

A 複素ベクトル空間と内積

内積

$$\langle e_i | e_j \rangle = \delta_{ij} \quad (\text{A.1})$$

によって規格直交化された N 個のベクトルの組

$$|e_1\rangle, |e_2\rangle, \dots, |e_N\rangle \quad (\text{A.2})$$

を考える。このベクトルの組と N 個の複素数 (ベクトルの成分)

$$v_1, v_2, \dots, v_N \quad (\text{A.3})$$

を用いて

$$\begin{aligned} |v\rangle &= |e_1\rangle v_1 + |e_2\rangle v_2 + \dots + |e_N\rangle v_N \\ &= \sum_{i=1}^N |e_i\rangle v_i \end{aligned} \quad (\text{A.4})$$

で与えられるベクトル $|v\rangle$ の集合 V は、ベクトルの和

$$|v\rangle + |w\rangle = \sum_{i=1}^N |e_i\rangle (v_i + w_i) \quad (\text{A.5})$$

や複素数倍

$$c|v\rangle = \sum_{i=1}^N |e_i\rangle (cv_i) \quad (\text{A.6})$$

の下で閉じており、(N 次元) 複素ベクトル空間となっている。

またふたつのベクトル $|v\rangle, |w\rangle$ の組に対し、 $\langle v|w\rangle$ を

$$\langle v|w\rangle = \sum_{i=1}^N v_i^* w_i \quad (\text{A.7})$$

と定義すれば、

(性質 1) 対称性

$$\langle v|w\rangle = (\langle w|v\rangle)^*$$

(性質 2) 正定値性

$$\langle v|v\rangle \geq 0.$$

ただし、 $\langle v|v\rangle = 0$ となるのは、 $|v\rangle = 0$ の場合のみ。

(性質 3) 線型性

$$\langle v|(a|w\rangle + b|z\rangle) = a\langle v|w\rangle + b\langle v|z\rangle$$

が成り立ち、 $\langle v|w\rangle$ は内積としての性質を持つことがわかる。内積構造を持つベクトル空間を内積空間と呼ぶ。

自乗可積分な関数 $v(\cdot)$ の集合（ヒルベルト空間）も和や複素数倍の下で閉じており、複素ベクトル空間になっていることがわかる。ヒルベルト空間における $\langle v|w \rangle$ を、式 (A.7) にならって

$$\langle v|w \rangle = \int dx v^*(x) w(x) \quad (\text{A.8})$$

と定義しよう。この内積が性質 (1~3) を満たすことは明らかであろう。つまり、ヒルベルト空間も内積空間である。式 (A.7) と式 (A.8) を比較すると、 N 次元ベクトル空間におけるベクトル $|v\rangle$ の i 番目成分 v_i には、ヒルベルト空間のベクトル $|v\rangle$ では、対応する関数 $v(\cdot)$ の座標点 x における関数値 $v(x)$ が対応することが分かる。

B エルミート行列の性質

量子力学での観測可能量に対応するエルミート演算子は、エルミート行列とよく似た性質を持っている。ここでは、2行2列のエルミート行列について、その性質をまとめることにする。一般次元の場合について拡張することは容易であろう。

B.1 行列の成分表示

2行2列の行列 A

$$A = \begin{pmatrix} A_{11} & A_{12} \\ A_{21} & A_{22} \end{pmatrix} \quad (\text{B.1})$$

を考えよう。 A_{ij} ($i, j = 1, 2$) を行列 A の成分表示と呼ぶ。成分表示を用いると、行列 A のトレースは

$$\text{tr}[A] = \sum_i A_{ii} \quad (\text{B.2})$$

と書き表すことができる。つまり、行列のトレースを取るには、その成分表示での左足と右足を揃えて和をとればよい。

次に、行列 A と同様に

$$B = \begin{pmatrix} B_{11} & B_{12} \\ B_{21} & B_{22} \end{pmatrix}, \quad (\text{B.3})$$

で与えられる行列 B を導入する。行列 A と行列 B の積の行列の成分表示は

$$(AB)_{ij} = \sum_k A_{ik} B_{kj} \quad (\text{B.4})$$

である。行列 A の成分表示の右足と行列 B の左足を揃えて和をとることによって行列の積が得られることがわかる。

以上の事実から、

$$\text{tr}[AB] = \sum_{i,j} A_{ij} B_{ji} \quad (\text{B.5})$$

が得られる。このことからトレースに関する公式

$$\text{tr}[AB] = \text{tr}[BA] \quad (\text{B.6})$$

を得るのは容易であろう。