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

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

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

$$A = \begin{pmatrix} A_{11} & A_{12} \\ A_{21} & A_{22} \end{pmatrix} \tag{B.1}$$

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

$$\mathrm{tr}\,[A] = \sum_i A_{ii} \tag{B.2}$$

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

$$B = \begin{pmatrix} B_{11} & B_{12} \\ B_{21} & B_{22} \end{pmatrix}, \tag{B.3}$$

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

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

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、

$$\mathrm{tr}[AB] = \sum_{i,j} A_{ij}B_{ji} \tag{B.5}$$

が得られる。このことからトレースに関する公式

$$\mathrm{tr}[AB] = \mathrm{tr}[BA] \tag{B.6}$$

を得るのは容易であろう。

B.2　転置・複素共輌・エルミート共輌

式 (B.1) で与えられる行列 A の転置をとったものを

$$ {}^{t}A = \begin{pmatrix} A_{11} & A_{21} \\ A_{12} & A_{22} \end{pmatrix} \tag{B.7} $$

と書くことにする。行列 ${}^{t}A$ の成分表示は

$$ ({}^{t}A)_{ij} = A_{ji} \tag{B.8} $$

で与えられる。

式 (B.1) で与えられる行列 A の各成分について複素共輌をとったものを

$$ A^* = \begin{pmatrix} A_{11}^* & A_{12}^* \\ A_{21}^* & A_{22}^* \end{pmatrix} \tag{B.9} $$

と表すことにする。その成分表示は

$$ (A^*)_{ij} = A_{ji}^* \tag{B.10} $$

で与えられる。

次に、転置と複素共輌の両方を行うことを考える。

$$ A^\dagger = \begin{pmatrix} A_{11}^* & A_{21}^* \\ A_{12}^* & A_{22}^* \end{pmatrix}. \tag{B.11} $$

行列 $A^\dagger$ を、行列 A のエルミート共輌とよぶ。その成分表示は

$$ (A^\dagger)_{ij} = A_{ji}^* \tag{B.12} $$

で与えられる。

B.3　エルミート行列

行列 A のエルミート共輌 $A^\dagger$ がもとの行列に一致する場合、つまり、

$$ A = A^\dagger \tag{B.13} $$

のとき、行列 A はエルミート行列であると呼ばれる。行列 A がエルミート行列の場合、行列 A の成分表示は

$$ A_{ij} = A_{ji}^* \tag{B.14} $$

の性質を満たす。

以下では、エルミート行列 A の固有値 a_n $(n=1,2)$ と固有ベクトル

$$ \vec{v}_n = \begin{pmatrix} v_{1n} \\ v_{2n} \end{pmatrix}, \qquad (n=1,2) \tag{B.15} $$

の満たす性質を考察しよう。固有ベクトル $\vec{v}_n$ は

$$ 1 = \sum_i v_{in}^* v_{in} \tag{B.16} $$

として規格化されているものとする。
　まず最初に、固有値方程式

$$A\vec{v}_n = a_n \vec{v}_n \tag{B.17}$$

を成分表示で書き下してみる。

$$\sum_j A_{ij} v_{jn} = a_n v_{in}. \tag{B.18}$$

式 (B.18) の両辺に v_{in}^* をかけ、i で和をとると

$$\sum_{i,j} A_{ij} v_{in}^* v_{jn} = a_n \sum_i v_{in}^* v_{in}. \tag{B.19}$$

となり、

$$a_n = \sum_{i,j} A_{ij} v_{in}^* v_{jn} \tag{B.20}$$

が得られる。ここで規格化の条件 (B.16) を用いた。式 (B.20) から、行列 A がエルミート行列のとき

$$a_n^* = a_n \tag{B.21}$$

であること、つまり、固有値が実数であることを示すことは容易である。
　次に、(B.18) の複素共軛をとって

$$\sum_j A_{ij}^* v_{jn}^* = a_n v_{in}^*. \tag{B.22}$$

としてみよう。ここで、固有値 a_n が実数であることを用いて、$a_n^* = a_n$ とした。式 (B.22) において、A がエルミート行列であることを用いると

$$\sum_j v_{jn}^* A_{ji} = v_{in}^* a_n \tag{B.23}$$

が得られることに注意しておく。
　式 (B.18) と式 (B.23) を用いると

$$\sum_{i,j} v_{in'}^* A_{ij} v_{jn} \tag{B.24}$$

をふた通りの方法で計算することができる。

$$\begin{aligned} \sum_{i,j} v_{in'}^* A_{ij} v_{jn} &= a_n \sum_i v_{in'}^* v_{in} \\ &= a_{n'} \sum_i v_{in'}^* v_{in}. \end{aligned}$$

つまり、固有値 a_n と $a_{n'}$ が等しくないとき、固有ベクトル $\vec{v}_n$ と $\vec{v}_{n'}$ は直交しているのである。固有ベクトルの規格化まで含めてこの事情を式で表すと、

$$\sum_i v_{in'}^* v_{in} = \delta_{nn'} \tag{B.25}$$

となる。この事情は、量子力学において、エルミート演算子の固有状態が正規直交していることに対応している。

次のように、固有ベクトル $\vec{v}_n$ を並べた行列 V

$$V = \begin{pmatrix} v_{11} & v_{12} \\ v_{21} & v_{22} \end{pmatrix} \tag{B.26}$$

