

## 2 Introduction to Quantum Mechanics

### 2.1 Linear algebra

**Exercise 2.1:(Linear dependence: example)** Show that  $(1, -1)$ ,  $(1, 2)$  and  $(2, 1)$  are linearly dependent.

proof:

$$a_1 \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix} + a_2 \begin{pmatrix} 1 \\ 2 \end{pmatrix} + a_3 \begin{pmatrix} 2 \\ 1 \end{pmatrix} = 0, (a_1, a_2, a_3 \in \mathbb{C}) \quad (1)$$

とする。

この解の組  $(a_1, a_2, a_3)$  は  $t \in \mathbb{C}$  を任意の複素数として、

$$(a_1, a_2, a_3) = (t, t, -t) \quad (2)$$

と表すことが出来る。問題の三つのベクトルが一次独立であれば、 $(a_1, a_2, a_3) = (0, 0, 0)$  のみが解となるため不適。よって一次従属である。

**Exercise 2.2: (Matrix representations: example)** Suppose  $V$  is a vector space with basis vectors  $|0\rangle$  and  $|1\rangle$ , and  $A$  is a linear operator from  $V$  to  $V$  such that  $A|0\rangle = |1\rangle$  and  $A|1\rangle = |0\rangle$ . Give a matrix representation for  $A$ , with respect to the input basis  $|0\rangle, |1\rangle$ , and the output basis  $|0\rangle, |1\rangle$ . Find input and output bases which give rise to a different matrix representation of  $A$ .

proof:  $V$  の基底  $\{|v_1\rangle = |0\rangle, |v_2\rangle = |1\rangle\}$  に対して演算子  $A: V \rightarrow V$  は、

$$\begin{aligned} A|v_1\rangle &= 0|v_1\rangle + 1|v_2\rangle, \\ A|v_2\rangle &= 1|v_1\rangle + 0|v_2\rangle \end{aligned}$$

という作用をする。

定義より、演算子  $A: V \rightarrow W$  において、 $V$  の基底を  $\{|v_1\rangle, \dots, |v_n\rangle\}$ ,

$W$  の基底を  $\{|w_1\rangle, \dots, |w_m\rangle\}$

とすれば、 $A$  の行列表現における  $(i, j)$  成分  $A_{ij}$  は

$$A|v_j\rangle = \sum_i A_{ij} |w_i\rangle \quad (1)$$

と定義されている。故に

$$A_{11} = 0, A_{12} = 1, A_{21} = 1, A_{22} = 0.$$

すなわち、

$$A = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}.$$

復習 1:(表現行列の定義) 線形写像  $f: V \rightarrow W$  において、 $V$  の基底を  $\{v_1, \dots, v_n\}$ ,  $W$  の基底を  $\{w_1, \dots, w_m\}$  とする。

ここで、任意の  $j(1 \leq j \leq n)$  について、 $f(v_j) = \sum_{i=1}^m a_{ij} w_i$  とする。

( $f: V \rightarrow W$  より、任意の  $j(1 \leq j \leq n)$  について  $f(v_j)$  は  $W$  の基底  $\{w_1, \dots, w_m\}$  の線型結合で表される。) このとき行列  $A$  の  $(i, j)$  成分を  $a_{ij}$  とすれば、

$$[f(v_1), \dots, f(v_n)] = [w_1, \dots, w_m]A \quad (1)$$

というような便宜的表記をすることができる。この行列  $A$  を  $f$  の表現行列という。

この表現行列の便利な点

$V$  の基底を  $\{|v_1\rangle, \dots, |v_n\rangle\}$  とすると、 $V$  の任意の元  $v$  は  $v = \sum_{j=1}^n x_j v_j, (\forall j, x_j \in \mathbb{C})$  として表すことが出来る。

$$f(v) = f\left(\sum_{j=1}^n x_j v_j\right) = \sum_{j=1}^n x_j f(v_j) = \sum_{j=1}^n x_j \sum_{i=1}^m a_{ij} w_i = \sum_{j=1}^n \sum_{i=1}^m x_j a_{ij} w_i = \sum_{i=1}^m \left(\sum_{j=1}^n a_{ij} x_j\right) w_i \quad (2)$$

