(2.14) から，もし 2 つの線形写像 X, Y が任意の線形形式 $\langle\phi|$ と任意のベクトル $|u\rangle$ に対して $\langle\phi|X|u\rangle = \langle\phi|Y|u\rangle$ であれば，もちろん $\langle\bar{\alpha}_i|X|a_j\rangle = \langle\bar{\alpha}_i|Y|a_j\rangle$ も成り立つので，$X = Y$ であることがわかる．つまり，任意の $\langle\phi|$ と任意の $|u\rangle$ に対して $\langle\phi|X|u\rangle = \langle\phi|Y|u\rangle$ であることと $X = Y$ であることは完全に同等である．次に，完全性関係の応用例として，線形変換のトレース $\mathrm{tr}X$ は X に固有の量であり基底の選び方によらないことを示そう．V の 2 つの基底 a, b を考える．完全性関係から，

$$\begin{aligned}\mathrm{tr}X &= \sum_{i=1}^{n}X_{ii}^{a} = \sum_{i=1}^{n}\langle\bar{a}_i|X|a_i\rangle = \sum_{i=1}^{n}\sum_{j=1}^{n}\langle\bar{a}_i|X|b_j\rangle\langle\bar{b}_j|a_i\rangle \\ &= \sum_{i=1}^{n}\sum_{j=1}^{n}\langle\bar{b}_j|a_i\rangle\langle\bar{a}_i|X|b_j\rangle = \sum_{i=1}^{n}\langle\bar{b}_i|X|b_i\rangle = \sum_{i=1}^{n}X_{ii}^{b}\end{aligned} \tag{2.16}$$

である．したがって，$\mathrm{tr}X$ は X に固有の量であり基底の選び方によらない．さらに，

$$\mathrm{tr}XYZ = \mathrm{tr}YZX = \mathrm{tr}ZXY \tag{2.17}$$

のように, 複数の線形変換の積のトレースは線形変換の巡回置換について不変であることも容易に示せる. なお, ベクトル $|u\rangle$ の展開

$$|u\rangle = |a_1\rangle u_1^a + \cdots + |a_n\rangle u_n^a \tag{2.18}$$

と線形形式 $\langle f|$ の展開

$$\langle f| = \bar{f}_1^a\langle\bar{a}_1| + \cdots + \bar{f}_n^a\langle\bar{a}_n| \tag{2.19}$$

は完全性関係によってそれぞれ

$$\begin{aligned} |u\rangle &= \sum_{i=1}^{n}|a_i\rangle\langle\bar{a}_i|u\rangle = \sum_{i=1}^{n}|a_i\rangle u_i^a \\ \langle f| &= \sum_{i=1}^{n}\langle f|a_i\rangle\langle\bar{a}_i| = \sum_{i=1}^{n}\bar{f}_i^a\langle\bar{a}_i| \end{aligned} \tag{2.20}$$

と自動的に得られる.

2.2　直和分解

直和分解

V の n 個の基底ベクトル $|a_i\rangle$ を $i \in \spadesuit$ の組と $i \in \heartsuit$ の組の 2 組に分ける. この組分けにより完全性関係を

$$I = \sum_{i=1}^{n}|a_i\rangle\langle\bar{a}_i| = I_\spadesuit + I_\heartsuit \tag{2.21}$$

と分解しよう. ここで,

$$\begin{aligned} I_\spadesuit &= \sum_{i\in\spadesuit}|a_i\rangle\langle\bar{a}_i| \\ I_\heartsuit &= \sum_{i\in\heartsuit}|a_i\rangle\langle\bar{a}_i| \end{aligned} \tag{2.22}$$

である. $I_\spadesuit$, $I_\heartsuit$ はそれぞれ $i \in \spadesuit$, $i \in \heartsuit$ の基底ベクトルの部分をとりだす射影である. $I_\spadesuit$, $I_\heartsuit$ は

$$\begin{aligned} I_\spadesuit^2 &= I_\spadesuit \\ I_\heartsuit^2 &= I_\heartsuit \\ I_\spadesuit I_\heartsuit &= 0 \end{aligned} \tag{2.23}$$

を満たす．V の任意のベクトル $|u\rangle$ を $I_\spadesuit$, $I_\heartsuit$ によって射影して得られるベクトル

$$\begin{aligned}|u_\spadesuit\rangle &= I_\spadesuit|u\rangle \\ |u_\heartsuit\rangle &= I_\heartsuit|u\rangle\end{aligned} \tag{2.24}$$

のそれぞれの全体は V の部分ベクトル空間 $V_\spadesuit = I_\spadesuit(V)$, $V_\heartsuit = I_\heartsuit(V)$ となる．このとき, ベクトル空間 V は部分ベクトル空間 $V_\spadesuit$ と $V_\heartsuit$ に**直和分解**されるといい,

$$V = V_\spadesuit \dot{+} V_\heartsuit \tag{2.25}$$

と表す．また, $V_\heartsuit$ は $V_\spadesuit$ の**余空間**であるという．このとき逆に, $V_\spadesuit$ は $V_\heartsuit$ の余空間である．次元について

$$\begin{aligned}\mathrm{dim}V\ &= \mathrm{dim}V_\spadesuit + \mathrm{dim}V_\heartsuit \\ \mathrm{dim}V_\spadesuit &= \mathrm{rank}I_\spadesuit \\ \mathrm{dim}V_\heartsuit &= \mathrm{rank}I_\heartsuit\end{aligned} \tag{2.26}$$

が成り立つ．また, **直和条件**

$$V_\spadesuit \cap V_\heartsuit = \{\mathbf{0}\} \tag{2.27}$$

が成り立つため, V の任意のベクトル $|u\rangle$ は

$$|u\rangle = |u_\spadesuit\rangle + |u_\heartsuit\rangle \tag{2.28}$$

と一意的に分解される．ここで余空間についての注意点を述べておく．$V_\spadesuit$ が与えられただけではその余空間 $V_\heartsuit$ は一意的には決まらないという点が重要である．2.1 節で述べたように, $\{\!\!\{|a_i\rangle \mid i \in \spadesuit\}\!\!\}$ つまり $V_\spadesuit$ が与えられただけでは $I_\spadesuit$ は一意的には決まらない．したがって, $V_\spadesuit$ が与えられただけでは $I_\heartsuit = I - I_\spadesuit$ も一意的には決まらない．これが $V_\spadesuit$ が与えられただけではその余空間 $V_\heartsuit$ は一意的には決まらないことの理由である．さて, V を 3 つ以上の部分ベクトル空間に直和分解することを考えよう．$s \leq n$ として, V の n 個の基底ベクトル $|a_i\rangle$ を $i \in (1)$ の組,$\cdots$, $i \in (s)$ の組の s 個の組に分ける．この組分けにより完全性関係を

$$I = I_{(1)} + \cdots + I_{(s)} \tag{2.29}$$

と分解する．$I_{(p)}(p=1,\cdots,s)$ は $i\in(p)$ の基底ベクトルの部分をとりだす操作である．これらは射影であり，

$$I_{(p)}I_{(q)}=I_{(p)}\delta_{pq} \tag{2.30}$$

を満たす．V の任意のベクトル $|u\rangle$ を $I_{(p)}$ によって射影して得られるベクトル

$$|u_{(p)}\rangle=I_{(p)}|u\rangle \tag{2.31}$$

の全体は V の部分ベクトル空間 $V_{(p)}=I_{(p)}(V)$ となる．このとき，

$$V=V_{(1)}\dot{+}\cdots\dot{+}V_{(s)} \tag{2.32}$$

である．次元について

$$\begin{aligned}\mathrm{dim}V\quad &=\mathrm{dim}V_{(1)}+\cdots+\mathrm{dim}V_{(s)}\\ \mathrm{dim}V_{(p)}&=\mathrm{rank}I_{(p)}\end{aligned} \tag{2.33}$$

が成り立つ．また，任意の p について

$$(V_{(1)}+\cdots+V_{(p-1)}+V_{(p+1)}+\cdots+V_{(s)})\cap V_{(p)}=\{\mathbf{0}\} \tag{2.34}$$

が成り立つため，V の任意のベクトル $|u\rangle$ は

$$|u\rangle=|u_{(1)}\rangle+\cdots+|u_{(s)}\rangle \tag{2.35}$$

と一意的に分解される．

直和分解の必要十分条件

V がその部分ベクトル空間の和として表されているとき，これが直和分解であるための必要十分条件を基底を用いずに述べておく．ベクトル空間 $V_{(1)},\cdots,V_{(s)}$ の**和空間**とは，すべての $V_{(p)}$ のすべてのベクトルの和の全体のことである．このとき和空間はベクトル空間となる．$V_{(p)}$ のそれぞれは和空間の部分ベクトル空間である．この和空間が V であるとき

$$V=V_{(1)}+\cdots+V_{(s)} \tag{2.36}$$

と表す．これが直和分解

$$V=V_{(1)}\dot{+}\cdots\dot{+}V_{(s)} \tag{2.37}$$

であるための必要十分条件は, V から $V_{(p)}$ への線形写像 $I_{(p)}$ が存在し, これらが

$$I = I_{(1)} + \cdots + I_{(s)} \tag{2.38}$$

かつ

$$I_{(p)}I_{(q)} = I_{(p)}\delta_{pq} \tag{2.39}$$

を満たすことである. このとき $I_{(p)}$ は V から $V_{(p)}$ への射影となる.

2.3 基底変換

基底変換とその行列表示

V の基底を a から b に変換する線形変換 P を

$$P|a_i\rangle = |b_i\rangle \tag{2.40}$$

によって定義する. 線形変換 P を a から b への**基底変換**という. (2.40) の両辺に右から $\langle\bar{a}_i|$ を掛けて i について和をとると

$$P\left(|a_1\rangle\langle\bar{a}_1| + \cdots + |a_n\rangle\langle\bar{a}_n|\right) = |b_1\rangle\langle\bar{a}_1| + \cdots + |b_n\rangle\langle\bar{a}_n| \tag{2.41}$$

となる. ここで上式の左辺において完全性関係を考慮すると

$$P = |b_1\rangle\langle\bar{a}_1| + \cdots + |b_n\rangle\langle\bar{a}_n| \tag{2.42}$$

であることがわかる. したがって,

$$\langle\bar{b}_i|P = \langle\bar{a}_i| \tag{2.43}$$

が成り立つ. また,

$$\left(\sum_{i=1}^{n} |a_i\rangle\langle\bar{b}_i|\right) P = P\left(\sum_{i=1}^{n} |a_i\rangle\langle\bar{b}_i|\right) = I \tag{2.44}$$

であるので,

$$P^{-1} = |a_1\rangle\langle\bar{b}_1| + \cdots + |a_n\rangle\langle\bar{b}_n| \tag{2.45}$$

であることがわかる．(2.40) に対応して

$$P^{-1}|b_i\rangle = |a_i\rangle \tag{2.46}$$

であり，また，(2.43) に対応して

$$\langle \bar{a}_i|P^{-1} = \langle \bar{b}_i| \tag{2.47}$$

である．最後に P の行列表示について調べよう．P の基底 a による行列表示の (i, j) 成分は

$$P^a_{ij} = \langle \bar{a}_i|P|a_j\rangle = \langle \bar{a}_i|b_j\rangle \tag{2.48}$$

である．まとめて書けば，

$$P \stackrel{a}{=} \begin{bmatrix} \langle \bar{a}_1|b_1\rangle & \cdots & \langle \bar{a}_1|b_n\rangle \\ \vdots & & \vdots \\ \langle \bar{a}_n|b_1\rangle & \cdots & \langle \bar{a}_n|b_n\rangle \end{bmatrix} \tag{2.49}$$

