＜ベクトルと行列＞

1

数学の復習 → 量子力学の記号 (Dirac 記号)

§ ベクトル

ket vector

$$|\varphi\rangle = \begin{pmatrix} \varphi_1 \\ \varphi_2 \\ \vdots \\ \varphi_D \end{pmatrix} \quad (1)$$

$\varphi_j \in \mathbb{C}$

D: 次元

ket phi
phi ket

$\alpha, \beta \in \mathbb{C}$ $\quad \alpha|\varphi\rangle + \beta|\psi\rangle$ も ket vector

bra vector

エルミート共役

$$|\varphi\rangle^\dagger = (\varphi_1^*, \varphi_2^*, \cdots, \varphi_D^*) \quad (2)$$

を $\langle\varphi|$ と書く

$$|\varphi\rangle \longleftrightarrow \langle\varphi| \quad (3)$$

同じ情報

注) $$(\alpha|\varphi\rangle + \beta|\psi\rangle)^\dagger = \alpha^*\langle\varphi| + \beta^*\langle\psi| \quad (4)$$

内積

$|\varphi\rangle$ と $|\psi\rangle$ の内積

$|\varphi\rangle \to \langle\varphi|$ とひっくり返して、並べる

$$\underbrace{\langle\varphi|}_{\text{bra}}\underbrace{\psi\rangle}_{\text{ket}} = (\varphi_1^*, \cdots, \varphi_D^*)\begin{pmatrix}\psi_1\\ \vdots \\ \psi_D\end{pmatrix} = \sum_{j=1}^{D} \varphi_j^* \psi_j \qquad (1)$$

bra ket ⇒ bracket (かっこ)

内積の性質

$$\langle\varphi|\psi\rangle^* = \langle\psi|\varphi\rangle \qquad (2)$$

$$\langle\varphi|\varphi\rangle = \sum_{j=1}^{D} |\varphi_j|^2 \geq 0 \qquad (3)$$

ノルム(ベクトルの大きさ)

$$\underbrace{\||\varphi\rangle\|}_{=\|\varphi\|} := \sqrt{\langle\varphi|\varphi\rangle} \qquad (4)$$

$\|\varphi\|$ とも書く.

$|\varphi\rangle \neq 0$, $|\psi\rangle \neq 0$ で $\langle\varphi|\psi\rangle = 0$ なら
「$|\varphi\rangle$ と $|\psi\rangle$ は直交する」という. (5)

注) $\alpha|\varphi\rangle+\beta|\psi\rangle$ と $\gamma|\xi\rangle+\delta|\eta\rangle$ の内積

$$\{\alpha^*\langle\varphi|+\beta^*\langle\psi|\}\{\gamma|\xi\rangle+\delta|\eta\rangle\}$$
$$=\alpha^*\gamma\langle\varphi|\xi\rangle+\alpha^*\delta\langle\varphi|\eta\rangle$$
$$+\beta^*\gamma\langle\psi|\xi\rangle+\beta^*\delta\langle\psi|\eta\rangle \quad (1)$$

正規直交基底

D個のベクトルの集合

$$\{|\psi_1\rangle,\dots,|\psi_D\rangle\}$$

$$\boxed{\langle\psi_j|\psi_k\rangle=\delta_{j,k}} \quad (j,k=1,2,\dots,D) \quad (2)$$

任意の$|\varphi\rangle$を

$$|\varphi\rangle=\sum_{j=1}^{D}\alpha_j|\psi_j\rangle$$ と展開できる (3)

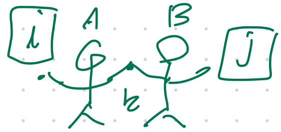
係数は $\alpha_j=\langle\psi_j|\varphi\rangle$ (4)

§行列

行列

$$A = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1D} \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2D} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{D1} & a_{D2} & \cdots & a_{DD} \end{pmatrix} \qquad a_{ij} \in \mathbb{C} \tag{1}$$

Aの i,j 成分 $(A)_{ij} = a_{ij}$ (2)