ここで、

$$x = \begin{pmatrix} x_1 \\ \vdots \\ x_n \end{pmatrix}$$

とすると、 $\sum_{j=1}^n a_{ij} x_j$  は  $(m, 1)$  ベクトル  $Ax$  の  $i$  成分となる。

ここで特に (2) において、

$$f(v) = \sum_{j=1}^n x_j f(v_j) = \sum_{i=1}^m \left(\sum_{j=1}^n a_{ij} x_j\right) w_i \quad (3)$$

が成立していることに注意すると、(1) の表記を用いて

$$[f(v)] = [f(v_1), \dots, f(v_n)]x = [w_1, \dots, w_m]Ax \quad (4)$$

と表すことが出来る。すなわち、 $V$  の基底  $\{v_1, \dots, v_n\}$  に対する  $v$  の係数ベクトル  $x$  で  $W$  の基底  $\{w_1, \dots, w_m\}$  の係数を  $Ax$  と表すことが出来る。これが表現行列の便利な点である。

### Exercise 2.3: (Matrix representation for operator products)

Suppose  $A$  is a linear operator from vector space  $V$  to vector space  $W$ , and  $B$  is a linear operator from vector space  $W$  to vector space  $X$ . Let  $|v_i\rangle$ ,  $|w_j\rangle$  and  $|x_k\rangle$  be bases for the vector spaces  $V, W$ , and  $X$ , respectively.

Show that the matrix representation for the linear transformation  $BA$  is the matrix product of the matrix representations for  $B$  and  $A$ , with respect to the appropriate bases.

proof:

$V, W, X$  の次元をそれぞれ  $n, m, l$  とし、基底をそれぞれ  $\{|v_1\rangle, \dots, |v_n\rangle\}$ ,  $\{|w_1\rangle, \dots, |w_m\rangle\}$ ,  $\{|x_1\rangle, \dots, |x_l\rangle\}$  とする。

このとき  $A, B$  について行列表現の定義より、任意の  $i, (1 \leq i \leq n), j, (1 \leq j \leq m)$  において、

$$A|v_i\rangle = \sum_{j=1}^m a_{ji} |w_j\rangle, \quad (1)$$

$$B|w_j\rangle = \sum_{k=1}^l b_{kj} |x_k\rangle \quad (2)$$

と表すことが出来る。これより、

$$\begin{aligned} (BA)|v_i\rangle &= B(A|v_i\rangle) \\ &= B\left(\sum_{j=1}^m a_{ji} |w_j\rangle\right) \\ &= \sum_{j=1}^m a_{ji} B|w_j\rangle \\ &= \sum_{j=1}^m \sum_{k=1}^l a_{ji} b_{kj} |x_k\rangle \\ &= \sum_{k=1}^l \left(\sum_{j=1}^m b_{kj} a_{ji}\right) |x_k\rangle. \end{aligned}$$

これより、演算子  $BA: V \rightarrow X$  の行列表現の  $(k, i)$  成分は  $\sum_{j=1}^m b_{kj} a_{ji}$  と表され、これは  $A, B$  それぞれの行列表現による行列の積の  $(k, i)$  成分に等しい。

**Exercise 2.4: (Matrix representation for identity)** Show that the identity operator on a vector space  $V$  has a matrix representation which is one along the diagonal and zero everywhere else, if the matrix representation is taken with respect to the same input and output bases. This matrix is known as the identity matrix.

proof: ベクトル空間  $V$  の基底を  $\{|v_1\rangle, \dots, |v_n\rangle\}$ ,  $V$  上の identity operator を  $I$  とする。このとき、任意の  $j, (1 \leq j \leq n)$  について

$$\begin{aligned} I|v_j\rangle &= \sum_{i=1}^n a_{ij} |v_i\rangle \\ &= |v_j\rangle. \end{aligned}$$

