行列とエルミート演算子について[注1]

今度は，演算子 $\hat{H}$ とブラ・ケットとの関係を整理しておこう．まずブラとケットで $\hat{H}$ をはさんだものを次の積分であると定義する．すなわち

$$\langle\Phi|\hat{H}|\Psi\rangle = \int \Phi^*\hat{H}\Psi dq \tag{1}$$

である．ここで，前回と同様に Ψ および Φ を，ある関数系 $\phi_n(n=1,2,\ldots)$ で展開して，その係数で考えてみよう．つまり，Ψ および Φ に対して，

$$\Psi = \sum_{k=1} a_k\phi_k, \quad \Phi = \sum_{k=1} b_k\phi_k \tag{2}$$

これを (1) 式に代入すると，

$$\begin{aligned}
&\langle\Phi|\hat{H}|\Psi\rangle \\
&= \int \left(\sum_{j=1} b_j^*\phi_j^*\right)\hat{H}\left(\sum_{k=1} a_k\phi_k\right)dq \\
&= \sum_{j=1}\sum_{k=1} b_j^* a_k \int \phi_j^*\hat{H}\phi_k dq \\
&= \sum_{j=1}\sum_{k=1} b_j^* a_k \langle\phi_j|\hat{H}|\phi_k\rangle
\end{aligned} \tag{3}$$

となる．ここで $\langle\phi_j|\hat{H}|\phi_k\rangle$ を H_{jk} とおいて，(3) 式をよくよく見ると，次の式と同じであることが分かる (行列の積を思い出そう)．

$$\begin{pmatrix} b_1^* & b_2^* & \ldots \end{pmatrix}\begin{pmatrix} H_{11} & H_{12} & \ldots \\ H_{21} & H_{22} & \ldots \\ \vdots & & \end{pmatrix}\begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ \vdots \end{pmatrix} \tag{4}$$

この行列のかけ算の前のベクトルは $\langle\Phi|$，後ろは $|\Psi\rangle$ そのものであるので，真ん中の行列が演算子 $\hat{H}$ に対応すると考えられる．つまり

$$\hat{H} = \begin{pmatrix} H_{11} & H_{12} & \ldots \\ H_{21} & H_{22} & \ldots \\ \vdots & & \end{pmatrix} \tag{5}$$

とかける．波動関数を $|\Psi\rangle$ などのベクトルであるとすると，演算子である物理量は行列に対応する．また，(5) 式の各要素が展開に用いる関数系 $\{\phi_n\}$ によって異なるのは，ブラ・ケットベクトルの場合と同じである．このような見方をする体系を行列力学とよぶ．

さて，いま (2) 式の展開に用いた関数系 $\{\phi_n\}$ の代わりに，$\hat{H}$ の固有関数 u_n $(n=1,2,\ldots)$ をとり，その固有値を E_n $(n=1,2,\ldots)$ とすると，

$$\hat{H}u_n = E_n u_n, \quad n=1,2,\ldots \tag{6}$$

が成り立つので，

$$\begin{aligned}
H_{jk} &= \langle u_j|\hat{H}|u_k\rangle \\
&= \int u_j^*\hat{H}u_k dq \\
&= \int E_k u_j^* u_k dq \\
&= E_k\delta_{jk}
\end{aligned} \tag{7}$$

となる．つまり，$\hat{H}$ の固有関数による行列は，対角成分以外 $(j \neq k)$ は全て 0 で，対角成分はその固有値に等しい次のような行列であることが分かる．

$$\hat{H} = \begin{pmatrix} E_1 & 0 & 0 & \ldots \\ 0 & E_2 & 0 & \ldots \\ 0 & 0 & E_3 & \ldots \\ \vdots & & & \end{pmatrix} \tag{8}$$

さらに u_n が規格直交系であるとすると，それ自身の関数系 $\{u_n\}$ によって

$$|u_n\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ \vdots \\ 1(n\text{ 行目}) \\ \vdots \end{pmatrix} \tag{9}$$

となるので，(8) 式の対角行列とこの $|u_n\rangle$ を用いて，(6) 式は

$$\hat{H}|u_n\rangle = E_n|u_n\rangle \tag{10}$$

と書けることがわかる．

これらの意味するところを整理すると，何か既知の関数系 $\{\phi_n\}$ があるとき，Schrödinger 方程式

$$\hat{H}\Psi = E\Psi \tag{11}$$

を解くということは，その固有関数 u_n が $\{\phi_n\}$ でどのように表せるか，つまり，

$$u_n = \sum_k c_k\phi_k \tag{12}$$

としたときの係数 c_k を求めることに他ならない．これを行列で表すと，

$$\begin{pmatrix} H_{11} & H_{12} & \ldots \\ H_{21} & H_{22} & \ldots \\ \vdots & & \end{pmatrix}\begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \\ \vdots \end{pmatrix} = E_n\begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \\ \vdots \end{pmatrix} \tag{13}$$

となる固有ベクトルや，固有値 E_n を求めることと同じである．そのためには，上の行列を対角化するというのが線形代数学の教えるところである (線形代数学

[注1] 線形代数の苦手な人には少し敷居が高いかもしれませんが，雰囲気だけでも分かってもらえばいいと思います．詳しくはちょっと程度の高い量子力学の教科書を参照して下さい．

と量子力学という全く関係なさそうなことが実は非常に関係が深い).