▷ $\alpha A + \beta B$ も行列

▷ AB も行列 $$(AB)_{ij} = \sum_{k=1}^{D} (A)_{ik} (B)_{kj} \tag{3}$$

▷ エルミート共役 $A^\dagger$

$$(A^\dagger)_{ij} = ((A)_{ji})^* \tag{4}$$

転置して
複素共役

$$(AB)^\dagger = B^\dagger A^\dagger \tag{5}$$

行列とベクトルの積

$$\boxed{A|\varphi\rangle = \begin{pmatrix} a_{11} & \cdots & a_{1D} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{D1} & \cdots & a_{DD} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \varphi_1 \\ \vdots \\ \varphi_D \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \sum a_{1j}\varphi_j \\ \vdots \\ \sum a_{Dj}\varphi_j \end{pmatrix}} \quad (1)$$

$\underbrace{A|\varphi\rangle}$ → これも ket vector

$$\boxed{\langle\varphi|A = (\varphi_1^*, \cdots, \varphi_D^*) \begin{pmatrix} a_{11} & \cdots & a_{1D} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{D1} & \cdots & a_{DD} \end{pmatrix} = \left(\sum_i \varphi_i^* a_{i1}, \cdots, \sum_i \varphi_i^* a_{iD}\right)} \quad (2)$$

$\underbrace{\langle\varphi|A}$ → これも bra vector

$$\boxed{\langle\varphi|A|\psi\rangle = \sum_{j,k=1}^{D} \varphi_j^* (A)_{jk} \psi_k} \quad (3)$$

$\underbrace{\langle\varphi|A|\psi\rangle}$ →

$\langle\varphi|$ と $A|\psi\rangle$

$\langle\varphi|A$ と $|\psi\rangle$

} どちらと思ってもよい

$$\boxed{(A|\psi\rangle)^\dagger = \langle\psi|A^\dagger} \quad (1)$$

なぜか？

$|\xi\rangle = A|\psi\rangle$ とする (2)

成分は

$$(|\xi\rangle)_k = \sum_i a_{ki}\psi_i \quad (3)$$

$$(\langle\xi|)_k = \left(\sum_i a_{ki}\psi_i\right)^* = \sum_i \psi_i^* a_{ki}^* = \sum_i \psi_i^* (A^\dagger)_{ik} \quad (4) \quad //$$

$\langle\varphi|\xi\rangle^* = \langle\xi|\varphi\rangle$ (5) より

$$\boxed{\langle\varphi|A|\psi\rangle^* = \langle\psi|A^\dagger|\varphi\rangle} \quad (6)$$

P5-(3) からも直接にでる.

エルミート行列

$A^\dagger = A$ をみたす行列

定理: A をエルミート行列とする。
正規直交基底 $\{|\psi_1\rangle, \cdots, |\psi_D\rangle\}$ として

$$A|\psi_j\rangle = a_j|\psi_j\rangle \quad (1)$$

をみたすものがとれる。

固有値 $a_j \in \mathbb{R}$　固有ベクトル

$$[A, B] = AB - BA \ (\text{交換子}) \quad (2)$$

定理: A, B を $[A, B] = 0$ をみたすエルミート行列とする。
正規直交基底 $\{|\psi_1\rangle, \cdots, |\psi_D\rangle\}$ として

$$A|\psi_j\rangle = a_j|\psi_j\rangle, \quad B|\psi_j\rangle = b_j|\psi_j\rangle \quad (3)$$

をみたすものがとれる。

$a_j, b_j \in \mathbb{R}$　同時固有ベクトル

ユニタリー行列

$$U^\dagger U = I \quad (1)$$ をみたす行列

単位行列

U と $U^\dagger$ は互いに逆行列 → $UU^\dagger = I \quad (2)$

任意のベクトル $|\varphi\rangle$

$$\| U|\varphi\rangle \| = \sqrt{\langle\varphi| \underbrace{U^\dagger U}_{= I} |\varphi\rangle} = \sqrt{\langle\varphi|\varphi\rangle}$$

$$= \| |\varphi\rangle \| \quad (3)$$

ユニタリー行列で変換しても
ベクトルの大きさは不変。

クロネッカー積

$$|\varphi\rangle\langle\psi| = \begin{pmatrix} \varphi_1 \\ \vdots \\ \varphi_D \end{pmatrix} (\psi_1^*, \cdots, \psi_D^*)$$

$$= \begin{pmatrix} \varphi_1\psi_1^* & \varphi_1\psi_2^* & \cdots & \varphi_1\psi_D^* \\ \varphi_2\psi_1^* & \varphi_2\psi_2^* & & \varphi_2\psi_D^* \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \varphi_D\psi_1^* & \varphi_D\psi_2^* & \cdots & \varphi_D\psi_D^* \end{pmatrix} \quad (1)$$