を考えよう。行列 V のエルミート共軛は

$$V^\dagger = \begin{pmatrix} v_{11}^* & v_{21}^* \\ v_{12}^* & v_{22}^* \end{pmatrix} \tag{B.27}$$

であり、固有ベクトルの正規直交性 (B.25) を用いると、

$$V^\dagger V = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \tag{B.28}$$

であることは明らかである。つまり、行列 V の逆行列は $V^\dagger$ で与えられることがわかる。このように逆行列がもとの行列のエルミート共軛で与えられる行列をユニタリー行列と呼ぶ。

行列 V を用いれば、固有値方程式 (B.18) を

$$AV = V \begin{pmatrix} a_1 & 0 \\ 0 & a_2 \end{pmatrix} \tag{B.29}$$

のように書き直すことも可能である。この式の両辺に右から $V^\dagger$ をかけることによって

$$A = V \begin{pmatrix} a_1 & 0 \\ 0 & a_2 \end{pmatrix} V^\dagger \tag{B.30}$$

が得られることがわかる。つまり、エルミート行列 A はユニタリー行列を使って対角化できる。

最後に、$V^\dagger$ が V の逆行列であることのもうひとつの帰結

$$VV^\dagger = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \tag{B.31}$$

を考察しよう。成分表示を用いて式 (B.31) を書き直すと

$$\sum_n v_{in} v_{jn}^* = \delta_{ij} \tag{B.32}$$

が得られる。これは、量子力学においては、状態の完全性関係の式に他ならない。

B.4 量子力学との類似

以下では、エルミート行列と量子力学におけるエルミート演算子の類似点について、その固有値、固有ベクトル、固有状態に着目してまとめておく。

固有値と固有ベクトル、固有値と固有状態

$$\sum_j A_{ij} v_{jn} = a_n v_{in} \qquad \Leftrightarrow \qquad \hat{A}|u_n\rangle = a_n |u_n\rangle, \tag{B.33}$$

$$\sum_i v_{in}^* A_{ij} = a_n v_{jn} \qquad \Leftrightarrow \qquad \langle u_n|\hat{A} = \langle u_n| a_n. \tag{B.34}$$

固有ベクトルと固有状態の正規直交性

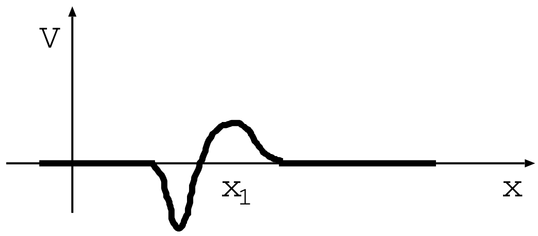
$$\sum_i v_{in'}^* v_{in} = \delta_{nn'} \qquad \Leftrightarrow \qquad \langle u_{n'}|u_n\rangle = \delta_{nn'}. \tag{B.35}$$

固有ベクトルと固有状態の完全性

$$\sum_n v_{in} v_{jn}^* = \delta_{ij} \qquad \Leftrightarrow \qquad \sum_n |u_n\rangle\langle u_n| = \hat{1}. \tag{B.36}$$

C 散乱行列 (S-行列) と転送行列 (M-行列)

1 次元量子力学での散乱について、散乱行列 (S-行列) と転送行列 (M-行列) を用いた計算手法を紹介しよう。



上図のようｒに $x = x_1$ の近傍に局在するポテンシャル V_1 を考える。つまり x_1 より十分左側あるいは十分右側の領域では、このポテンシャルは $V_1 = 0$ となっている。 1 次元量子力学の時間に依存しないシュレディンガー方程式

$$Eu = \left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + V(x) \right] u \tag{C.1}$$

を解いて、このように局在したポテンシャル $V = V_1$ による 1 次元量子力学での粒子散乱を考察してみよう。

点 $x = x_1$ より十分左側の領域ではポテンシャルは $V = 0$ であり、シュレディンガー方程式の解を

$$u = A_0 e^{ikx} + B_0 e^{-ikx}, \qquad k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} \tag{C.2}$$

と書くことができる。同様に点 $x = x_1$ より十分右側の領域でも

$$u = A_1 e^{ikx} + B_1 e^{-ikx} \tag{C.3}$$

である。

$x = x_1$ 近傍のシュレディンガー方程式を解くことができれば、式 (C.2) の解に表れる係数 A_0, B_0 と、式 (C.3) の係数 A_1, B_1 との間に線形の関係

$$\begin{pmatrix} A_0 \\ B_0 \end{pmatrix} = M_1 \begin{pmatrix} A_1 \\ B_1 \end{pmatrix} \tag{C.4}$$

をつけることができる。この式に表れる行列 M_1 を転送行列と呼ぶ。

式 (C.4) はまた、

$$\begin{pmatrix} A_1 \\ B_0 \end{pmatrix} = S \begin{pmatrix} A_0 \\ B_1 \end{pmatrix} \tag{C.5}$$