線形代数のポイント

2024年8月23日

(0) ブラベクトルとケットベクトル

縦ベクトルを $|a\rangle$ と表し，**ケットベクトル**とよぶ。また，横ベクトルを $\langle a|$ と表し，**ブラベクトル**とよぶ。

(1) ケットベクトルの列ベクトル表現

任意のケットベクトル $|a\rangle$ は**基底** $e = \{|e_1\rangle, \cdots, |e_n\rangle\}$ によって

$$|a\rangle = a_1|e_1\rangle + \cdots + a_n|e_n\rangle \tag{1}$$

と展開される。このとき，

$$|a\rangle \stackrel{e}{=} \begin{bmatrix} a_1 \\ \vdots \\ a_n \end{bmatrix} \tag{2}$$

と表し，右辺を基底 e による $|a\rangle$ の**列ベクトル表現**という。

(2) ケットベクトルのエルミート共役

ケットベクトル $|a\rangle$ の**エルミート共役**を

$$\langle a| = a_1^*\langle e_1| + \cdots + a_n^*\langle e_n| \tag{3}$$

によって定義する。ここで，$\langle e_i|$ は $\langle e_i|e_j\rangle$ が $|e_i\rangle$ と $|e_j\rangle$ の**内積**で与えられるようなブラベクトルである。

(3) 正規直交基底

$\langle e_i|e_j\rangle = \delta_{ij}$ であるような基底を**正規直交基底**という。このとき $\langle a|$ は

$$\langle a| \stackrel{e}{=} \begin{bmatrix} a_1^* & \cdots & a_n^* \end{bmatrix} \tag{4}$$

と**行ベクトル表現**される。また，$|a\rangle$ と $|b\rangle$ の内積は

$$\langle a|b\rangle = \begin{bmatrix} a_1^* & \cdots & a_n^* \end{bmatrix} \begin{bmatrix} b_1 \\ \vdots \\ b_n \end{bmatrix} = a_1^*b_1 + \cdots + a_n^*b_n \tag{5}$$

で与えられる。これを**標準内積**という。

(4) 線形変換

線形変換とはケットベクトル $|a\rangle$ をもう一つのケットベクトル $\hat{X}|a\rangle$ へと変換する操作 $\hat{X}$ で

$$\hat{X}(|a\rangle + |b\rangle) = \hat{X}|a\rangle + \hat{X}|b\rangle \qquad \hat{X}(\lambda|a\rangle) = \lambda\hat{X}|a\rangle \tag{6}$$

を満たすものをいう。

(5) 線形変換の行列表現

$X_{ij} = \langle e_i|\hat{X}|e_j\rangle$ を並べて

$$\hat{X} \overset{e}{=} \begin{bmatrix} X_{11} & \cdots & X_{1n} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ X_{n1} & \cdots & X_{nn} \end{bmatrix} \tag{7}$$

と表し，右辺を基底 e による $\hat{X}$ の**行列表現**という。

(6) 線形変換のエルミート共役

行列表現が

$$\begin{bmatrix} X_{11}^* & \cdots & X_{n1}^* \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ X_{1n}^* & \cdots & X_{nn}^* \end{bmatrix} \tag{8}$$

で与えられるような線形変換を $\hat{X}^\dagger$ と表し，これを $\hat{X}$ の**エルミート共役**という。

(7) エルミート変換とユニタリ変換

$\hat{X}^\dagger = \hat{X}$ を満たす線形変換 $\hat{X}$ を**エルミート変換**という。また，$\hat{X}^\dagger = \hat{X}^{-1}$ を満たす線形変換 $\hat{X}$ を**ユニタリ変換**という。

(8) 正射影

$|e_i\rangle\langle e_i|$ を e_i 軸への**正射影**という。このとき，$|e_i\rangle\langle e_i|a\rangle = a_i|e_i\rangle$ である。

(9) 完全性関係

等式

$$\hat{I} = \sum_{i=1}^{n} |e_i\rangle\langle e_i| \tag{9}$$

が成り立つ。ここで，$\hat{I}$ は恒等変換である。上式を**完全性関係**という。

(10) 固有値・固有ベクトル
$\hat{X}|p_i\rangle = \xi_i|p_i\rangle$ を満たす複素数 ξ_i および零ベクトルでない $|p_i\rangle$ が存在するとき，ξ_i を $\hat{X}$ の**固有値**，$|p_i\rangle$ を固有値 ξ_i に属する**固有ベクトル**という。

(11) 対角化可能な線形変換
$\hat{X}$ の固有ベクトルからなる基底 $p = \{|p_1\rangle, \cdots, |p_n\rangle\}$ をとれるとき，$\hat{X}$ は**対角化可能**であるという。つまり，基底 p による $\hat{X}$ の行列表現は対角行列

$$\hat{X} \stackrel{p}{=} \begin{bmatrix} \xi_1 & & O \\ & \ddots & \\ O & & \xi_n \end{bmatrix} \tag{10}$$

となる。

(12) 同時対角化可能な線形変換
$\hat{X}$ と $\hat{Y}$ の**交換子**を $[\hat{X}, \hat{Y}] = \hat{X}\hat{Y} - \hat{Y}\hat{X}$ によって定義する。$[\hat{X}, \hat{Y}] = 0$ ならば，$\hat{X}$ と $\hat{Y}$ は**同時対角化可能**である。つまり，$\hat{X}$ と $\hat{Y}$ の共通の固有ベクトルからなる基底をとることができる。

(13) 正規変換
$[\hat{X}, \hat{X}^\dagger] = 0$ を満たす線形変換 $\hat{X}$ を**正規変換**という。正規変換の場合，その固有ベクトルからなる正規直交基底をとることができる。エルミート変換，ユニタリ変換は正規変換である。

(14) 正規変換のスペクトル分解
正規変換 $\hat{X}$ は

$$\hat{X} = \sum_{i=1}^{n} \xi_i |p_i\rangle\langle p_i| \tag{11}$$

と表すことができる。これを $\hat{X}$ の**スペクトル分解**という。このとき，

$$\hat{X}^\dagger = \sum_{i=1}^{n} \xi_i^* |p_i\rangle\langle p_i| \tag{12}$$

である。また，$\hat{X}$ が逆変換をもつならば，

$$\hat{X}^{-1} = \sum_{i=1}^{n} \frac{1}{\xi_i} |p_i\rangle\langle p_i| \tag{13}$$

である。