つまり，

$$P \stackrel{a}{=} \begin{bmatrix} |b_1\rangle & & |b_n\rangle \\ \text{の} & & \text{の} \\ a & \cdots & a \\ \text{表} & & \text{表} \\ \text{示} & & \text{示} \end{bmatrix} \tag{2.50}$$

である．これは，P の基底 a による行列表示が $|b_1\rangle, \cdots, |b_n\rangle$ の基底 a による列ベクトル表示を左から順に並べたものであることを意味する．一方，P^{-1} の基底 a による行列表示の (i, j) 成分は

$$P^{-1a}_{ij} = \langle \bar{b}_i|P|b_j\rangle = \langle \bar{b}_i|a_j\rangle \tag{2.51}$$

である．まとめて書けば，

$$P^{-1} \stackrel{a}{=} \begin{bmatrix} \langle \bar{b}_1|a_1\rangle & \cdots & \langle \bar{b}_1|a_n\rangle \\ \vdots & & \vdots \\ \langle \bar{b}_n|a_1\rangle & \cdots & \langle \bar{b}_n|a_n\rangle \end{bmatrix} \tag{2.52}$$

つまり,

$$P^{-1} \overset{a}{=} \begin{bmatrix} \langle \bar{b}_1| \text{ の } a \text{ 表示} \\ \vdots \\ \langle \bar{b}_n| \text{ の } a \text{ 表示} \end{bmatrix} \tag{2.53}$$

である．これは, P^{-1} の基底 a による行列表示が $\langle \bar{b}_1|, \cdots, \langle \bar{b}_n|$ の基底 a による行ベクトル表示を上から順に並べたものであることを意味する．なお, P の基底 b による行列表示の (i, j) 成分は,

$$P^b_{ij} = \langle \bar{b}_i|P|b_j\rangle = \langle \bar{a}_i|b_j\rangle \tag{2.54}$$

であるから, P の基底 a による行列表示と基底 b による行列表示とは一致する．同様に, P^{-1} の基底 a による行列表示と基底 b による行列表示も一致する．

行列表示の変換則

基底を換えることによって線形写像の行列表示は変更をうける．つまり,

$$X = \sum_{i=1}^{m}\sum_{j=1}^{n} |\alpha_i\rangle X^{\alpha a}_{ij}\langle \bar{a}_j| = \sum_{i=1}^{m}\sum_{j=1}^{n} |\beta_i\rangle X^{\beta b}_{ij}\langle \bar{b}_j| \tag{2.55}$$

と展開したときの $X^{\alpha a}_{ij}$ と $X^{\beta b}_{ij}$ は一般に異なる．ただし, ここで X を V から Λ への線形写像とし, V の基底を $P|a_i\rangle = |b_i\rangle$ により a から b へ, また, Λ の基底を $Q|\alpha_i\rangle = |\beta_i\rangle$ により α から β へ変換する場合を考えた．したがって, $X^{\alpha a}_{ij}$ と $X^{\beta b}_{ij}$ の間の変換則を調べる必要がある．そのために

$$\begin{aligned} \langle \bar{\beta}_i|X|b_j\rangle &= \langle \bar{\alpha}_i|Q^{-1}XP|a_j\rangle \\ &= \sum_{k=1}^{m}\sum_{l=1}^{n}\langle \bar{\alpha}_i|Q^{-1}|\alpha_k\rangle\langle \bar{\alpha}_k|X|a_l\rangle\langle \bar{a}_l|P|a_j\rangle \end{aligned} \tag{2.56}$$

であることに注意すると, 求める変換則は

$$X^{\beta b}_{ij} = \left(Q^{-1}XP\right)^{\alpha a}_{ij} = \sum_{k=1}^{m}\sum_{l=1}^{n} Q^{-1\alpha}_{ik} X^{\alpha a}_{kl} P^a_{lj} \tag{2.57}$$

と与えられる．あるいは行列算として

$$\big[\,X\,\big]^{\beta b}_{m\times n} = \big[Q^{-1}\big]^{\alpha}_{m\times m}\,\big[\,X\,\big]^{\alpha a}_{m\times n}\,\big[\,P\,\big]^{a}_{n\times n} \tag{2.58}$$

である．特に, X が線形変換のときは $\Lambda = V$ であるから $\alpha = a$, $\beta = b$ と選ぶならば,

$$X^b_{ij} = \big(P^{-1}XP\big)^a_{ij} = \sum_{k=1}^{n}\sum_{l=1}^{n} P^{-1a}_{ik} X^a_{kl} P^a_{lj} \tag{2.59}$$

である．あるいは行列算として

$$\big[\,X\,\big]^{b}_{n\times n} = \big[P^{-1}\big]^{a}_{n\times n}\,\big[\,X\,\big]^{a}_{n\times n}\,\big[\,P\,\big]^{a}_{n\times n} \tag{2.60}$$

である．

列ベクトル表示の変換則

基底を換えることによってベクトルの列ベクトル表示は変更をうける．つまり, ベクトル $|u\rangle$ を基底 a, b で

$$|u\rangle = \sum_{i=1}^{n} |a_i\rangle u^a_i = \sum_{i=1}^{n} |b_i\rangle u^b_i \tag{2.61}$$

と展開したときの u^a_i と u^b_i は一般に異なる．したがって, u^a_i と u^b_i の間の変換則を調べる必要がある．そのために

$$\langle \bar{b}_i|u\rangle = \langle \bar{a}_i|P^{-1}|u\rangle = \sum_{j=1}^{n} \langle \bar{a}_i|P^{-1}|a_j\rangle\langle \bar{a}_j|u\rangle \tag{2.62}$$

であることに注意すると, 求める変換則は

$$u^b_i = \sum_{j=1}^{n} P^{-1a}_{ij} u^a_j \tag{2.63}$$

と与えられる．あるいは行列算として

$$\Big[u\Big]^{b}_{n\times 1} = \big[P^{-1}\big]^{a}_{n\times n}\Big[u\Big]^{a}_{n\times 1} \tag{2.64}$$

である． この結果は, $|u\rangle$ を $\boldsymbol{C}$ から V への線形写像であるとみなして, (2.57) を用いて得られるものと一致する． 同様に, 線形形式 $\langle f|$ については,

$$\langle f| = \sum_{i=1}^{n} \bar{f}^a_i \langle \bar{a}_i| = \sum_{i=1}^{n} \bar{f}^b_i \langle \bar{b}_i| \tag{2.65}$$

における $\bar{f}_i^a$ と $\bar{f}_i^b$ の間の変換則を調べる必要がある．そのために

$$\langle f|b_j\rangle = \langle f|P|a_j\rangle = \sum_{i=1}^{n}\langle f|a_i\rangle\langle\bar{a}_i|P|a_j\rangle \tag{2.66}$$

であることに注意すると, 求める変換則は

$$\bar{f}_j^b = \sum_{i=1}^{n}\bar{f}_i^a P_{ij}^a \tag{2.67}$$

と与えられる．あるいは行列算として

$$\Big[f\Big]_{1\times n}^{b} = \Big[f\Big]_{1\times n}^{a}\left[\,P\,\right]_{n\times n}^{a} \tag{2.68}$$

である．この結果は, $\langle f|$ が V から $\boldsymbol{C}$ への線形写像であるとして, (2.57) を用いて得られるものと一致する．

第3章　内積

3.1　内積

内積

ベクトル空間 V に**内積**が与えられているとは, V の任意の 2 つのベクトル $|u\rangle$, $|v\rangle$ に対して 1 つの複素数

$$(|u\rangle, |v\rangle) \in \boldsymbol{C} \tag{3.1}$$

を関連づける規則が与えられていることをいう. ただし, この規則は

$$\begin{aligned}
(|u\rangle, |v\rangle + |w\rangle) &= (|u\rangle, |v\rangle) + (|u\rangle, |w\rangle) \\
(|u\rangle, |v\rangle c) &= (|u\rangle, |v\rangle) c \\
(|u\rangle, |v\rangle) &= (|v\rangle, |u\rangle)^* \\
(|u\rangle, |u\rangle) &\geq 0 \ (\text{等号は } |u\rangle = \mathbf{0} \text{ のときに限る})
\end{aligned} \tag{3.2}$$

を満たさなければならない. (3.2) より,

$$\begin{aligned}
(|v\rangle + |w\rangle, |u\rangle) &= (|v\rangle, |u\rangle) + (|w\rangle, |u\rangle) \\
(|v\rangle c, |u\rangle) &= c^* \ (|v\rangle, |u\rangle)
\end{aligned} \tag{3.3}$$

が導かれる. 内積が与えられたベクトル空間を**計量ベクトル空間**という. 計量ベクトル空間では

$$\| \, |u\rangle \, \| = \sqrt{(|u\rangle, |u\rangle)} \tag{3.4}$$

をベクトル $|u\rangle$ の**長さ**という. 長さが 1 のベクトルは**正規化**されているという. また, 2 つのベクトル $|u\rangle$, $|v\rangle$ の内積 $(|u\rangle, |v\rangle)$ が 0 のとき $|u\rangle$ と $|v\rangle$ は互いに**直交**するという. なお, 実計量ベクトル空間を**ユークリッドベクトル空間**とよぶ.

共役線形形式

ベクトル $|u\rangle$ の**共役線形形式** $\langle u|$ を

$$(|u\rangle, |v\rangle) = \langle u|v\rangle \tag{3.5}$$

が任意の $|v\rangle$ に対して成り立つような線形形式として定義する．つまり，共役線形形式 $\langle u|$ は内積 $(|u\rangle, |v\rangle)$ がスカラー積 $\langle u|v\rangle$ に一致するように決められた線形形式である．基底 a を用いれば $\langle u|$ は具体的に

$$\langle u| = (|u\rangle, |a_1\rangle)\langle \bar{a}_1| + \cdots + (|u\rangle, |a_n\rangle)\langle \bar{a}_n| \tag{3.6}$$

と与えられる．また，ベクトル $|u\rangle$ を線形形式 $\langle u|$ の**共役ベクトル**という．以降，内積 $(|u\rangle, |v\rangle)$ を $\langle u|v\rangle$ によって表すことにする．この記法によると $|u\rangle$ の長さ $\| \, |u\rangle \, \|$ は

$$\| \, |u\rangle \, \| = \sqrt{\langle u|u\rangle} \tag{3.7}$$

と表される．V の基底 a によって $|u\rangle$ を

$$|u\rangle = \sum_{i=1}^{n} |a_i\rangle u_i^a \tag{3.8}$$

と展開するとき，内積の性質 (3.2) から

$$\langle u|v\rangle = \sum_{i=1}^{n} u_i^{a*} \langle a_i|v\rangle \tag{3.9}$$

が成り立つ．ここで $\langle a_i|$ は $|a_i\rangle$ の共役線形形式である．これが任意のベクトル $|v\rangle$ に対して成り立つことから，

$$\langle u| = \sum_{i=1}^{n} u_i^{a*} \langle a_i| \tag{3.10}$$

である．また，$u_i^a = \langle \bar{a}_i|u\rangle$ に注意すると (3.9) は

$$\langle u|v\rangle = \sum_{i=1}^{n} \langle \bar{a}_i|u\rangle^* \langle a_i|v\rangle = \sum_{i=1}^{n} \langle u|\bar{a}_i\rangle \langle a_i|v\rangle \tag{3.11}$$

となる．これが任意の $\langle u|$, $|v\rangle$ に対して成り立つことから，計量ベクトル空間では完全性関係が

$$I = |\bar{a}_1\rangle\langle a_1| + \cdots + |\bar{a}_n\rangle\langle a_n| = \sum_{i=1}^{n} |\bar{a}_i\rangle\langle a_i| \tag{3.12}$$