すなわち、

$$a_{ij} = \begin{cases} 1 & (i = j) \\ 0 & (i \neq j) \end{cases}$$

このような数を  $(i, j)$  成分に持つ行列は、対角成分が 1 でその他が 0 の行列である。

**Exercise 2.5:** Verify that  $(\cdot, \cdot)$  just defined is an inner product on  $\mathbb{C}^n$ .

**Exercise 2.6:** Show that any inner product  $(\cdot, \cdot)$  is conjugate-linear in the first argument ,

$$\left(\sum_i \lambda_i |w_i\rangle, |v\rangle\right) = \sum_i \lambda_i^* (|w_i\rangle, |v\rangle). \quad (1)$$

proof: 内積の定義 (本文 p.65) より、

$$(|v\rangle, \sum_i \lambda_i |w_i\rangle) = \sum_i \lambda_i (|v\rangle, |w_i\rangle), \quad (2)$$

$$(|v\rangle, |w\rangle) = (|w\rangle, |v\rangle)^*. \quad (3)$$

ゆえに、

$$\begin{aligned} \left(\sum_i \lambda_i |w_i\rangle, |v\rangle\right) &= \left(\sum_i \lambda_i |w_i\rangle, |v\rangle\right)^{**} \\ &= \left(\left(\sum_i \lambda_i |w_i\rangle, |v\rangle\right)^*\right)^* \\ &= (|v\rangle, \sum_i \lambda_i |w_i\rangle)^* \\ &= \left(\sum_i \lambda_i (|v\rangle, |w_i\rangle)\right)^* \\ &= \sum_i \lambda_i^* (|v\rangle, |w_i\rangle)^* \\ &= \sum_i \lambda_i^* (|w_i\rangle, |v\rangle). \end{aligned}$$

ゆえに、内積は第一引数に関して反線型 (conjugate-linear) である。

## 復習 2(内積演算子、外積表現)

(内積演算子):標準的な量子力学における内積  $(|v\rangle, |w\rangle)$  の表記は  $\langle v|w\rangle$  であり、 $\langle v|$  はベクトル  $|v\rangle$  の双対ベクトルを表す; 双対ベクトルとは、内積を有するベクトル空間  $V$  から  $\mathbb{C}$  への線型演算子であり、 $\langle v|(|w\rangle) \equiv \langle v|w\rangle \equiv (|v\rangle, |w\rangle)$  として定義される。

(外積表現): $|v\rangle, |w\rangle$  をそれぞれ内積ベクトル空間  $V, W$  のベクトルとする。このとき  $|w\rangle\langle v|$  を  $V$  から  $W$  への線型演算子として次式で定義する。

$$(|w\rangle\langle v|)(|v'\rangle) \equiv |w\rangle\langle v|v'\rangle = \langle v|v'\rangle |w\rangle.$$

$|i\rangle, (1 \leq i \leq n)$  をベクトル空間  $V$  の任意の正規直交基底とする。このとき任意のベクトル  $|v\rangle$  は  $v_i \in \mathbb{C}, (1 \leq i \leq n)$  を用いて  $|v\rangle = \sum_i v_i |i\rangle$  と表すことが出来る。 $\langle i|v\rangle = v_i$  であることに注意すると、

$$(\sum_i |i\rangle\langle i|)|v\rangle = \sum_i |i\rangle\langle i|v\rangle = \sum_i v_i |i\rangle = |v\rangle.$$

ゆえに

$$\sum_i |i\rangle\langle i| = I.$$

これは、正規直交基底による *completeness relation* として知られている。これを応用することで任意の線型演算子を外積表現で表すことが出来る。

$A: V \rightarrow W$  を線型演算子、 $|v_i\rangle$  を  $V$  の正規直交基底、 $|w_j\rangle$  を  $W$  の正規直交基底とする。このとき、

$$\begin{aligned} A &= I_W A I_V \\ &= \sum_{ij} |w_j\rangle\langle w_j| A |v_i\rangle\langle v_i| \\ &= \sum_{ij} \langle w_j| A |v_i\rangle |w_j\rangle\langle v_i|. \end{aligned}$$

ここで、正規直交基底  $|v_k\rangle$  に対する  $A$  の作用は  $A|v_k\rangle = \sum_j \langle w_j| A |v_k\rangle |w_j\rangle$  となる。これより、 $A$  の基底  $|v_i\rangle, |w_j\rangle$  に対する表現行列の  $(i, j)$  成分を  $a_{ij}$  とすれば

$$a_{ij} = \langle w_i| A |v_j\rangle$$

となる。

**Exercise 2.7:** Verify that  $|w\rangle \equiv (1, 1)$  and  $|v\rangle \equiv (1, -1)$  are orthogonal. What are the normalized forms of these vectors?

