線型代数の復習

[A] 随伴行列 (adjoint matrix)

行列 $\underline{M}$ の随伴行列 $\underline{M}^\dagger$ ： $(\underline{M}^\dagger)_{ij} = M^*_{ji}$ $(\underline{M}\,\underline{N})^\dagger = \underline{N}^\dagger \underline{M}^\dagger$

[B] Hermite 行列

$\underline{H}^\dagger = \underline{H}$ を満たす行列。 このとき，$(\underline{H}^n)^\dagger = \underline{H}^n$

[C] unitary 行列

$\underline{U}^\dagger = \underline{U}^{-1}$ を満たす行列。 $\underline{U}, \underline{V}$ が unitary 行列 $\longrightarrow$ $\underline{U}\,\underline{V}$ も unitary 行列

[D] unitary 変換

$\underline{M}' \equiv \underline{U}^\dagger \underline{M}\,\underline{U}$

[E] Hermite 行列の性質

(a) 適当な unitary 変換により対角化可能

(b) 全ての固有値は実数

(c) 異なる固有値に属する固有ベクトルは直交

[F] 交換子と Hermite 行列の同時対角化

$[\underline{A}, \underline{B}] \equiv \underline{A}\,\underline{B} - \underline{B}\,\underline{A}$ ：交換子 (commutator)

$[\underline{A}, \underline{B}] = \underline{0} \longrightarrow$ Hermite 行列 $\underline{A}, \underline{B}$ は，ある unitary 行列 $\underline{U}$ により同時に対角化可能

[G] Hermite 行列の関数

$$f(x) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{f^{(n)}(0)}{n!} x^n$$ ：$x = 0$ で解析的な関数 $f(x)$ の Taylor 展開

$$f(\underline{H}) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{f^{(n)}(0)}{n!} \underline{H}^n$$ ：Hermite 行列 $\underline{H}$ の関数 (定義式)

$$\mathrm{e}^{i\underline{H}} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{i^n}{n!} \underline{H}^n$$ ：unitary 行列

線型代数と量子力学

[A] 波動関数の内積

$$\langle \psi_i | \psi_j \rangle \equiv \begin{cases} \displaystyle\int_{-\infty}^{\infty} \psi_i^*(x,t)\psi_j(x,t)\,\mathrm{d}x & ：無限区間 \\ \displaystyle\int_0^L \psi_i^*(x,t)\psi_j(x,t)\,\mathrm{d}x & ：[0,L]\ の周期境界条件 \end{cases}$$

[B] 随伴演算子 (adjoint operator)

演算子 $\hat{A}$ の随伴演算子 $\hat{A}^\dagger$ (定義式)： $\langle \hat{A}^\dagger \psi_i | \psi_j \rangle = \langle \psi_i | \hat{A} \psi_j \rangle$

(注： この定義では，部分積分の際に境界からの寄与が 0 となることが本質的)

[C] Hermite 演算子

$\hat{A}^\dagger = \hat{A}$ を満たす演算子　　このとき，$\langle \psi_i | \hat{A} \psi_j \rangle = \langle \hat{A} \psi_i | \psi_j \rangle \equiv \langle \psi_i | \hat{A} | \psi_j \rangle$

[D] Hermite 演算子の行列表現

ある完全規格直交系 $\{\psi_j\}$ を用いた Hermite 演算子 $\hat{A}$ の行列表現： $A_{ij} \equiv \langle \psi_i | \hat{A} | \psi_j \rangle$

行列 $\underline{A}$ の性質： $A_{ij}^* = \langle \psi_i | \hat{A} \psi_j \rangle^* = \langle \hat{A} \psi_j | \psi_i \rangle = A_{ji}$ —— Hermite 行列

[E] 量子力学と Hermite 演算子

物理量に対応した演算子は全て Hermite 演算子 $\Longrightarrow$ 期待値 $\langle \hat{A} \rangle_i \equiv \langle \psi_i | \hat{A} | \psi_i \rangle$ は実数

例： $\hat{x} \equiv x, \quad \hat{p} \equiv \dfrac{\hbar}{i}\dfrac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}, \quad \hat{H} \equiv -\dfrac{\hbar^2}{2m}\dfrac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2} + V(x)$

[F] 量子力学の行列形式

Hermite 演算子 $\hat{B}$ の固有値問題： $\hat{B}\phi_\mu(x) = b_\mu \phi_\mu(x)$

$\Updownarrow$ 完全規格直交系 $\{\psi_j\}$ による展開： $\phi_\mu(x) = \sum_j U_{j\mu}\psi_j(x)$

Hermite 行列 $B_{ij} \equiv \langle \psi_i | \hat{B} | \psi_j \rangle$ の対角化問題： $\underline{BU} = \underline{UB'}$

$[\ (\underline{B'})_{\mu\nu} = \delta_{\mu\nu} b_\mu, \quad (\underline{U})_{j\mu} = U_{j\mu}, \quad (\underline{B})_{ij} \equiv \langle \psi_i | \hat{B} | \psi_j \rangle\ ]$

[1] $\underline{U}$, $\underline{V}$ が unitary 行列ならば，積 $\underline{U}\,\underline{V}$ も unitary 行列であることを示せ。

[2] 次の Hermite 行列 $\underline{H}$ を対角化する unitary 行列 $\underline{U}$，および $\underline{H}$ の対角形を求めよ。

(i) $\underline{H} = \begin{bmatrix} 0 & i & 1 \\ -i & 0 & i \\ 1 & -i & 0 \end{bmatrix}$　　(ii) $\underline{H} = \begin{bmatrix} 3 & i & -1 \\ -i & 5 & i \\ -1 & -i & 3 \end{bmatrix}$

[3] (1) 次の Hermite 行列 $\underline{A}$，$\underline{B}$ が可換であることを示せ。

$$\underline{A} = \begin{bmatrix} 1/6 & i/3 & 5/6 \\ -i/3 & -1/3 & i/3 \\ 5/6 & -i/3 & 1/6 \end{bmatrix} \qquad \underline{B} = \begin{bmatrix} 1/3 & 2i/3 & 2/3 \\ -2i/3 & 1/3 & 2i/3 \\ 2/3 & -2i/3 & 1/3 \end{bmatrix}$$

(2) $\underline{A}$，$\underline{B}$ を同時対角化する unitary 行列 $\underline{U}$，および $\underline{A}$，$\underline{B}$ の対角形を求めよ。

[4] $\underline{H}$ が Hermite 行列のとき，$\mathrm{e}^{i\underline{H}}$ が unitary 行列であることを証明せよ。