とも表せることがわかる．ここで，$|\bar{a}_i\rangle$ は基底線形形式 $\langle \bar{a}_i|$ の共役ベクトルである．このことは，$\bar{a} = \{\!\!\{ |\bar{a}_1\rangle, \cdots, |\bar{a}_n\rangle \}\!\!\}$ が V の 1 つの基底であり，ま

た, $\bar{a}$ の双対基底が $a^\star = \{\!\{\langle a_1|, \cdots, \langle a_n|\}\!\}$ であることからも容易にわかる. この $\bar{a}$ を基底 a の**相反基底**という. さらに, (3.9) を $|v\rangle$ についても

$$\langle u|v\rangle = \sum_{i=1}^{n}\sum_{j=1}^{n} u_i^{a*}\langle a_i|a_j\rangle v_j^a \tag{3.13}$$

と展開するとわかるように, 任意のベクトルの間の内積は基底ベクトルの間の内積 $\langle a_i|a_j\rangle$ が与えられると決まる. ところで $\langle u|$ を双対基底 $\bar{a}^\star$ で展開すると

$$\langle u| = \sum_{j=1}^{n} \bar{u}_j^a \langle \bar{a}_j| \tag{3.14}$$

であるから, この式と (3.10) の右から $|a_j\rangle$ を掛けることにより

$$\bar{u}_j^a = \sum_{i=1}^{n} u_i^{a*}\langle a_i|a_j\rangle \tag{3.15}$$

であることがわかる. 最後に, 複素数の全体 $\boldsymbol{C}$ を計量ベクトル空間とみた場合について述べる. 2 つの複素数 c, d の間に内積 c^*d を与えると $\boldsymbol{C}$ は計量ベクトル空間となる. このとき c の共役線形形式は c の複素共役 c^* である. また, c の長さ $\|c\|$ は c の絶対値 $|c|$ であることがわかる. このように, あるベクトル $|u\rangle$ からその共役線形形式 $\langle u|$ を得る操作はある複素数 c からその複素共役 c^* を得る操作を一般化したものといえる. 3.2 節では, さらにこの一般化を線形写像にまで広げることによりエルミート共役の概念を導入する.

基底の共役線形形式と双対基底の共役ベクトル

基底ベクトル $|a_i\rangle$ の共役線形形式 $\langle a_i|$ は

$$\langle a_i| = \sum_{j=1}^{n}\langle a_i|a_j\rangle\langle \bar{a}_j| \tag{3.16}$$

である. 一方, 基底線形形式 $\langle \bar{a}_i|$ の共役ベクトル $|\bar{a}_i\rangle$ は

$$|\bar{a}_i\rangle = \sum_{j=1}^{n} |a_j\rangle\langle \bar{a}_j|\bar{a}_i\rangle \tag{3.17}$$

である．ただし, (3.17) の展開を行うためには $\langle \bar{a}_i | \bar{a}_j \rangle$ が必要である．$\langle \bar{a}_i | \bar{a}_j \rangle$ を求めるにはこれが

$$\sum_{k=1}^{n} \langle \bar{a}_i | \bar{a}_k \rangle \langle a_k | a_j \rangle = \langle \bar{a}_i | a_j \rangle = \delta_{ij} \tag{3.18}$$

を満たすことに注意する．(3.18) が $\langle a_i | a_j \rangle$ が与えられたときに $\langle \bar{a}_i | \bar{a}_j \rangle$ を決める式である．つまり, $\langle a_i | a_j \rangle$ を行列とみた場合に, $\langle \bar{a}_i | \bar{a}_j \rangle$ は $\langle a_i | a_j \rangle$ の逆行列である．したがって,

$$\sum_{k=1}^{n} \langle a_i | a_k \rangle \langle \bar{a}_k | \bar{a}_j \rangle = \langle a_i | \bar{a}_j \rangle = \delta_{ij} \tag{3.19}$$

も成り立つ．これを考慮して, (3.10), (3.14) の右から $|\bar{a}_i\rangle$ を掛けることにより

$$u_i^{a*} = \sum_{j=1}^{n} \bar{u}_j^{a} \langle \bar{a}_j | \bar{a}_i \rangle \tag{3.20}$$

が得られる．

3.2　エルミート共役

線形写像のエルミート共役

線形写像 $X : V \to \Lambda$ が与えられたとき, X の**エルミート共役** $X^\dagger : \Lambda \to V$ を

$$\langle u | X^\dagger | \lambda \rangle = (\langle \lambda | X | u \rangle)^* \tag{3.21}$$

によって定義する．ここで $|u\rangle \in V$, $|\lambda\rangle \in \Lambda$ は任意のベクトルである．エルミート共役は

$$\begin{aligned} \left(X^\dagger\right)^\dagger &= X \\ (X+Y)^\dagger &= X^\dagger + Y^\dagger \\ (cX)^\dagger &= c^* X^\dagger \end{aligned} \tag{3.22}$$

などの性質をもつ．次に, 2 つの線形写像 $Y : \Omega \to V$, $X : V \to \Lambda$ の積 $XY : \Omega \to \Lambda$ のエルミート共役 $(XY)^\dagger : \Lambda \to \Omega$ について考えよう．

$(XY)^\dagger$ は任意のベクトル $|\omega\rangle \in \Omega$, $|\lambda\rangle \in \Lambda$ に対して

$$\begin{aligned}\langle\omega|\,(XY)^\dagger\,|\lambda\rangle = (\langle\lambda|XY|\omega\rangle)^* &= \left(\sum_{i=1}^{n}\langle\lambda|X|a_i\rangle\langle\bar{a}_i|Y|\omega\rangle\right)^* \\ &= \sum_{i=1}^{n}\langle\omega|Y^\dagger|\bar{a}_i\rangle\langle a_i|X^\dagger|\lambda\rangle = \langle\omega|Y^\dagger X^\dagger|\lambda\rangle\end{aligned} \tag{3.23}$$

を満たす．したがって，

$$(XY)^\dagger = Y^\dagger X^\dagger \tag{3.24}$$

である．最後に $X^\dagger$ の行列表示について調べよう．完全性関係を $X^\dagger$ の両側に用いることにより，

$$X^\dagger = \sum_{i=1}^{n}\sum_{j=1}^{m}|a_i\rangle\langle\bar{a}_i|X^\dagger|\alpha_j\rangle\langle\bar{\alpha}_j| = \sum_{i=1}^{n}\sum_{j=1}^{m}|a_i\rangle\,(\langle\alpha_j|X|\bar{a}_i\rangle)^*\,\langle\bar{\alpha}_j| \tag{3.25}$$

であることがわかる．特に，線形変換 X のエルミート共役 $X^\dagger$ は

$$X^\dagger = \sum_{i=1}^{n}\sum_{j=1}^{n}|a_i\rangle\langle\bar{a}_i|X^\dagger|a_j\rangle\langle\bar{a}_j| = \sum_{i=1}^{n}\sum_{j=1}^{n}|a_i\rangle\,(\langle a_j|X|\bar{a}_i\rangle)^*\,\langle\bar{a}_j| \tag{3.26}$$

となる．また，線形変換 $X^\dagger$ のトレースについて

$$\begin{aligned}\mathrm{tr}\left(X^\dagger\right) &= \sum_{i=1}^{n}(\langle a_i|X|\bar{a}_i\rangle)^* = \sum_{i=1}^{n}\sum_{j=1}^{n}(\langle a_i|X|a_j\rangle\langle\bar{a}_j|\bar{a}_i\rangle)^* \\ &= \sum_{i=1}^{n}\sum_{j=1}^{n}(\langle\bar{a}_j|\bar{a}_i\rangle\langle a_i|X|a_j\rangle)^* = \sum_{j=1}^{n}(\langle\bar{a}_j|X|a_j\rangle)^* \\ &= (\mathrm{tr}X)^*\end{aligned} \tag{3.27}$$

が成り立つ．

ベクトルのエルミート共役

ベクトル $|u\rangle$ を $\boldsymbol{C}$ から V への線形写像とみなすとき，そのエルミート共役 は V から $\boldsymbol{C}$ への線形写像，つまり，線形形式となる．(3.25) をこの場合に適用すると

$$(|u\rangle)^\dagger = \sum_{j=1}^{n}(\langle a_j|u\rangle)^*\,\langle\bar{a}_j| = \sum_{j=1}^{n}\langle u|a_j\rangle\langle\bar{a}_j| = \langle u| \tag{3.28}$$

を得る．つまり, 線形写像としてのベクトル $|u\rangle$ のエルミート共役はその共役線形形式 $\langle u|$ である．したがって, (3.24) から

$$(X|u\rangle)^\dagger = (|u\rangle)^\dagger X^\dagger = \langle u|X^\dagger \tag{3.29}$$

が成り立つ.

線形形式のエルミート共役

線形形式 $\langle f|$ は V から $\boldsymbol{C}$ への線形写像であるので, そのエルミート共役は $\boldsymbol{C}$ から V への線形写像, つまり, ベクトルとなる．(3.25) をこの場合に適用すると

$$(\langle f|)^\dagger = \sum_{j=1}^{n} |a_i\rangle\,(\langle f|\bar{a}_i\rangle)^* = \sum_{j=1}^{n} |a_i\rangle\langle\bar{a}_i|f\rangle = |f\rangle \tag{3.30}$$

となる．つまり, 線形形式 $\langle f|$ のエルミート共役はその共役ベクトル $|f\rangle$ である．したがって, (3.24) から

$$(\langle f|X)^\dagger = X^\dagger\,(\langle f|)^\dagger = X^\dagger|f\rangle \tag{3.31}$$

が成り立つ.

正規変換

V の線形変換 X が

$$X^\dagger X = XX^\dagger \tag{3.32}$$

を満たすとき X を**正規変換**という．X が正規変換であるための必要十分条件は, X を

$$\begin{aligned} X &= H_{\mathrm{R}} + iH_{\mathrm{I}} \\ H_{\mathrm{R}} &= \frac{X + X^\dagger}{2} \\ H_{\mathrm{I}} &= \frac{X - X^\dagger}{2i} \end{aligned} \tag{3.33}$$

と表すとき,

$$H_{\mathrm{R}}H_{\mathrm{I}} = H_{\mathrm{I}}H_{\mathrm{R}} \tag{3.34}$$

が成り立つことである.

エルミート変換

V の線形変換 H が

$$H^\dagger = H \tag{3.35}$$

を満たすとき H を**エルミート変換**という．エルミート変換は正規変換である．複素数の場合に $c^* = c$ を満たすものが実数であったことを思い出そう．すると, $H^\dagger = H$ を満たす線形変換, つまり, エルミート変換は実数を一般化したものであると考えられる．実際, 任意のベクトル $|u\rangle$ に対して

$$\langle u|H|u\rangle^* = \langle u|H^\dagger|u\rangle = \langle u|H|u\rangle \tag{3.36}$$

であることもエルミート変換が実数の一般化であることを示唆している．ユークリッドベクトル空間の場合, エルミート変換を**対称変換**とよぶ.

ユニタリ変換

V の線形変換 U が

$$U^\dagger = U^{-1} \tag{3.37}$$

を満たすとき U を**ユニタリ変換**という．ユニタリ変換は正規変換である．複素数の場合に $c^* = c^{-1}$, つまり, $c^*c = cc^* = |c|^2 = 1$ を満たすものは絶対値が 1 の複素数であったことを思い出そう．すると, ユニタリ変換は (3.37), つまり,

$$U^\dagger U = UU^\dagger = I \tag{3.38}$$

を満たす線形変換であるから, これは絶対値が 1 の複素数を一般化したものであると考えられる．任意の二つのベクトル $|u\rangle$, $|v\rangle$ に対してユニタリ変換 U を行った結果 $U|u\rangle$, $U|v\rangle$ の間の内積は

$$\langle u|U^\dagger U|v\rangle = \langle u|v\rangle \tag{3.39}$$

を満たす．つまり, ユニタリ変換はベクトルの間の内積を不変に保つことがわかる．これはユニタリ変換の最も重要な特徴の 1 つである．ユークリッドベクトル空間の場合, ユニタリ変換は回転操作や鏡映操作などの**対称操作**を表す線形変換に対応する．このとき, ユニタリ変換を**直交変換**とよぶ.

