

デモ

2025 年 1 月 18 日

なぜ線形代数？

量子力学の基本方程式といえは？

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

は (*1) の解になっている。

⇒ (*1) は線型方程式。

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

ベクトル空間って？

ユークリッド空間の例

3次元ユークリッド空間 \mathbb{R}^3 の縦ベクトル

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

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.

ユークリッド空間の例

3次元ユークリッド空間 \mathbb{R}^3 の縦ベクトル

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

とする.

このとき,

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

もベクトル.

\mathbf{x} はある意味シュレーディンガー方程式の解 ψ に似ている.

ベクトル空間の定義

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．

$$1. (\psi + \varphi) + \xi = \psi + (\varphi + \xi)$$

$$2. \psi + \mathbf{0} = \mathbf{0} + \psi = \psi$$

$$3. \psi + (-\psi) = \mathbf{0}$$

$$4. \psi + \varphi = \varphi + \psi$$

$$5. c(\psi + \varphi) = c\psi + c\varphi$$

$$6. (a + b)\psi = a\psi + b\psi$$

$$7. (ab)\psi = a(b\psi)$$

$$8. 1\psi = \psi$$

ベクトル空間の定義

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．

⇒ 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： $\varphi(x_1, \dots, x_N)$

ユークリッド内積

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

\mathbf{x}, \mathbf{y} : N 次元ベクトル

$$\langle \mathbf{x}, \mathbf{y} \rangle := \sum_{i=1}^N x_i^* y_i \quad (*2)$$

を**内積**という.

ベクトルの**長さ**は,

$$\|\mathbf{x}\| := \sqrt{\langle \mathbf{x}, \mathbf{x} \rangle} \quad (*3)$$

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.

内積の定義

(*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. $\langle \psi, a\varphi + b\xi \rangle = a\langle \psi, \varphi \rangle + b\langle \psi, \xi \rangle$ (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.

では、関数 $\psi(\mathbf{r}), \varphi(\mathbf{r})$ の内積は？

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

$$\langle \psi, \varphi \rangle := \iiint \psi^*(\mathbf{r}) \varphi(\mathbf{r}) \, dx \, dy \, dz \quad (*4)$$

とすれば，前のページの性質を満たす．

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

$$\mathbf{e}_1 = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{e}_2 = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{e}_3 = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} \quad (*5)$$

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

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

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

$$\mathbf{e}_1 = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{e}_2 = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{e}_3 = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} \quad (*5)$$

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

さらに, $x_1\mathbf{e}_1 + x_2\mathbf{e}_2 + x_3\mathbf{e}_3 = \mathbf{0} \iff x_1 = x_2 = x_3 = 0$ (**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 χ_1, χ_2, \dots を使って

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

と書ける.

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

$$\mathbf{e}_1 = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{e}_2 = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{e}_3 = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} \quad (*5)$$

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

さらに, $x_1\mathbf{e}_1 + x_2\mathbf{e}_2 + x_3\mathbf{e}_3 = \mathbf{0} \iff x_1 = x_2 = x_3 = 0$ (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 χ_1, χ_2, \dots を使って

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

と書ける. χ_i : **基底**という.

(*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

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

としてもよい.

しかし, χ_1, χ_2, \dots 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.

ベクトル空間って？

同型

- ベクトルの**かず**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

$$p(x) = a_2x^2 + a_1x + a_0 \leftrightarrow \text{縦ベクトル}(a_2 \ a_1 \ a_0) = \mathbf{a}$$

$$q(x) = b_2x^2 + b_1x + b_0 \leftrightarrow \text{縦ベクトル}(b_2 \ b_1 \ b_0) = \mathbf{b}$$

とすれば,

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

線形演算がまったく同じ.

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

定理

2つの N 次元ベクトル空間は同型である.

2つのベクトル空間の基底 $\{\chi_i\}, \{\chi'_i\}$ をそれぞれ

$$\chi_1 \leftrightarrow \chi'_1, \quad \cdots, \quad \chi_N \leftrightarrow \chi'_N$$

のように対応させれば簡単に証明できる.

ベクトル空間って？

表現行列

多項式関数 $f(x) = a_2x^2 + a_1x + a_0$ を微分する： $\hat{D} := \frac{d}{dx}$.

多項式関数 $f(x) = a_2x^2 + a_1x + a_0$ を微分する： $\hat{D} := \frac{d}{dx}$.

もちろん,

$$(\hat{D}f)(x) = \frac{df}{dx} = 2a_2x + a_1$$

多項式関数 $f(x) = a_2x^2 + a_1x + a_0$ を微分する： $\hat{D} := \frac{d}{dx}$.

もちろん,

$$(\hat{D}f)(x) = \frac{df}{dx} = 2a_2x + a_1$$

ところで, 対応 $f \leftrightarrow (a_2 \ a_1 \ a_0)$ を考えると, これは

$$(\hat{D}f) \leftrightarrow \begin{pmatrix} 0 \\ 2a_2 \\ a_1 \end{pmatrix} = \underbrace{\begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 2 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}}_{\hat{D}} \begin{pmatrix} a_2 \\ a_1 \\ a_0 \end{pmatrix} \leftrightarrow f$$

と行列の計算としてかける.