成分表示 $(|\varphi\rangle\langle\psi|)_{ij} = \varphi_i \psi_j^*$ (2)

行列 $|\varphi\rangle\langle\psi|$ をベクトル $|\xi\rangle$ にかける

$$(|\varphi\rangle\langle\psi|)|\xi\rangle = |\varphi\rangle\underbrace{\langle\psi|\xi\rangle}_{\text{内積とみなせる}} \quad (3)$$

$\langle\xi|$ に $|\varphi\rangle\langle\psi|$ をかける

$$\langle\xi|(|\varphi\rangle\langle\psi|) = \underbrace{\langle\xi|\varphi\rangle}_{\text{内積とみなせる}}\langle\psi| \quad (4)$$

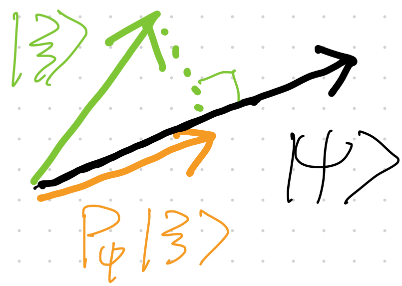
また $(|\psi\rangle\langle\psi|)^\dagger = |\psi\rangle\langle\varphi|$ (1)

任意のベクトル $|\psi\rangle$, $\||\psi\rangle\| = 1$

$P_\psi = |\psi\rangle\langle\psi|$ は $|\psi\rangle$ 方向への射影行列 (2)

$|\xi\rangle$ 任意のベクトル

$P_\psi |\xi\rangle = \underset{\downarrow\ |\psi\rangle に平行}{|\psi\rangle} \underbrace{\langle\psi|\xi\rangle}_{係数}$ (3)



$P_\psi^\dagger = P_\psi$, (4) $(P_\psi)^2 = |\psi\rangle\langle\psi|\psi\rangle\langle\psi| = |\psi\rangle\langle\psi| = P_\psi$ (5)

参考: 一般に $P^\dagger = P$, $P^2 = P$ をみたす行列を射影行列.

正規直交基底の完全性

任意の正規直交基底 $\{|\psi_1\rangle, \cdots, |\psi_D\rangle\}$

任意のベクトル $|\varphi\rangle$

$\alpha_j = \langle\psi_j|\varphi\rangle$

$$|\varphi\rangle = \sum_{j=1}^{D} |\psi_j\rangle \alpha_j = \sum_{j=1}^{D} |\psi_j\rangle\langle\psi_j|\varphi\rangle$$

$$= \left(\sum_{j=1}^{D} |\psi_j\rangle\langle\psi_j|\right)|\varphi\rangle \qquad (1)$$

$|\varphi\rangle$が任意だから

$$\boxed{\sum_{j=1}^{D} |\psi_j\rangle\langle\psi_j| = I} \qquad (2)$$

すごく便利な表式!

応用　A エルミート行列

$A|\psi_j\rangle = a_j|\psi_j\rangle$ となる $\{|\psi_1\rangle, \cdots, |\psi_D\rangle\}$

$$A = AI = A\sum_{j=1}^{D}|\psi_j\rangle\langle\psi_j|$$

$$= \sum_{j=1}^{D} A|\psi_j\rangle\langle\psi_j| = \sum_{j=1}^{D} a_j|\psi_j\rangle\langle\psi_j| \quad (1)$$

$$\boxed{A = \sum_{j=1}^{D} a_j|\psi_j\rangle\langle\psi_j|} \quad (2)$$

A のスペクトル分解