3.3　正規直交基底

正規直交基底

ここで計量ベクトル空間の基底の中でも最も重要である**正規直交基底**について述べる．基底ベクトルの間の内積 $\langle a_i|a_j\rangle$ が

$$\langle a_i|a_j\rangle = \delta_{ij} \tag{3.40}$$

で与えられるとき, 基底 a は正規直交基底であるという．このとき, すべての基底ベクトルの長さは 1 に正規化されており, また, それぞれの基底ベクトルは互いに直交している．正規直交基底 a を基底として選んだときは, $\langle a_i|$ の右側に完全性関係を用いると

$$\langle a_i| = \langle \bar{a}_i| \tag{3.41}$$

であることがわかる．さらに, 上式のエルミート共役から

$$|\bar{a}_i\rangle = |a_i\rangle \tag{3.42}$$

も成り立つ．したがって, 正規直交基底の場合の完全性関係は

$$I = |a_1\rangle\langle a_1| + \cdots + |a_n\rangle\langle a_n| = \sum_{i=1}^{n} |a_i\rangle\langle a_i| \tag{3.43}$$

である．また, ベクトル $|u\rangle$ と $|v\rangle$ の内積 (3.9) は

$$\langle u|v\rangle = u_1^{a*}v_1^a + \cdots + u_n^{a*}v_n^a = \sum_{i=1}^{n} u_i^{a*}v_i^a \tag{3.44}$$

となる．線形写像 X は基底 a, α がともに正規直交基底である場合

$$X = \sum_{i=1}^{m}\sum_{j=1}^{n} |\alpha_i\rangle\langle\alpha_i|X|a_j\rangle\langle a_j| = \sum_{i=1}^{m}\sum_{j=1}^{n} |\alpha_i\rangle X_{ij}^{\alpha a}\langle a_j| \tag{3.45}$$

と表され, そのエルミート共役 $X^\dagger$ は

$$\begin{aligned} X^\dagger &= \sum_{i=1}^{n}\sum_{j=1}^{m} |a_i\rangle\langle a_i|X^\dagger|\alpha_j\rangle\langle\alpha_j| = \sum_{i=1}^{n}\sum_{j=1}^{m} |a_i\rangle \left(\langle\alpha_j|X|a_i\rangle\right)^* \langle\alpha_j| \\ &= \sum_{i=1}^{n}\sum_{j=1}^{m} |a_i\rangle \left(X_{ji}^{\alpha a}\right)^* \langle\alpha_j| \end{aligned} \tag{3.46}$$

と与えられる．特に, 線形変換は

$$X = \sum_{i=1}^{n}\sum_{j=1}^{n} |a_i\rangle\langle a_i|X|a_j\rangle\langle a_j| = \sum_{i=1}^{n}\sum_{j=1}^{n} |a_i\rangle X^a_{ij}\langle a_j| \tag{3.47}$$

と表され, そのエルミート共役 $X^\dagger$ は

$$\begin{aligned} X^\dagger &= \sum_{i=1}^{n}\sum_{j=1}^{n} |a_i\rangle\langle a_i|X^\dagger|a_j\rangle\langle a_j| = \sum_{i=1}^{n}\sum_{j=1}^{m} |a_i\rangle \left(\langle a_j|X|a_i\rangle\right)^* \langle a_j| \\ &= \sum_{i=1}^{n}\sum_{j=1}^{n} |a_i\rangle \left(X^a_{ji}\right)^* \langle a_j| \end{aligned} \tag{3.48}$$

と与えられる．したがって, エルミート変換の正規直交基底 a による行列表示は

$$H^a_{ij} = \left(H^a_{ji}\right)^* \tag{3.49}$$

を満たす．このとき, 行列 $[H]^a_{n\times n}$ を**エルミート行列**という．ユークリッドベクトル空間の場合, エルミート行列を**対称行列**という．(3.49) からエルミート行列の対角成分は実数であり, したがって, そのトレース $\mathrm{tr}H$ も実数であることがわかる．また, ユニタリ変換の正規直交基底 a による行列表示は

$$U^a_{ij} = \left(U^{-1a}_{ji}\right)^* \tag{3.50}$$

を満たす．このとき, 行列 $[U]^a_{n\times n}$ を**ユニタリ行列**という．ユークリッドベクトル空間の場合, ユニタリ行列を**直交行列**という．以上のように, 基底 a, α がともに正規直交基底である場合, $X^\dagger$ の行列表示は X の行列表示を転置すると同時に各行列成分の複素共役をとったものであることがわかる．これは正規直交基底を用いない場合, 一般には成立しないことに注意しよう．なお, 正規直交基底の場合, ベクトル $|u\rangle$, 線形形式 $\langle f|$

$$\begin{aligned} |u\rangle &= |a_1\rangle u^a_1 + \cdots + |a_n\rangle u^a_n \\ \langle f| &= f^{a*}_1\langle a_1| + \cdots + f^{a*}_n\langle a_n| \end{aligned} \tag{3.51}$$

のエルミート共役はそれぞれ

$$\begin{aligned} \langle u| &= u^{a*}_1\langle a_1| + \cdots + u^{a*}_n\langle a_n| \\ |f\rangle &= |a_1\rangle f^a_1 + \cdots + |a_n\rangle f^a_n \end{aligned} \tag{3.52}$$

である．したがって, 正規直交基底の場合 $\langle a_i| = \langle \bar{a}_i|$ であるから,

$$\begin{aligned} \bar{u}_i^a &= u_i^{a*} \\ \bar{f}_i^a &= f_i^{a*} \end{aligned} \tag{3.53}$$

が成り立つ．これは (3.15) からもすぐにわかる．

直交直和分解

計量ベクトル空間において, 射影 $I_\clubsuit$ がエルミート変換であるとき $I_\clubsuit$ を**正射影**という．つまり, 正射影とは

$$I_\clubsuit^\dagger = I_\clubsuit \tag{3.54}$$

を満たす射影をいう．V の基底 a が正規直交基底であるとき, 基底ベクトル $|a_i\rangle$ への射影 $|a_i\rangle\langle a_i|$ は正射影である．また, 複数の $|a_i\rangle\langle a_i|$ の和も正射影である．つまり,

$$I_\spadesuit = \sum_{i\in\spadesuit} |a_i\rangle\langle a_i| \tag{3.55}$$

は V から $\{\!\!\{|a_i\rangle \mid i \in \spadesuit\}\!\!\}$ を基底とする部分ベクトル空間 $V_\spadesuit$ への正射影である．V が正射影によってその部分ベクトル空間に直和分解されるとき, これを**直交直和分解**といい記号として $\oplus$ を用いて表す．直交直和分解において, 異なる部分ベクトル空間のベクトルは互いに直交する．特に, V が $I_\spadesuit$ と $I_\heartsuit = I - I_\spadesuit$ により

$$V = V_\spadesuit \oplus V_\heartsuit \tag{3.56}$$

と 2 つの部分ベクトル空間 $V_\spadesuit = I_\spadesuit(V)$, $V_\heartsuit = I_\heartsuit(V)$ に直交直和分解されるとき, $V_\heartsuit$ は $V_\spadesuit$ の**直交余空間**であるといい $V_\heartsuit = V_\spadesuit^\perp$ と表す．このとき逆に, $V_\spadesuit$ は $V_\heartsuit$ の直交余空間である．ここで, 直交直和分解 (3.56) は一意的であるという点が重要である．(3.55) からわかるように, 正射影 $I_\spadesuit$ は $\{\!\!\{|a_i\rangle \mid i \in \spadesuit\}\!\!\}$ つまり $V_\spadesuit$ が与えられると一意的に決まる．これは計量ベクトル空間の場合, i 番目の基底ベクトル $|a_i\rangle$ の共役線形形式 $\langle a_i|$ は $|a_i\rangle$ さえ与えられれば残りの基底ベクトルが与えられなくても一意的に決まるからである．その結果, $I_\heartsuit$, したがって, $V_\heartsuit$ も一意的に決まる．一般の直和分解の場合は部分ベクトル空間の余空間は一意的には決まらないこと

を 2.2 節で述べた．これに対し, 直交直和分解の場合は部分ベクトル空間の直交余空間は一意的に決まるのである．

シュバルツの不等式と三角不等式

任意の 2 つのベクトル $|u\rangle$, $|v\rangle$ は**シュバルツの不等式**

$$\langle u|u\rangle\langle v|v\rangle \geq \langle u|v\rangle\langle v|u\rangle \tag{3.57}$$

を満たす．これは, $|u\rangle$, $|v\rangle$ の少なくとも一方が零ベクトルの場合は明らかに成り立つから, たとえば, $|v\rangle$ が零ベクトルでないとして次のように確かめられる．まず, $|v\rangle$ を基底とする 1 次元部分ベクトル空間 $V_\spadesuit$ とその直交余空間 $V_\heartsuit$ を考え, $|u\rangle$ を $|u\rangle = |u_\spadesuit\rangle + |u_\heartsuit\rangle$ と直交直和分解する．$V_\spadesuit$ への正射影は

$$I_\spadesuit = \frac{|v\rangle\langle v|}{\langle v|v\rangle} \tag{3.58}$$

で与えられ, これにより $V_\heartsuit$ への正射影は $I_\heartsuit = I - I_\spadesuit$ と書ける．$I_\spadesuit$, $I_\heartsuit$ を用いると, $|u_\spadesuit\rangle = I_\spadesuit|u\rangle$, $|u_\heartsuit\rangle = I_\heartsuit|u\rangle$ と表せる．このとき,

$$\langle u|u\rangle = \langle u_\spadesuit|u_\spadesuit\rangle + \langle u_\heartsuit|u_\heartsuit\rangle \geq \langle u_\spadesuit|u_\spadesuit\rangle = \frac{\langle u|v\rangle\langle v|u\rangle}{\langle v|v\rangle} \tag{3.59}$$

であることより, シュバルツの不等式 (3.57) が得られる．さらに, $|u\rangle$, $|v\rangle$ は

$$\sqrt{\langle u|u\rangle} + \sqrt{\langle v|v\rangle} \geq \sqrt{(\langle u| + \langle v|)\,(|u\rangle + |v\rangle)} \tag{3.60}$$

つまり

$$\|\,|u\rangle\,\| + \|\,|v\rangle\,\| \geq \|\,|u\rangle + |v\rangle\,\| \tag{3.61}$$

という不等式も満たす．(3.61) を**三角不等式**という．これは次のように確かめられる．まず, $(\|\,|u\rangle\,\| + \|\,|v\rangle\,\|)^2 = \langle u|u\rangle + \langle v|v\rangle + 2\sqrt{\langle u|u\rangle\langle v|v\rangle}$ において, シュバルツの不等式 (3.57) を考慮すると,

$$\langle u|u\rangle + \langle v|v\rangle + 2\sqrt{\langle u|u\rangle\langle v|v\rangle} \geq \langle u|u\rangle + \langle v|v\rangle + 2\sqrt{\langle u|v\rangle\langle v|u\rangle} \tag{3.62}$$

となる．ここで, 任意の複素数 z は $2|z| \geq z + z^*$ を満たすことから $z = \langle u|v\rangle$ と考えると,

$$\langle u|u\rangle + \langle v|v\rangle + 2\sqrt{\langle u|v\rangle\langle v|u\rangle} \geq \langle u|u\rangle + \langle v|v\rangle + \langle u|v\rangle + \langle v|u\rangle \tag{3.63}$$

