デモ

2025 年 1 月 17 日

なぜ線形代数？

量子力学の基本方程式

量子力学の基本方程式といえば？

量子力学の基本方程式

量子力学の基本方程式といえば？

シュレーディンガー方程式

$$\left[\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2}+\frac{\partial^2}{\partial y^2}+\frac{\partial^2}{\partial z^2}\right)+V(\boldsymbol{r})\right]\psi(\boldsymbol{r})=E\psi(\boldsymbol{r}) \tag{*1}$$

量子力学の基本方程式

量子力学の基本方程式といえば？

シュレーディンガー方程式

$$\left[\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2}+\frac{\partial^2}{\partial y^2}+\frac{\partial^2}{\partial z^2}\right)+V(\boldsymbol{r})\right]\psi(\boldsymbol{r})=E\psi(\boldsymbol{r}) \tag{*1}$$

(*1) の解を $\psi(\boldsymbol{r}), \varphi(\boldsymbol{r})$ とすると，任意の複素数 a, b に対して，

$$\xi(\boldsymbol{r}) := a\psi(\boldsymbol{r}) + b\varphi(\boldsymbol{r}) \quad （a, b \text{ は複素数}）$$

は (*1) の解になっている．

量子力学の基本方程式

量子力学の基本方程式といえば？

シュレーディンガー方程式

$$\left[\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2}+\frac{\partial^2}{\partial y^2}+\frac{\partial^2}{\partial z^2}\right)+V(\boldsymbol{r})\right]\psi(\boldsymbol{r})=E\psi(\boldsymbol{r}) \tag{*1}$$

(*1) の解を $\psi(\boldsymbol{r}), \varphi(\boldsymbol{r})$ とすると，任意の複素数 a, b に対して，

$$\xi(\boldsymbol{r}) \coloneqq a\psi(\boldsymbol{r}) + b\varphi(\boldsymbol{r}) \quad (a, b \text{ は複素数})$$

は (*1) の解になっている．

$\Longrightarrow$ (*1) **は線型方程式**．

数学的には・・・

方程式 (*1) の解 $\psi(\boldsymbol{r})$ 全体は，**ベクトル空間**をなす．

ベクトル空間とは

数ベクトル

$$\boldsymbol{x} = \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix} \quad (x_1, x_2, x_3 \text{ は複素数})$$

とする．

このとき，

$$a\boldsymbol{x} + b\boldsymbol{y} = \begin{pmatrix} ax_1 + by_1 \\ ax_2 + by_2 \\ ax_3 + by_3 \end{pmatrix}$$

もベクトル．

ベクトル空間とは（つづき）

ふつうの縦ベクトルについて考えれば当たり前のこと：

ベクトル空間の公理

ψ, φ, ξ を**ベクトル**，a, b, c を**スカラー**（複素数）とする．

1. $(\psi + \varphi) + \xi = \psi + (\varphi + \xi)$
2. $\psi + \mathbf{0} = \mathbf{0} + \psi = \psi$
3. $\psi + (-\psi) = \mathbf{0}$
4. $\psi + \varphi = \varphi + \psi$
5. $c(\psi + \varphi) = c\psi + c\varphi$
6. $(a + b)\psi = a\psi + b\psi$
7. $(ab)\psi = a(b\psi)$
8. $1\psi = \psi$

逆に，1–8 を満たすものは，ぜんぶ「ベクトル」ということにする．
ベクトル全体がつくる集合を**ベクトル空間**という．

$\Longrightarrow$ 3 ページで考えた ψ もベクトル．

ベクトルの例

- N 次の縦ベクトル：$(a_1 \ a_2 \ \cdots \ a_N)$
- N 次多項式：$p(x) = a_N x^N + a_{N-1} x^{N-1} + \cdots + a_1 x + a_0$
- 線形方程式の解：$\varphi(x_1, \ldots, x_N)$

内積

縦ベクトルがもっている重要な性質：**内積**の復習．

縦ベクトルの内積

$\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y}$：$N$ 次元ベクトル

$$\langle \boldsymbol{x}, \boldsymbol{y} \rangle := \sum_{i=1}^{N} x_i^* y_i \tag{*2}$$

を**内積**という．

ベクトルの**長さ**は，

$$\|\boldsymbol{x}\| := \sqrt{\langle \boldsymbol{x}, \boldsymbol{x} \rangle} \tag{*3}$$

注意

(*3) の右辺の $\sqrt{\quad}$ の中身 ≥ 0 になるように，(*2) の x_i を複素共役にしてある．

内積 (つづき)

(*2) は次の性質を満たす．

内積の公理

ベクトル ψ, φ, ξ とスカラー（複素数）a, b について

1. $\langle \psi,\ a\varphi + b\xi \rangle = a\langle \psi, \xi \rangle + b\langle \psi, \varphi \rangle$（**線形性**）
2. $\langle \psi, \varphi \rangle = \langle \varphi, \psi \rangle^*$
3. $\langle \psi, \psi \rangle \geq 0$ であり，$\langle \psi, \psi \rangle = 0 \iff \psi = \mathbf{0}$（**正定値性**）

上の条件を満たすものを改めて「**内積**」と呼ぶことにする．

注意

1 と 2 をあわせると，$\langle a\psi + b\varphi,\ \xi \rangle = a^*\langle \psi, \xi \rangle + b^*\langle \varphi, \xi \rangle$（**反線形性**）である．

内積 (つづき)