proof:

$$\langle w|v\rangle = 1 \times 1 + 1 \times (-1) = 0.$$

ゆえに  $|w\rangle, |v\rangle$  は直交している。また、ベクトル  $|v\rangle$  の正規化ベクトル  $|v'\rangle$  は、

$$|v'\rangle \equiv \frac{|v\rangle}{\sqrt{\langle v|v\rangle}} \quad (1)$$

で与えられる。

ゆえに、 $|w\rangle, |v\rangle$  それぞれの正規化ベクトル  $|w'\rangle, |v'\rangle$  は

$$\begin{aligned} |w'\rangle &\equiv \frac{|w\rangle}{\sqrt{\langle w|w\rangle}} \\ &= \frac{(1, 1)}{\sqrt{1 \cdot 1 + 1 \cdot 1}} \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}}(1, 1), \\ |v'\rangle &\equiv \frac{|v\rangle}{\sqrt{\langle v|v\rangle}} \\ &= \frac{(1, -1)}{\sqrt{1 \cdot 1 + (-1) \cdot (-1)}} \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}}(1, -1). \end{aligned}$$

**Exercise 2.8:** Prove that the Gram-Schmidt procedure produces an orthonormal basis for  $V$ .

proof: 帰納法による。内積を有するベクトル空間  $V$  において、 $|w_1\rangle, \dots, |w_d\rangle$  を基底集合とする。p.66 のグラム・シュミットの正規直交化法により、正規直交基底集合  $|v_1\rangle, \dots, |v_d\rangle$  を作る。このとき、

$$|v_1\rangle = \frac{|w_1\rangle}{\| |w_1\rangle \|}. \quad (1)$$

ゆえに、同じベクトル同士の内積が実数かつ負でないことに注意すれば、

$$\begin{aligned} \langle v_1|v_1\rangle &= \frac{1}{\| |w_1\rangle \|^2} \langle w_1|w_1\rangle \\ &= \frac{1}{\| \sqrt{\langle w_1|w_1\rangle} \|^2} \langle w_1|w_1\rangle \\ &= 1. \end{aligned}$$

これより、 $|v_k\rangle, (1 \leq k \leq d)$  において、 $k=1$  のとき  $\{|v_1\rangle\}$  の元は正規かつ直交している。(実際は元が一つしかないため直交していると考えにくい、詳しく言えば、 $\{|v_1\rangle\}$  の任意の元  $|i\rangle, |j\rangle$  について

$$\langle i|j\rangle = \delta_{ij}$$

が成立しているということである。)

ここで、 $k=n$  のときまでグラムシュミットの正規直交化法を行ったことによる集合  $\{|v_1\rangle, \dots, |v_n\rangle\}$  が正規

直交基底集合となっているとする。このとき、 $|v_{n+1}\rangle$  を

$$|v_{n+1}\rangle \equiv \frac{|w_{n+1}\rangle - \sum_{i=1}^n \langle v_i | w_{n+1} \rangle |v_i\rangle}{\| |w_{n+1}\rangle - \sum_{i=1}^n \langle v_i | w_{n+1} \rangle |v_i\rangle \|} \quad (2)$$

と定義すると、任意の  $k, (1 \leq k \leq n)$  について  $\{|v_1\rangle, \dots, |v_n\rangle\}$  が正規直交基底集合となっていることから、

$$\begin{aligned} \langle v_k | v_{n+1} \rangle &= \frac{1}{\| |w_{n+1}\rangle - \sum_{i=1}^n \langle v_i | w_{n+1} \rangle |v_i\rangle \|} (\langle v_k | w_{n+1} \rangle - \sum_{i=1}^n \langle v_i | w_{n+1} \rangle \langle v_k | v_i \rangle) \\ &= \frac{1}{\| |w_{n+1}\rangle - \sum_{i=1}^n \langle v_i | w_{n+1} \rangle |v_i\rangle \|} (\langle v_k | w_{n+1} \rangle - \langle v_k | w_{n+1} \rangle) \\ &= 0. \end{aligned}$$

また、 $\langle v_{n+1} | v_{n+1} \rangle = 1$  は定義 (2) より明らかである。ゆえに  $\{|v_1\rangle, \dots, |v_{n+1}\rangle\}$  は正規直交基底集合である。すなわちこのようにして作られた基底集合  $\{|v_1\rangle, \dots, |v_d\rangle\}$  は正規直交基底集合をなす。