が成り立つ．したがって, (3.62), (3.63) から, 三角不等式 (3.61) が得られる．

グラム-シュミットの直交化法

ここでは正射影を用いた正規直交基底の作り方について述べる．V に基底 b が与えられたとしよう．ただし, 一般に b が正規直交基底でない場合を考える．このとき以下に述べる**グラム-シュミットの直交化法**によって基底 b から正規直交基底 a を得ることができる．まず, $|a_1\rangle$ として $|b_1\rangle$ を正規化したものを選ぶ．つまり,

$$|a_1\rangle = \frac{|b_1\rangle}{\| \, |b_1\rangle \, \|} \tag{3.64}$$

である．次に, $|a_2\rangle$ については

$$|a_2\rangle = \frac{|b_2\rangle - |a_1\rangle\langle a_1|b_2\rangle}{\| \, |b_2\rangle - |a_1\rangle\langle a_1|b_2\rangle \, \|} \tag{3.65}$$

と選べば, これは $\langle a_1|a_2\rangle = 0$, $\langle a_2|a_2\rangle = 1$ を満たす．同様の手順で,

$$|a_k\rangle = \frac{|b_k\rangle - |a_1\rangle\langle a_1|b_k\rangle - \cdots - |a_{k-1}\rangle\langle a_{k-1}|b_k\rangle}{\| \, |b_k\rangle - |a_1\rangle\langle a_1|b_k\rangle - \cdots - |a_{k-1}\rangle\langle a_{k-1}|b_k\rangle \, \|} \tag{3.66}$$

と選べば, これは $\langle a_1|a_k\rangle = \cdots = \langle a_{k-1}|a_k\rangle = 0$, $\langle a_k|a_k\rangle = 1$ を満たす．このような手順によって最終的に正規直交基底 a を得ることができる．つまり, グラム-シュミットの直交化法は, 計量ベクトル空間では必ず基底として正規直交基底を選べることを示している．

第4章　固有値問題

4.1　固有値問題

固有値と固有ベクトル

複素数の全体 $\boldsymbol{C}$ 上のベクトル空間 V において, 線形変換 X を考える. 零ベクトルでないベクトル $|b\rangle$ が

$$X|b\rangle = |b\rangle\xi \quad (\xi \in \boldsymbol{C}) \tag{4.1}$$

を満たすとき, ξ を X の**固有値**, $|b\rangle$ を固有値 ξ に属する X の**固有ベクトル**という. ある固有値 ξ に属する固有ベクトルの一次結合の全体は V の部分ベクトル空間をつくる. これを固有値 ξ に対応する X の**固有空間**という. さらに,

$$\det(X - \xi I) = 0 \tag{4.2}$$

を X の**固有方程式**という. 行列式は基底によらないから, 固有方程式は線形変換 X が与えられれば一意的に決まる. 固有方程式の根が X の固有値である. その理由は, (4.1) をある基底 a によって

$$\begin{bmatrix} X^a_{11} & \cdots & X^a_{1n} \\ \vdots & & \vdots \\ X^a_{n1} & \cdots & X^a_{nn} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} b^a_1 \\ \vdots \\ b^a_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} b^a_1 \\ \vdots \\ b^a_n \end{bmatrix} \xi \tag{4.3}$$

つまり

$$\begin{bmatrix} X^a_{11} - \xi & \cdots & X^a_{1n} \\ \vdots & & \vdots \\ X^a_{n1} & \cdots & X^a_{nn} - \xi \end{bmatrix} \begin{bmatrix} b^a_1 \\ \vdots \\ b^a_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ \vdots \\ 0 \end{bmatrix} \tag{4.4}$$

と書くと明らかなように, (4.2) は (4.4) が $|b\rangle = \boldsymbol{0}$ 以外の解をもつための条件だからである. 固有方程式から固有値が決まると, (4.4) を解くことに

よってその固有値に属する X の固有ベクトルを求めることができる．このように, 与えられた線形変換の固有値, 固有ベクトルを求める問題を**固有値問題** という．

対角化可能な線形変換

線形変換 X の固有ベクトルから V の基底をつくることができるとき, X は**対角化可能**であるという．X が対角化可能であるためには, (4.4) を満たす n 個の一次独立なベクトルが存在する必要がある．そのための必要十分条件は, 固有方程式の根の重複度とその根に対応する固有空間の次元が一致することであることが知られている．対角化可能な線形変換 X の固有値を重複も許して $\xi_1, \cdots, \xi_n$ とし, また, これらに属する固有ベクトルからつくった基底を $b = \{\!\{|b_1\rangle, \cdots, |b_n\rangle\}\!\}$ とする．このとき,

$$X|b_i\rangle = |b_i\rangle\xi_i \tag{4.5}$$

であるから

$$X \stackrel{b}{=} \begin{bmatrix} \xi_1 & & O \\ & \ddots & \\ O & & \xi_n \end{bmatrix} \tag{4.6}$$

となる．つまり, X の基底 b による行列表示は**対角行列**となる．このとき, 双対基底を $\bar{b}^\star = \{\!\{\langle\bar{b}_1|, \cdots, \langle\bar{b}_n|\}\!\}$ として X の右側に基底 b についての完全性関係を用いると

$$X = |b_1\rangle\xi_1\langle\bar{b}_1| + \cdots + |b_n\rangle\xi_n\langle\bar{b}_n| = \sum_{i=1}^{n} |b_i\rangle\xi_i\langle\bar{b}_i| \tag{4.7}$$

と表される．さらに, $\xi_{(1)}, \cdots, \xi_{(s)}$ を X の相異なる固有値とすると,

$$X = \xi_{(1)}I_{(1)} + \cdots + \xi_{(s)}I_{(s)} = \sum_{p=1}^{s} \xi_{(p)}I_{(p)} \tag{4.8}$$

となる．ここで, $I_{(p)}(p = 1, \cdots, s)$ は固有値 $\xi_{(p)}$ に対応する X の固有空間 $V_{(p)}$ への射影である．(4.7), (4.8) を X の**スペクトル分解**という．X のスペクトル分解 (4.8) と射影の性質から, 射影 $I_{(p)}$ は

$$I_{(p)} = \frac{(X - \xi_{(1)}I)\cdots(X - \xi_{(p-1)}I)(X - \xi_{(p+1)}I)\cdots(X - \xi_{(s)}I)}{(\xi_{(p)} - \xi_{(1)})\cdots(\xi_{(p)} - \xi_{(p-1)})(\xi_{(p)} - \xi_{(p+1)})\cdots(\xi_{(p)} - \xi_{(s)})} \tag{4.9}$$

と書ける. なお, X が正則のとき, つまり, $\det X = \xi_1 \cdots \xi_n \neq 0$ のときは,

$$X^{-1} = |b_1\rangle \xi_1^{-1} \langle \bar{b}_1| + \cdots + |b_n\rangle \xi_n^{-1} \langle \bar{b}_n| = \sum_{i=1}^{n} |b_i\rangle \xi_i^{-1} \langle \bar{b}_i| \tag{4.10}$$

と表され, さらに,

$$X^{-1} = \xi_{(1)}^{-1} I_{(1)} + \cdots + \xi_{(s)}^{-1} I_{(s)} = \sum_{p=1}^{s} \xi_{(p)}^{-1} I_{(p)} \tag{4.11}$$

である.

同時対角化可能な線形変換

2 つの線形変換 X と Y の積について, 一般には $XY \neq YX$ である. このことは, X と Y の**交換子** $[X, Y]$ を

$$[X, Y] = XY - YX \tag{4.12}$$

によって定義すると,

$$[X, Y] \neq 0 \tag{4.13}$$

と書ける. これに対し, 特別な X, Y については $XY = YX$, つまり,

$$[X, Y] = 0 \tag{4.14}$$

であることがある. このとき, X と Y は**交換可能**であるという. さらに, 交換可能な 2 つの線形変換 X, Y のそれぞれが対角化可能で,

$$X = \xi_{(1)} I_{(1)} + \cdots + \xi_{(s)} I_{(s)} = \sum_{p=1}^{s} \xi_{(p)} I_{(p)} \tag{4.15}$$

および

$$Y = \eta_{(1)} J_{(1)} + \cdots + \eta_{(t)} J_{(t)} = \sum_{q=1}^{t} \eta_{(q)} J_{(q)} \tag{4.16}$$

とスペクトル分解されるとすると, (4.9) より

$$\left[I_{(p)}, J_{(q)} \right] = 0 \tag{4.17}$$

であることがわかる．このとき, $I_{(p)}J_{(q)}$ は X の固有空間 $V_{(p)}$ と Y の固有空間 $W_{(q)}$ の共通部分 $V_{(p)} \cap W_{(q)}$ への射影となる．したがって, X と Y に共通の射影 $I_{(p)}J_{(q)}$ を用いてこれらをスペクトル分解すると,

$$X = \sum_{p=1}^{s}\sum_{q=1}^{t} \xi_{(p)} I_{(p)} J_{(q)} \tag{4.18}$$

および

$$Y = \sum_{p=1}^{s}\sum_{q=1}^{t} \eta_{(q)} I_{(p)} J_{(q)} \tag{4.19}$$

となる． このことから, X と Y に共通の固有ベクトルから基底をつくることができることがわかる． X の固有値を $\xi_1, \cdots, \xi_n$, Y の固有値を $\eta_1, \cdots, \eta_n$ とし, また, X と Y に共通の固有ベクトルからつくった基底を $b = \{\!\{|b_1\rangle, \cdots, |b_n\rangle\}\!\}$ とする．このとき

$$\begin{aligned} X|b_i\rangle &= |b_i\rangle\xi_i \\ Y|b_i\rangle &= |b_i\rangle\eta_i \end{aligned} \tag{4.20}$$

であるから

$$\begin{aligned} X &\overset{b}{=} \begin{bmatrix} \xi_1 & & O \\ & \ddots & \\ O & & \xi_n \end{bmatrix} \\ Y &\overset{b}{=} \begin{bmatrix} \eta_1 & & O \\ & \ddots & \\ O & & \eta_n \end{bmatrix} \end{aligned} \tag{4.21}$$

となる．あるいは

$$\begin{aligned} X &= |b_1\rangle\xi_1\langle\bar{b}_1| + \cdots + |b_n\rangle\xi_n\langle\bar{b}_n| = \sum_{i=1}^{n} |b_i\rangle\xi_i\langle\bar{b}_i| \\ Y &= |b_1\rangle\eta_1\langle\bar{b}_1| + \cdots + |b_n\rangle\eta_n\langle\bar{b}_n| = \sum_{i=1}^{n} |b_i\rangle\eta_i\langle\bar{b}_i| \end{aligned} \tag{4.22}$$

である．つまり, X, Y を基底 b により表示すると, ともに対角行列となる．このとき, X と Y は**同時対角化可能**であるという．

4.2 正規変換の固有値問題

正規変換の固有値問題

計量ベクトル空間における固有値問題は, 考えている線形変換が正規変換であるとき, 以下に述べる著しい特徴をもつことが知られている. 正規変換 X は常に対角化可能であり, その固有ベクトルから正規直交基底をつくることができる. 逆に, ある線形変換 X の固有ベクトルから正規直交基底をつくれるのは, X が正規変換のときに限る. つまり, 線形変換 X の固有ベクトルから正規直交基底をつくれるための必要十分条件は, X が正規変換であることである. 正規変換 X の固有ベクトルからつくった正規直交基底を $b = \{\!\{|b_1\rangle, \cdots, |b_n\rangle\}\!\}$ とすると, その双対基底は $b^\star = \{\!\{\langle b_1|, \cdots, \langle b_n|\}\!\}$ である. これらにより X は

$$X = |b_1\rangle\xi_1\langle b_1| + \cdots + |b_n\rangle\xi_n\langle b_n| = \sum_{i=1}^{n} |b_i\rangle\xi_i\langle b_i| \tag{4.23}$$

と書ける. (4.23) のエルミート共役をとると

$$X^\dagger = |b_1\rangle\xi_1^*\langle b_1| + \cdots + |b_n\rangle\xi_n^*\langle b_n| = \sum_{i=1}^{n} |b_i\rangle\xi_i^*\langle b_i| \tag{4.24}$$

が得られる. したがって, 正規変換 X のエルミート共役 $X^\dagger$ の固有値は X の固有値 ξ_i の複素共役 ξ_i^* であり, また, その固有ベクトルは X と $X^\dagger$ で $|b_i\rangle$ を共通に選べることがわかる. さらに, X が正則である場合, その逆変換 X^{-1} は

$$X^{-1} = |b_1\rangle\xi_1^{-1}\langle b_1| + \cdots + |b_n\rangle\xi_n^{-1}\langle b_n| = \sum_{i=1}^{n} |b_i\rangle\xi_i^{-1}\langle b_i| \tag{4.25}$$

で与えられる.