関数 $\psi(\boldsymbol{r}), \varphi(\boldsymbol{r})$ の内積は？

基底

すべての縦ベクトル $\boldsymbol{x} = (x_1 \ x_2 \ x_3)$ は，

$$\boldsymbol{e}_1 = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \boldsymbol{e}_2 = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \boldsymbol{e}_3 = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} \tag{*5}$$

を使って，$\boldsymbol{x} = x_1\boldsymbol{e}_1 + x_2\boldsymbol{e}_2 + x_3\boldsymbol{e}_3$ と書ける．

さらに，$x_1\boldsymbol{e}_1 + x_2\boldsymbol{e}_2 + x_3\boldsymbol{e}_3 = \boldsymbol{0} \iff x_1 = x_2 = x_3 = 0$（**一次独立**）．

基底

すべての縦ベクトル $\boldsymbol{x} = (x_1\ x_2\ x_3)$ は，

$$\boldsymbol{e}_1 = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \boldsymbol{e}_2 = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \boldsymbol{e}_3 = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} \tag{*5}$$

を使って，$\boldsymbol{x} = x_1\boldsymbol{e}_1 + x_2\boldsymbol{e}_2 + x_3\boldsymbol{e}_3$ と書ける．

さらに，$x_1\boldsymbol{e}_1 + x_2\boldsymbol{e}_2 + x_3\boldsymbol{e}_3 = \boldsymbol{0} \iff x_1 = x_2 = x_3 = 0$（**一次独立**）．

同じように，**すべてのベクトル** ψ は，**一次独立**なベクトル $\chi_1, \chi_2, \ldots$ を使って

$$\chi = \sum_i c_i \chi_i \quad (c_i \text{ は複素数}) \tag{*6}$$

と書ける．

基底

すべての縦ベクトル $\boldsymbol{x} = (x_1\ \ x_2\ \ x_3)$ は，

$$\boldsymbol{e}_1 = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \boldsymbol{e}_2 = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \boldsymbol{e}_3 = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} \tag{*5}$$

を使って，$\boldsymbol{x} = x_1\boldsymbol{e}_1 + x_2\boldsymbol{e}_2 + x_3\boldsymbol{e}_3$ と書ける．

さらに，$x_1\boldsymbol{e}_1 + x_2\boldsymbol{e}_2 + x_3\boldsymbol{e}_3 = \boldsymbol{0} \iff x_1 = x_2 = x_3 = 0$（**一次独立**）．

同じように，**すべてのベクトル** ψ は，**一次独立**なベクトル $\chi_1, \chi_2, \ldots$ を使って

$$\chi = \sum_i c_i \chi_i \quad (c_i \text{ は複素数}) \tag{*6}$$

と書ける．χ_i：**基底**という．

ベクトル空間の次元

(*6) を満たす一次独立なベクトルの組 χ_i は，いくつも存在している．

例えば，(*5) のかわりに

$$\boldsymbol{e}_1' = (1\ \ 1\ \ 0), \quad \boldsymbol{e}_2' = (1\ \ {-1}\ \ 0), \quad \boldsymbol{e}_3' = (0\ \ 0\ \ \sqrt{2})$$

としてもよい．

しかし，$\chi_1, \chi_2, \ldots$ の数は同じ（上の例だと，必ず 3 つ）．

ベクトル空間がもつ基底の数を**次元**という．

同型

同型とは

- ベクトルの**数**が同じ
- **線形構造**（和とスカラー倍）が同じ

である 2 つのベクトル空間は，同じものと見なしてもよい．

同型の例

2 次多項式 $a_2x^2 + a_1x + a_0$ のベクトル空間 $\mathbb{R}[x]_2$ は，3 次元縦ベクトルの空間 $\mathbb{R}^3$ と同型．

対応

$$p(x) = a_2x^2 + a_1x + a_0 \leftrightarrow \text{縦ベクトル}\,(a_2 \;\; a_1 \;\; a_0) = \boldsymbol{a}$$
$$q(x) = b_2x^2 + b_1x + b_0 \leftrightarrow \text{縦ベクトル}\,(b_2 \;\; b_1 \;\; b_0) = \boldsymbol{b}$$

とすれば，

$$p(x) + q(x) \leftrightarrow \boldsymbol{a} + \boldsymbol{b}, \quad c \cdot p(x) \leftrightarrow c\boldsymbol{a} \;(c：\text{複素数})$$

線形演算がまったく同じ．

同型の例（つづき）

実は，基底の対応

$$x^2 \leftrightarrow \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad x \leftrightarrow \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad 1 \leftrightarrow \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix},$$

を定めるだけで，対応 $a_2x^2 + a_1x + a_0 \leftrightarrow (a_2 \ \ a_1 \ \ a_0)$ が決まる．

N 次元ベクトル空間どうしは同型

複合量子系

テンソル積

$|\psi\rangle = (a\ b)$, $|\varphi\rangle = (c\ d)$ とする．

2 状態をあわせた $|\psi\rangle|\varphi\rangle$ はどう表現する？

テンソル積

$|\psi\rangle = (a\ b)$, $|\varphi\rangle = (c\ d)$ とする．

2 状態をあわせた $|\psi\rangle|\varphi\rangle$ はどう表現する？

答え：**テンソル積**

$$|\psi\rangle \otimes |\varphi\rangle := \begin{pmatrix} a|\varphi\rangle \\ b|\varphi\rangle \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} ac \\ ad \\ bc \\ bd \end{pmatrix} \tag{*7}$$