多項式関数 $f(x) = a_2x^2 + a_1x + a_0$ を微分する： $\hat{D} := \frac{d}{dx}$.

もちろん,

$$(\hat{D}f)(x) = \frac{df}{dx} = 2a_2x + a_1$$

ところで, 対応 $f \leftrightarrow (a_2 \ a_1 \ a_0)$ を考えると, これは

$$(\hat{D}f) \leftrightarrow \begin{pmatrix} 0 \\ 2a_2 \\ a_1 \end{pmatrix} = \underbrace{\begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 2 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}}_D \begin{pmatrix} a_2 \\ a_1 \\ a_0 \end{pmatrix} \leftrightarrow f$$

と行列の計算としてかける.

D を **表現行列** という.

スピン系

1 粒子のスピンは, $|\uparrow\rangle$: アップスピン, $|\downarrow\rangle$: ダウンスピンの 2 次元.

1 粒子のスピンは, $|\uparrow\rangle$: アップスピン, $|\downarrow\rangle$: ダウンスピンの 2 次元.
よって, \mathbb{R}^2 と同型, 具体的には

$$|\uparrow\rangle \leftrightarrow (1 \ 0), \quad |\downarrow\rangle \leftrightarrow (0 \ 1)$$

と対応させられる.

スピン

1 粒子のスピンは、 $|\uparrow\rangle$ ：アップスピン， $|\downarrow\rangle$ ：ダウンスピンの 2 次元．
よって， \mathbb{R}^2 と同型，具体的には

$$|\uparrow\rangle \leftrightarrow (1 \ 0), \quad |\downarrow\rangle \leftrightarrow (0 \ 1)$$

と対応させられる．

スピンの重ね合わせ：

$$a|\uparrow\rangle + b|\downarrow\rangle \leftrightarrow \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix}$$

と簡潔に表現できる．

スピンの作用する演算子

スピンの作用する演算子：

- $\hat{S}_+ \cdots \hat{S}_+ |\uparrow\rangle = \mathbf{0}, \hat{S}_+ |\downarrow\rangle = |\uparrow\rangle$
- $\hat{S}_- \cdots \hat{S}_- |\uparrow\rangle = |\downarrow\rangle, \hat{S}_+ |\downarrow\rangle = \mathbf{0}$
- $\hat{S}_z \cdots \hat{S}_z |\uparrow\rangle = \frac{1}{2} |\uparrow\rangle, \hat{S}_z |\downarrow\rangle = \frac{1}{2} |\downarrow\rangle$

スピンの作用する演算子

スピンの作用する演算子：

- $\hat{S}_+ \cdots \hat{S}_+ |\uparrow\rangle = \mathbf{0}, \hat{S}_+ |\downarrow\rangle = |\uparrow\rangle$
- $\hat{S}_- \cdots \hat{S}_- |\uparrow\rangle = |\downarrow\rangle, \hat{S}_+ |\downarrow\rangle = \mathbf{0}$
- $\hat{S}_z \cdots \hat{S}_z |\uparrow\rangle = \frac{1}{2} |\uparrow\rangle, \hat{S}_z |\downarrow\rangle = \frac{1}{2} |\downarrow\rangle$

行列を使えば,

$$\begin{aligned}\hat{S}_+ : \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} &= \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix}, & \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} &= \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \\ \hat{S}_- : \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} &= \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}, & \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} &= \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix} \\ \hat{S}_z : \begin{pmatrix} \frac{1}{2} & 0 \\ 0 & \frac{1}{2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} &= \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, & \begin{pmatrix} \frac{1}{2} & 0 \\ 0 & \frac{1}{2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} &= \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}\end{aligned}$$

多粒子系の扱い方：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？

多粒子系の扱い方：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

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

多粒子系の扱い方：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

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

3 つ以上のテンソル積も, $|\psi\rangle \otimes (|\varphi\rangle \otimes |\xi\rangle)$ のようにして定義できる.

行列のテンソル積も、

$$\begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix} \otimes \underbrace{\begin{pmatrix} \alpha & \beta \\ \gamma & \delta \end{pmatrix}}_B = \begin{pmatrix} aB & bB \\ cB & dB \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a\alpha & a\beta & b\alpha & b\beta \\ a\gamma & a\delta & b\gamma & b\delta \\ c\alpha & c\beta & d\alpha & d\beta \\ c\gamma & c\delta & d\gamma & d\delta \end{pmatrix}$$

さらに、2 スピン系 $|\psi\rangle \otimes |\varphi\rangle$ に作用する演算子は、それぞれのスピンの作用する演算子 $\mathcal{O}_1, \mathcal{O}_2$ を使うと

$$(\hat{\mathcal{O}}_1 \otimes \hat{\mathcal{O}}_2)(|\psi\rangle \otimes |\varphi\rangle) = \hat{\mathcal{O}}_1|\psi\rangle \otimes \hat{\mathcal{O}}_2|\varphi\rangle$$