エルミート変換の固有値問題

正規変換がエルミート変換 H の場合, $H^\dagger = H$ であるから,

$$\xi_i^* = \xi_i \tag{4.26}$$

となる. つまり, エルミート変換 H の固有値 ξ_i は実数である.

ユニタリ変換の固有値問題

正規変換がユニタリ変換 U の場合, $U^\dagger = U^{-1}$ であるから,

$$\xi_i^* = \xi_i^{-1} \tag{4.27}$$

となる. つまり, ユニタリ変換 U の固有値 ξ_i は絶対値が 1 の複素数である.

第5章　関数空間

5.1　関数空間

関数空間

$a < x < b$ において実数 x に複素数 $f(x)$ を対応させる関数の全体はベクトル空間となる．このベクトル空間を**関数空間**といい，これは，任意次数の多項式のつくるベクトル空間を考えてみればわかるように，無限次元のベクトル空間である．以下では，x に $f(x)$ を対応させる関数を $|f\rangle$ で表し，また，$|f\rangle$ の全体を V で表す．さらに，

$$\langle f|g\rangle = \int_a^b \int_a^b f(x)^* w(x, x') g(x') \mathrm{d}x \mathrm{d}x' \tag{5.1}$$

によって $|f\rangle$ と $|g\rangle$ の内積を定義すると，V は計量ベクトル空間となる．ここで，$w(x, x')$ は内積 (5.1) を定める**計量**であり，(5.1) が内積の性質 (3.2) を満たすようなものであるとする．したがって，特に，

$$w(x, x')^* = w(x', x) \tag{5.2}$$

である．

線形演算子

関数空間を考える場合には，線形変換は 1 つの関数をもう 1 つの関数に移す操作を表す．通常，これを**線形演算子**ということが多いので，ここでもこの用語を使うことにする．同様に，正規変換，エルミート変換，ユニタリ変換をそれぞれ正規演算子，エルミート演算子，ユニタリ演算子とよぶ．これらの線形演算子についても線形変換のときと同様に固有値，固有ベクトルを考えることができるが，関数空間の場合は固有ベクトルを固有関数とよぶことが多い．さらに，対角化可能な線形演算子についてのスペクトル分解も線形変換のときとほとんど同じ形で成り立つ．また，関数空間の場合でも非常に重要となるのは，正規演算子の固有関数から直交基底をつ

くることができるという点である．ただし, 有限次元のベクトル空間の場合と大きく異なるのは, 基底ベクトルの長さを 1 にするという通常の意味での正規化が必ずしも可能とは限らないという点である．これは, 無限次元のベクトル空間の場合には, 線形演算子が**連続スペクトル**をもつ場合があるためである．以下では, これらのことについて具体的な説明を行う．なお, 前章までは行列算の規則に従って式の中における複素数の位置をあつかってきたが, 以降ではこの点についてはあまり固執しないことにする．

5.2　デルタ関数と位置演算子

短冊型関数による関数近似

関数 $|f\rangle$ を近似的にあつかうために**短冊型関数**

$$\tau_i(x) = \begin{cases} 1/\sqrt{\Delta x} & (x_i - \Delta x/2 < x < x_i + \Delta x/2) \\ 0 & (\text{それ以外のとき}) \end{cases} \tag{5.3}$$

の一次結合を考え, その全体を V_n とする．ここで, $\Delta x = (b-a)/(n-1)$, また, $i = 1, \cdots, n$ であり, さらに, $x_i = a + (i-1)\Delta x$ とおいた．このとき, $\tau = \{\!\{|\tau_1\rangle, \cdots, |\tau_n\rangle\}\!\}$ は V_n において基底となる．つまり

$$\langle \bar{\tau}_i | \tau_{i'} \rangle = \delta_{ii'} \tag{5.4}$$

および

$$I_n = |\tau_1\rangle\langle\bar{\tau}_1| + \cdots + |\tau_n\rangle\langle\bar{\tau}_n| = \sum_{i=1}^{n} |\tau_i\rangle\langle\bar{\tau}_i| \tag{5.5}$$

が成り立つ．ここで, $\bar{\tau}^\star = \{\!\{\langle\bar{\tau}_1|, \cdots, \langle\bar{\tau}_n|\}\!\}$ は基底 τ の双対基底である．また, 線形変換

$$X_n = |\tau_1\rangle x_1 \langle\bar{\tau}_1| + \cdots + |\tau_n\rangle x_n \langle\bar{\tau}_n| = \sum_{i=1}^{n} |\tau_i\rangle x_i \langle\bar{\tau}_i| \tag{5.6}$$

を考えると,

$$X_n|\tau_i\rangle = x_i|\tau_i\rangle \tag{5.7}$$

を満たす．つまり, $|\tau_i\rangle$ は固有値 x_i に属する X_n の固有ベクトルであることがわかる．基底 τ を用いると V_n の関数 $|f_n\rangle$ は

$$|f_n\rangle = \sum_{i=1}^{n} f_n(x_i)\sqrt{\Delta x}|\tau_i\rangle \tag{5.8}$$

と表せる．上式の右辺における $\sqrt{\Delta x}$ の因子は $|\tau_i\rangle$ の高さを 1 にするためのものである．また, $\langle\bar{\tau}_i|$ と $|f_n\rangle$ のスカラー積は

$$\langle\bar{\tau}_i|f_n\rangle = f_n(x_i)\sqrt{\Delta x} \tag{5.9}$$

となる．

デルタ関数と位置演算子

さて, $n \to \infty$ の極限において, $|f_n\rangle \to |f\rangle$ となると考えると

$$|f\rangle = \int_a^b f(x_i)\frac{1}{\sqrt{\Delta x}}|\tau_i\rangle \mathrm{d}x_i \tag{5.10}$$

つまり

$$|f\rangle = \int_a^b f(x)|x\rangle \mathrm{d}x \tag{5.11}$$

であることがわかる．ここで,

$$|x\rangle = \frac{1}{\sqrt{\Delta x}}|\tau_i\rangle \tag{5.12}$$

とおいた．この $|x\rangle$ を**デルタ関数**という．さらに, これに対応して

$$\langle\bar{x}| = \frac{1}{\sqrt{\Delta x}}\langle\bar{\tau}_i| \tag{5.13}$$

とおくと, (5.9) より, $\langle\bar{x}|$ と $|f\rangle$ のスカラー積は

$$\langle\bar{x}|f\rangle = f(x) \tag{5.14}$$

となる．また, $\langle\bar{x}|$ と $|x'\rangle$ のスカラー積 $\langle\bar{x}|x'\rangle$ は (5.4) からわかるように $x - x'$ のみの関数であり, このスカラー積を特に $\delta(x-x')$ によって表す．つまり

$$\langle\bar{x}|x'\rangle = \delta(x-x') \tag{5.15}$$

である．これを用いると (5.11), (5.14) から

$$f(x) = \int_a^b f(x')\delta(x - x')\mathrm{d}x' \tag{5.16}$$

であることがわかる．さらに, 完全性関係は

$$I = \int_a^b |x\rangle\langle\bar{x}|\mathrm{d}x \tag{5.17}$$

と表され, また, $n \to \infty$ のとき X_n は

$$X = \int_a^b |x\rangle x\langle\bar{x}|\mathrm{d}x \tag{5.18}$$

とスペクトル分解される．したがって

$$X|x\rangle = x|x\rangle \tag{5.19}$$

である．つまり, デルタ関数 $|x\rangle$ は固有値 x に属する X の固有関数なのである．この X を**位置演算子**という．ここで明らかになったように, $n \to \infty$ の極限を考えると, 線形演算子 X の固有値は a から b の間の任意の値 x をとることがわかる．つまり, 位置演算子 X の固有値は連続スペクトルを形成するのである．

関数空間における射影

いま

$$E(x) = \int_a^x |x'\rangle\langle\bar{x}'|\mathrm{d}x' \tag{5.20}$$

とおくと

$$E(a) = 0 \tag{5.21}$$

および

$$E(b) = I \tag{5.22}$$

を満たし, また,

$$E(x)|f\rangle = \int_a^x |x'\rangle\langle\bar{x}'|f\rangle\mathrm{d}x' \tag{5.23}$$

となることがわかる．つまり, $E(x)$ は関数 $|f\rangle$ の $a < x$ の部分はそのままにして $x < b$ の部分を零とする線形演算子である．さらに

$$\begin{aligned} E(x)^2 &= \int_a^x \int_a^x |x'\rangle\langle\bar{x}'|x''\rangle\langle\bar{x}''|\mathrm{d}x'\mathrm{d}x'' \\ &= \int_a^x |x'\rangle\langle\bar{x}'|\mathrm{d}x' \\ &= E(x) \end{aligned} \tag{5.24}$$

が成り立つから $E(x)$ は射影であることもわかる．つまり, $E(x)$ は区間 $[a, x]$ でのみ零でない関数のつくる部分空間への射影となっている．この $E(x)$ を用いて

$$E(x_2, x_1) = E(x_2) - E(x_1) \tag{5.25}$$

とおくと, $x_2 \geq x_1$ のとき,

$$E(x_1)E(x_2) = E(x_2)E(x_1) = E(x_1) \tag{5.26}$$

であるから

$$\begin{aligned} E(x_2, x_1)^2 &= (E(x_2) - E(x_1))^2 \\ &= E(x_2)^2 - E(x_2)E(x_1) - E(x_1)E(x_2) + E(x_1)^2 \\ &= E(x_2) - E(x_1) \\ &= E(x_2, x_1) \end{aligned} \tag{5.27}$$

となる．つまり, $E(x_2, x_1)$ も射影であり, これは区間 $[x_1, x_2]$ でのみ零でない関数のつくる部分空間への射影となっている．さらに, $E(x)$ の微分は

$$\mathrm{d}E(x) = |x\rangle\langle\bar{x}|\mathrm{d}x \tag{5.28}$$

で与えられるから, 完全性関係 (5.17) は

$$I = \int_a^b \mathrm{d}E(x) \tag{5.29}$$

とも表され, さらに, X のスペクトル分解 (5.18) は

$$X = \int_a^b x \, \mathrm{d}E(x) \tag{5.30}$$

とも表せる．

計量とデルタ関数

完全性関係 (5.17) のエルミート共役をとると，もう 1 つの完全性関係の表し方

$$I = \int_a^b |\bar{x}\rangle\langle x|\mathrm{d}x \tag{5.31}$$

が得られる．(5.31) と (5.17) を $|f\rangle$ と $|g\rangle$ の内積 $\langle f|g\rangle$ の間に用いると

$$\langle f|g\rangle = \int_a^b \int_a^b \langle f|\bar{x}\rangle\langle x|x'\rangle\langle\bar{x}'|g\rangle\mathrm{d}x\mathrm{d}x' \tag{5.32}$$