さらに，関数系 $\{\phi_n\}$ から $\{u_n\}$ への変換は，ユニタリー変換とよばれ，行列 U を使って次のように表される．

$$\begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \\ \vdots \end{pmatrix} = U|u_n\rangle \tag{14}$$

少し説明が長くなるが，この U について詳しく見てみよう．まず (14) 式から，U の n 列目が上から $c_1, c_2, \ldots$ となっていることに注意しよう．つまり U の k 行 n 列の要素 U_{kn} が c_k に等しい．したがって (12) 式は

$$u_n = \sum_k U_{kn}\phi_k \tag{15}$$

となる．この式に左から ϕ_k^* をかけて積分することにより，次式が得られる．

$$U_{kn} = \langle\phi_k|u_n\rangle \tag{16}$$

同様に U の逆変換 U^{-1} を考えてみよう．$\phi_k = \sum_n d_n u_n$ となる $d_1, d_2, \ldots$ について同様に $d_n = U_{nk}^{-1}$ となっているので，(14) から (16) へ至るのと全く同様に，

$$U_{nk}^{-1} = \langle u_n|\phi_k\rangle \tag{17}$$

となるはずである．ここで，$\langle\phi_k|u_n\rangle^* = \langle u_n|\phi_k\rangle$ より，(16)，(17) 式から

$$U_{kn}^* = U_{nk}^\dagger = U_{nk}^{-1} \tag{18}$$

となる．すなわち，U のエルミート共役である $U^\dagger$ が，U の逆変換 U^{-1} に等しいことを意味している．ここで記号 † は，ブラ・ケット間の関係と同じく，複素共役をとって行と列を転置する，エルミート共役の意味である．これは，両関数系とも完全系 (テキスト p.163 参照)，である限り必ず成立する．

さて，再度ハミルトニアン $\hat{H}$ に議論を戻そう．(14) 式の左辺は固有関数 u_n を関数系 $\{\phi_k\}$ で表したものであり，右辺のベクトルは (9) にあるように u_n を $\{u_n\}$ 自身で書いたものである．k や n を省略して前者を $|\phi\rangle$，後者を $|u\rangle$ とおく．また (5) 式の行列を単に H，(8) 式の対角行列をそれと区別するため A と書くと，(10), (13), (14) 式はそれぞれ

$$A|u\rangle = E|u\rangle \tag{19}$$

$$H|\phi\rangle = E|\phi\rangle \tag{20}$$

$$U|u\rangle = |\phi\rangle \tag{21}$$

と書き直すことができる．

ここで，(19) の左辺の $|u\rangle$ を $U^{-1}U|u\rangle$ とおきかえ，さらに両辺に左から U をかけると

$$UAU^{-1}U|u\rangle = EU|u\rangle \tag{22}$$

となるが，(21) より

$$UAU^{-1}|\phi\rangle = E|\phi\rangle \tag{23}$$

と書ける．これを (20) 式と比較すると

$$H = UAU^{-1} \tag{24}$$

となっていることがわかる．つまり，$\hat{H}$ が固有値や固有関数をもつということは，行列 H が (24) 式のように，対角行列とユニタリー変換で表せることに他ならない．

次に，$\hat{H}$ のエルミート共役について考えてみよう．テキスト p.163 (A2.1) 式にエルミート共役がブラ・ケットの形で定義されているが，この定義を見てもピンと来ないかもしれない．しかし行列で表すと，H のエルミート共役とは今まで見てきたように，行列 H の各要素を複素共役にして行と列を転置した $H^\dagger$ である．すなわち，

$$H^\dagger = \begin{pmatrix} H_{11}^* & H_{21}^* & \cdots \\ H_{12}^* & H_{22}^* & \cdots \\ \vdots & & \end{pmatrix} \tag{25}$$

ここで行列の積のエルミート共役が $(AB)^\dagger = B^\dagger A^\dagger$ となることに注意して，(24) 式の両辺のエルミート共役をとると，

$$\begin{aligned} H^\dagger &= (UAU^{-1})^\dagger \\ &= (AU^{-1})^\dagger U^\dagger \\ &= (U^{-1})^\dagger A^\dagger U^\dagger \\ &= UA^\dagger U^{-1} \end{aligned} \tag{26}$$

となる．ここで，$U^{-1} = U^\dagger$ を使った．さらに，A の対角成分が実数であれば，$A^\dagger = A$ となるので，結局 $H^\dagger = H$ となり，自分自身がエルミート共役となる．このような演算子をエルミート演算子とよぶ．つまり $\hat{H}$ の固有値が実数であることと，$\hat{H}$ がエルミート演算子であることは，実は同一なのである．したがって，行列要素の非対角成分は，必ず $H_{jk} = H_{kj}^*$ となっている．すなわち

$$\langle\phi_j|\hat{H}|\phi_k\rangle = \langle\phi_k|\hat{H}|\phi_j\rangle^* \tag{27}$$

となり，テキスト p.163 の式 (A2.3) と同じ形をしていることがわかる[注2]．

[注2] もちろん，ϕ_j, ϕ_k だけではなくて任意の関数について (27) が成り立つことは容易に証明できる ((4) 式の複素共役をとって転置行列を考えればよい).