となる．$\langle f|\bar{x}\rangle = f(x)^*$ および $\langle\bar{x}'|g\rangle = g(x')$ に注意して (5.1) とくらべると

$$\langle x|x'\rangle = w(x, x') \tag{5.33}$$

であることがわかる．さらに，(5.31) を (5.18) の左に用いると

$$X = \int_a^b \int_a^b |\bar{x}\rangle w(x, x')x'\langle\bar{x}'|\mathrm{d}x\mathrm{d}x' \tag{5.34}$$

となる．したがって，X は一般の計量の場合には必ずしもエルミート演算子とはならないことがわかる．しかしながら，計量が局所的である場合，つまり，$w(x, x')$ が**重み関数**とよばれる正の実関数 $w(x)$ によって

$$w(x, x') = w(x)\delta(x - x') \tag{5.35}$$

と与えられる場合には，以下でみるように，X はエルミート演算子となる．このように計量が局所的である場合が重要であるので，最後にこの場合について述べる．このとき，内積 (5.1) は

$$\langle f|g\rangle = \int_a^b f(x)^* w(x)g(x)\mathrm{d}x \tag{5.36}$$

となる．完全性関係 (5.31) を $|x\rangle$ の左に用いると

$$|x\rangle = \int_a^b |\bar{x}'\rangle\langle x'|x\rangle\mathrm{d}x' = w(x)|\bar{x}\rangle \tag{5.37}$$

であることがわかる．また, この式のエルミート共役から

$$\langle x| = w(x)\langle \bar{x}| \tag{5.38}$$

である．したがって, 計量が局所的な場合の完全性関係は

$$I = \int_a^b \frac{|x\rangle\langle x|}{w(x)} \mathrm{d}x \tag{5.39}$$

または

$$I = \int_a^b |\bar{x}\rangle w(x) \langle \bar{x}| \mathrm{d}x \tag{5.40}$$

と表され, X は

$$X = \int_a^b \frac{|x\rangle x \langle x|}{w(x)} \mathrm{d}x \tag{5.41}$$

または

$$X = \int_a^b |\bar{x}\rangle w(x) x \langle \bar{x}| \mathrm{d}x \tag{5.42}$$

とスペクトル分解される．このように, 計量が局所的な場合には, X はエルミート演算子となる．特に, 計量が $w(x, x') = \delta(x - x')$ の場合, つまり, 重み関数が $w(x) = 1$ の場合が最も重要である．このときは

$$|\bar{x}\rangle = |x\rangle \tag{5.43}$$

となり, したがって, 完全性関係は

$$I = \int_a^b |x\rangle\langle x| \mathrm{d}x \tag{5.44}$$

と表され, X のスペクトル分解は

$$X = \int_a^b |x\rangle x \langle x| \mathrm{d}x \tag{5.45}$$

と表される．

5.3 フーリエ級数とフーリエ変換

フーリエ級数

ここでは, 計量が $w(x,x') = \delta(x-x')$ で与えられる場合, つまり, 計量が局所的で重み関数が $w(x) = 1$ として与えられる場合を考える．さらに, $a = -L/2$, $b = L/2$ ととって a と b を同一の点とみなし, 周の長さ L の円周上での関数の全体 V を考えよう．これは, $\boldsymbol{R}$ 上での周期 L の関数を考えることと同等である．このような関数 $|f\rangle$ は

$$f\left(-\frac{L}{2}\right) = f\left(\frac{L}{2}\right) \tag{5.46}$$

を満たすものとする．いま**波数演算子**を

$$K = \int_{-L/2}^{L/2} |x\rangle \left(-i\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\right) \langle x| \mathrm{d}x \tag{5.47}$$

によって定義すると K はエルミート演算子となる．これは部分積分を用いて

$$\begin{aligned}
\langle f|K|g\rangle &= \int_{-L/2}^{L/2} f(x)^* \left(-i\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}g(x)\right) \mathrm{d}x \\
&= \underbrace{-i\ f(x)^* g(x)|_{-L/2}^{L/2}}_{0} + \int_{-L/2}^{L/2} \left(i\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}f(x)^*\right) g(x)\mathrm{d}x \\
&= \left(\int_{-L/2}^{L/2} g(x)^* \left(-i\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}f(x)\right) \mathrm{d}x\right)^* \\
&= \langle g|K|f\rangle^*
\end{aligned} \tag{5.48}$$

となることからわかる．また,

$$\langle x|K|f\rangle = -i\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\langle x|f\rangle \tag{5.49}$$

が成り立つ．K はエルミート演算子であるため, その固有関数から正規直交基底をつくることができる．そこで,

$$|\varphi_j\rangle = \int_{-L/2}^{L/2} \frac{1}{\sqrt{L}} e^{ik_j x} |x\rangle \mathrm{d}x \tag{5.50}$$

つまり

$$\langle x|\varphi_j\rangle = \frac{1}{\sqrt{L}}e^{ik_jx} \tag{5.51}$$

とすると

$$K|\varphi_j\rangle = k_j|\varphi_j\rangle \tag{5.52}$$

つまり

$$-i\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\langle x|\varphi_j\rangle = k_j\langle x|\varphi_j\rangle \tag{5.53}$$

であることがわかる．ただし, $\varphi_j(-L/2) = \varphi_j(L/2)$ より

$$k_j = \frac{2\pi j}{L} \quad (j \text{ は整数}) \tag{5.54}$$

である．波数演算子 K の固有関数 $|\varphi_j\rangle$ を**平面波**という．さて, 平面波からなる基底 $\varphi = \{\!\{|\varphi_j\rangle \mid j \text{ は整数}\}\!\}$ は V における正規直交基底であり,

$$\langle\varphi_j|\varphi_{j'}\rangle = \delta_{jj'} \tag{5.55}$$

および

$$I = \sum_{j=-\infty}^{\infty} |\varphi_j\rangle\langle\varphi_j| \tag{5.56}$$

が成り立つ．基底 φ により V の任意の関数 $|f\rangle$ は

$$|f\rangle = \sum_{j=-\infty}^{\infty} c_j|\varphi_j\rangle \tag{5.57}$$

つまり

$$f(x) = \frac{1}{\sqrt{L}}\sum_{j=-\infty}^{\infty} c_j e^{ik_jx} \tag{5.58}$$

と展開される．ここで

$$c_j = \langle\varphi_j|f\rangle = \frac{1}{\sqrt{L}}\int_{-L/2}^{L/2} e^{-ik_jx}f(x)\mathrm{d}x \tag{5.59}$$

である．展開 (5.57), (5.58) を**フーリエ級数展開**といい, c_j を $|f\rangle$ の**フーリエ係数**という．

フーリエ変換

次に, $L \to \infty$ の極限を考えよう．このとき, (5.57) は

$$|f\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} |\varphi_j\rangle\langle\varphi_j|f\rangle \frac{L}{2\pi}\mathrm{d}k_j = \int_{-\infty}^{\infty} |k\rangle\langle k|f\rangle \mathrm{d}k \tag{5.60}$$

つまり

$$\langle x|f\rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{ikx}\langle k|f\rangle \mathrm{d}k \tag{5.61}$$

となる．ここで

$$|k\rangle = \sqrt{\frac{L}{2\pi}}|\varphi_j\rangle \tag{5.62}$$

つまり

$$\langle x|k\rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{ikx} \tag{5.63}$$

とおいた．したがって, (5.59) は

$$\langle k|f\rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-ik_jx}\langle x|f\rangle \mathrm{d}x \tag{5.64}$$

となる．(5.61) を**フーリエ変換**, (5.64) を**フーリエ逆変換**という．さらに, 完全性関係は

$$I = \int_{-\infty}^{\infty} |k\rangle\langle k| \mathrm{d}k \tag{5.65}$$

と表され, また, エルミート演算子 K は

$$K = \int_{-\infty}^{\infty} |k\rangle k\langle k| \mathrm{d}k \tag{5.66}$$

とスペクトル分解され

$$K|k\rangle = k|k\rangle \tag{5.67}$$

を満たす．また完全性関係 (5.65) から

$$\langle k|f\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \langle k|k'\rangle\langle k'|f\rangle \mathrm{d}k' \tag{5.68}$$

つまり

$$\langle k|k'\rangle = \delta(k-k') \tag{5.69}$$

であることがわかる．$|k\rangle$ に関する完全性関係 (5.65) を $\langle x|$ と $|x'\rangle$ ではさむことにより

$$\delta(x-x') = \frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty} e^{ik(x-x')}\mathrm{d}k \tag{5.70}$$

が得られる．同様に $|x\rangle$ に関する完全性関係 (5.17) を $\langle k|$ と $|k'\rangle$ ではさむことにより

$$\delta(k-k') = \frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty} e^{-i(k-k')x}\mathrm{d}x \tag{5.71}$$

が得られる．

第6章　直交多項式

6.1　シュツルム-リウビル型固有値問題

シュツルム-リウビル型固有値問題

ここでは, 計量が局所的な場合, つまり, $w(x,x') = w(x)\delta(x-x')$ である場合をあつかう. このとき, **シュツルム-リウビル型固有値問題**とは, $p(x)$, $q(x)$ を x の実数値関数として, 線形演算子

$$L = \int_a^b |\bar{x}\rangle \left(-\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x} p(x) \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x} + q(x) \right) \langle \bar{x}| \tag{6.1}$$

について与えられた境界条件

$$\begin{aligned} f(a) &= 0 \\ f(b) &= 0 \end{aligned} \tag{6.2}$$

または

$$\begin{aligned} p(a)\frac{\mathrm{d}f(a)}{\mathrm{d}x} &= 0 \\ p(b)\frac{\mathrm{d}f(b)}{\mathrm{d}x} &= 0 \end{aligned} \tag{6.3}$$

のもとでの固有値問題のことをいう. つまり, 固有値方程式

$$L|f\rangle = \lambda|f\rangle \tag{6.4}$$

または

$$\left(-\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x} p(x) \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x} + q(x) \right) f(x) = \lambda w(x) f(x) \tag{6.5}$$

を解いて, 固有値 λ と固有関数 $|f\rangle$ を求める問題である. ここで, L がエルミート演算子であることは, 部分積分を 2 回用いることにより,

$$
\begin{aligned}
\langle f|L|g\rangle &= \int_a^b f(x)^* \left(-\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}p(x)\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x} + q(x)\right) g(x)\mathrm{d}x \\
&= \underbrace{-f(x)^* p(x)\frac{\mathrm{d}g(x)}{\mathrm{d}x}\bigg|_a^b}_{0} + \int_a^b \left(\frac{\mathrm{d}f(x)^*}{\mathrm{d}x}p(x)\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x} + f(x)^* q(x)\right) g(x)\mathrm{d}x \\
&= \underbrace{\frac{\mathrm{d}f(x)^*}{\mathrm{d}x}p(x)g(x)\bigg|_a^b}_{0} + \int_a^b \left(-\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}p(x)\frac{\mathrm{d}f(x)^*}{\mathrm{d}x} + f(x)^* q(x)\right) g(x)\mathrm{d}x \\
&= \left(\int_a^b g(x)^* \left(-\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}p(x)\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x} + q(x)\right) f(x)\mathrm{d}x\right)^* \\
&= \langle g|L|f\rangle^*
\end{aligned}
\tag{6.6}
$$

となることからわかる.

付 録A　行列記法

A.1　ベクトル空間

$$\left[\quad a \quad\right] = \Big[|a_1\rangle \ \cdots \ |a_n\rangle \Big] \tag{A.1}$$

$$\left[\bar{a}\right] = \begin{bmatrix} \langle \bar{a}_1| \\ \vdots \\ \langle \bar{a}_n| \end{bmatrix} \tag{A.2}$$

$$\left[u^a\right] = \begin{bmatrix} u_1^a \\ \vdots \\ u_n^a \end{bmatrix} \tag{A.3}$$

$$\left[\quad \bar{f}^a \quad\right] = \begin{bmatrix} \bar{f}_1^a & \cdots & \bar{f}_n^a \end{bmatrix} \tag{A.4}$$

$$\left[\quad X^{\alpha a} \quad\right] = \begin{bmatrix} X_{11}^{\alpha a} & \cdots & X_{1n}^{\alpha a} \\ \vdots & & \vdots \\ X_{m1}^{\alpha a} & \cdots & X_{mn}^{\alpha a} \end{bmatrix} \tag{A.5}$$

$$\left[\quad X^{a} \quad\right] = \begin{bmatrix} X_{11}^{a} & \cdots & X_{1n}^{a} \\ \vdots & & \vdots \\ X_{n1}^{a} & \cdots & X_{nn}^{a} \end{bmatrix} \tag{A.6}$$

$$\left[\quad a \quad\right] \left[\bar{a}\right] = I \tag{A.7}$$

$$\begin{bmatrix} \\ \bar{a} \\ \\ \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \quad a \quad \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} & & \\ & I & \\ & & \end{bmatrix} \tag{A.8}$$

$$|u\rangle = \begin{bmatrix} \quad a \quad \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \\ u^a \\ \\ \end{bmatrix} \tag{A.9}$$

$$\begin{bmatrix} \\ \bar{a} \\ \\ \end{bmatrix} |u\rangle = \begin{bmatrix} \\ u^a \\ \\ \end{bmatrix} \tag{A.10}$$

$$\langle f| = \begin{bmatrix} \quad \bar{f}^a \quad \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \\ \bar{a} \\ \\ \end{bmatrix} \tag{A.11}$$

$$\langle f|\begin{bmatrix} \quad a \quad \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \quad \bar{f}^a \quad \end{bmatrix} \tag{A.12}$$

$$X = \begin{bmatrix} \quad \alpha \quad \end{bmatrix} \begin{bmatrix} & & \\ & X^{\alpha a} & \\ & & \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \\ \bar{a} \\ \\ \end{bmatrix} \tag{A.13}$$

$$X = \begin{bmatrix} \quad a \quad \end{bmatrix} \begin{bmatrix} & & \\ & X^{a} & \\ & & \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \\ \bar{a} \\ \\ \end{bmatrix} \tag{A.14}$$

$$X\begin{bmatrix} \quad a \quad \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \quad \alpha \quad \end{bmatrix} \begin{bmatrix} & & \\ & X^{\alpha a} & \\ & & \end{bmatrix} \tag{A.15}$$

$$X\begin{bmatrix} \quad a \quad \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \quad a \quad \end{bmatrix} \begin{bmatrix} & & \\ & X^{a} & \\ & & \end{bmatrix} \tag{A.16}$$

$$\begin{bmatrix} \\ \bar{\alpha} \\ \\ \end{bmatrix} X \begin{bmatrix} \quad a \quad \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} & & \\ & X^{\alpha a} & \\ & & \end{bmatrix} \tag{A.17}$$

$$\begin{bmatrix} \\ \bar{a} \\ \\ \end{bmatrix} X \begin{bmatrix} \quad a \quad \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} & & \\ & X^{a} & \\ & & \end{bmatrix} \tag{A.18}$$

$$P = \begin{bmatrix} \quad b \quad \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \\ \bar{a} \\ \\ \end{bmatrix} \qquad P^{-1} = \begin{bmatrix} \quad a \quad \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \\ \bar{b} \\ \\ \end{bmatrix} \tag{A.19}$$

$$Q = [\ \beta\ ]\left[\bar{\alpha}\right] \qquad Q^{-1} = [\ \alpha\ ]\left[\bar{\beta}\right] \tag{A.20}$$

$$\left[\ P^a\ \right] = \left[\bar{a}\right][\ b\ ] \qquad \left[\ P^a\ \right]^{-1} = \left[\bar{b}\right][\ a\ ] \tag{A.21}$$

$$\left[\ Q^\alpha\ \right] = \left[\bar{\alpha}\right][\ \beta\ ] \qquad \left[\ Q^\alpha\ \right]^{-1} = \left[\bar{\beta}\right][\ \alpha\ ] \tag{A.22}$$

$$\begin{aligned}\left[\ X^{\beta b}\ \right] = \left[\bar{\beta}\right]X[\ b\ ] = \left[\bar{\beta}\right][\ \alpha\ ]\left[\ X^{\alpha a}\ \right]\left[\bar{a}\right][\ b\ ] \\ = \left[\ Q^\alpha\ \right]^{-1}\left[\ X^{\alpha a}\ \right]\left[\ P^a\ \right]\end{aligned} \tag{A.23}$$

$$\begin{aligned}\left[\ X^{b}\ \right] = \left[\bar{b}\right]X[\ b\ ] = \left[\bar{b}\right][\ a\ ]\left[\ X^{a}\ \right]\left[\bar{a}\right][\ b\ ] \\ = \left[\ P^a\ \right]^{-1}\left[\ X^{a}\ \right]\left[\ P^a\ \right]\end{aligned} \tag{A.24}$$

$$\left[u^b\right] = \left[\bar{b}\right]|u\rangle = \left[\bar{b}\right][\ a\ ]\left[u^a\right] = \left[\ P^a\ \right]^{-1}\left[u^a\right] \tag{A.25}$$

$$[\ \bar{f}^b\ ] = \langle f|[\ b\ ] = [\ \bar{f}^a\ ]\left[\bar{a}\right][\ b\ ] = [\ \bar{f}^a\ ]\left[\ P^a\ \right] \tag{A.26}$$

A.2　内積

$$[\ \bar{a}\ ] = \left[|\bar{a}_1\rangle\ \cdots\ |\bar{a}_n\rangle\right] \tag{A.27}$$

$$\left[a\right] = \begin{bmatrix}\langle a_1| \\ \vdots \\ \langle a_n|\end{bmatrix} \tag{A.28}$$

$$\begin{bmatrix}\ \bar{a}\ \end{bmatrix}\begin{bmatrix} \\ a \\ \\ \end{bmatrix} = I \tag{A.29}$$

$$\begin{bmatrix} \\ a \\ \\ \end{bmatrix}\begin{bmatrix}\ \bar{a}\ \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} & & \\ & I & \\ & & \end{bmatrix} \tag{A.30}$$

$$\begin{bmatrix} & & \\ & G & \\ & & \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \\ a \\ \\ \end{bmatrix}\begin{bmatrix}\ a\ \end{bmatrix} \qquad \begin{bmatrix} & & \\ & \bar{G} & \\ & & \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \\ \bar{a} \\ \\ \end{bmatrix}\begin{bmatrix}\ \bar{a}\ \end{bmatrix} \tag{A.31}$$

$$\begin{bmatrix} & & \\ & \bar{G} & \\ & & \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} & & \\ & G & \\ & & \end{bmatrix}^{-1} \tag{A.32}$$

$$\begin{bmatrix} \\ a \\ \\ \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \\ a \\ \\ \end{bmatrix}\begin{bmatrix}\ a\ \end{bmatrix}\begin{bmatrix} \\ \bar{a} \\ \\ \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} & & \\ & G & \\ & & \end{bmatrix}\begin{bmatrix} \\ \bar{a} \\ \\ \end{bmatrix} \tag{A.33}$$

$$\begin{bmatrix}\ \bar{a}\ \end{bmatrix} = \begin{bmatrix}\ a\ \end{bmatrix}\begin{bmatrix} \\ \bar{a} \\ \\ \end{bmatrix}\begin{bmatrix}\ \bar{a}\ \end{bmatrix} = \begin{bmatrix}\ a\ \end{bmatrix}\begin{bmatrix} & & \\ & \bar{G} & \\ & & \end{bmatrix} \tag{A.34}$$

$$\begin{aligned} \langle u| &= \langle u|\begin{bmatrix}\ \bar{a}\ \end{bmatrix}\begin{bmatrix} \\ a \\ \\ \end{bmatrix} = \begin{bmatrix}\ u^{a*}\ \end{bmatrix}\begin{bmatrix} \\ a \\ \\ \end{bmatrix} = \begin{bmatrix}\ u^{a*}\ \end{bmatrix}\begin{bmatrix} \\ a \\ \\ \end{bmatrix}\begin{bmatrix}\ a\ \end{bmatrix}\begin{bmatrix} \\ \bar{a} \\ \\ \end{bmatrix} \\ &= \begin{bmatrix}\ u^{a*}\ \end{bmatrix}\begin{bmatrix} & & \\ & G & \\ & & \end{bmatrix}\begin{bmatrix} \\ \bar{a} \\ \\ \end{bmatrix} = \begin{bmatrix}\ \bar{u}^{a}\ \end{bmatrix}\begin{bmatrix} \\ \bar{a} \\ \\ \end{bmatrix} \end{aligned} \tag{A.35}$$

$$\begin{bmatrix}\ \bar{u}^{a}\ \end{bmatrix} = \begin{bmatrix}\ u^{a*}\ \end{bmatrix}\begin{bmatrix} & & \\ & G & \\ & & \end{bmatrix} \tag{A.36}$$

$$\langle u|v\rangle = \langle u|\begin{bmatrix}\ \bar{a}\ \end{bmatrix}\begin{bmatrix} \\ a \\ \\ \end{bmatrix}\begin{bmatrix}\ a\ \end{bmatrix}\begin{bmatrix} \\ \bar{a} \\ \\ \end{bmatrix}|v\rangle = \begin{bmatrix}\ u^{a*}\ \end{bmatrix}\begin{bmatrix} & & \\ & G & \\ & & \end{bmatrix}\begin{bmatrix} \\ v^{a} \\ \\ \end{bmatrix} \tag{A.37}$$

$$\begin{aligned} X^{\dagger} &= \begin{bmatrix}\ \bar{a}\ \end{bmatrix}\begin{bmatrix} \\ a \\ \\ \end{bmatrix} X^{\dagger}\begin{bmatrix}\ \bar{a}\ \end{bmatrix}\begin{bmatrix} \\ a \\ \\ \end{bmatrix} = \begin{bmatrix}\ \bar{a}\ \end{bmatrix}^{t}\begin{bmatrix} & & \\ & X^{a} & \\ & & \end{bmatrix}^{*}\begin{bmatrix} \\ a \\ \\ \end{bmatrix} \\ &= \begin{bmatrix}\ a\ \end{bmatrix}\begin{bmatrix} \\ \bar{a} \\ \\ \end{bmatrix}\begin{bmatrix}\ \bar{a}\ \end{bmatrix}^{t}\begin{bmatrix} & & \\ & X^{a} & \\ & & \end{bmatrix}^{*}\begin{bmatrix} \\ a \\ \\ \end{bmatrix}\begin{bmatrix}\ a\ \end{bmatrix}\begin{bmatrix} \\ \bar{a} \\ \\ \end{bmatrix} \\ &= \begin{bmatrix}\ a\ \end{bmatrix}\begin{bmatrix} & & \\ & \bar{G} & \\ & & \end{bmatrix}^{t}\begin{bmatrix} & & \\ & X^{a} & \\ & & \end{bmatrix}^{*}\begin{bmatrix} & & \\ & G & \\ & & \end{bmatrix}\begin{bmatrix} \\ \bar{a} \\ \\ \end{bmatrix} \end{aligned} \tag{A.38}$$

$$\begin{bmatrix} & & \\ & X^{\dagger a} & \\ & & \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} & & \\ & \bar{G} & \\ & & \end{bmatrix}^{t}\begin{bmatrix} & & \\ & X^{a} & \\ & & \end{bmatrix}^{*}\begin{bmatrix} & & \\ & G & \\ & & \end{bmatrix} \tag{A.39}$$

索 引