複素ヒルベルト空間のブラ・ケットベクトルと行列のユニタリ変換

ベクトルにブラ・ケットの２種類があるため，実ユークリッド空間での座標とベクトル・テンソルの変換性（一つ上の講義メモ参照）を適用する際に注意が必要である。まず，基底系 $\{|\boldsymbol{e}_i\rangle\}$ から $\{|\boldsymbol{e}'_k\rangle\}$ への一次変換を与える，直交行列に対応するユニタリ行列 U の行列要素 $U_{ki} = \langle \boldsymbol{e}_k|U|\boldsymbol{e}_i\rangle$ を内積,

$$U_{ki} = \langle \boldsymbol{e}'_k|\boldsymbol{e}_i\rangle \tag{1}$$

で定義する。このとき基底の一次変換式は

$$\langle \boldsymbol{e}'_k| = \langle \boldsymbol{e}_k|U = \sum_i U_{ki}\langle \boldsymbol{e}_i| \tag{2}$$

$$|\boldsymbol{e}'_l\rangle = U^\dagger|\boldsymbol{e}_l\rangle = \sum_j |\boldsymbol{e}_j\rangle U^\dagger_{jl} \quad \left(= \sum_j U^*_{lj}|\boldsymbol{e}_j\rangle \right) \tag{3}$$

となる。いずれも一見したところ趣の異なる２通りの書き方がされており，特に後の表式は行列演算ではなくベクトルの一次結合式であるが，それぞれ，右から $|\boldsymbol{e}_i\rangle$，左から $\langle \boldsymbol{e}_j|$ をかけてベクトルの展開係数を調べれば同じであることがわかる。直交性が維持されていることは以下のとおりである：

$$\langle \boldsymbol{e}'_k|\boldsymbol{e}'_l\rangle = \langle \boldsymbol{e}_k|UU^\dagger|\boldsymbol{e}_l\rangle = \langle \boldsymbol{e}_k|\boldsymbol{e}_l\rangle = \delta_{kl} \qquad (UU^\dagger = I：\text{単位行列}) \tag{4}$$

このユニタリ行列 U を用いれば，状態ベクトル（波動関数）と物理量の行列

$$|\psi\rangle = \sum_i \alpha_i|\boldsymbol{e}_i\rangle = \sum_k \alpha'_k|\boldsymbol{e}'_k\rangle \tag{5}$$

$$Q = \sum_{i,j} |\boldsymbol{e}_i\rangle Q_{ij}\langle \boldsymbol{e}_j| = \sum_{k,l} |\boldsymbol{e}'_k\rangle Q'_{kl}\langle \boldsymbol{e}'_l| \tag{6}$$

は，<u>新しい基底系で表した場合</u>に，それぞれ以下のように変換される：

$$\alpha'_k = \langle \boldsymbol{e}'_k|\psi\rangle = \sum_i \langle \boldsymbol{e}_k|U|\boldsymbol{e}_i\rangle\alpha_i = \sum_i U_{ki}\alpha_i\ , \quad \text{すなわち} \quad \begin{pmatrix} \alpha'_1 \\ \alpha'_2 \\ \alpha'_3 \\ \cdot \\ \cdot \end{pmatrix} = U \begin{pmatrix} \alpha_1 \\ \alpha_2 \\ \alpha_3 \\ \cdot \\ \cdot \end{pmatrix} \tag{7}$$

$$Q'_{kl} = \langle \boldsymbol{e}'_k|Q|\boldsymbol{e}'_l\rangle = \langle \boldsymbol{e}_k|UQU^\dagger|\boldsymbol{e}_l\rangle = (UQU^\dagger)_{kl} \tag{8}$$

すなわち,

$$\textbf{行列の変換：} \qquad Q' = UQU^\dagger \tag{9}$$

以上のように，複素ヒルベルト空間の場合も基底の変換行列 U を (1) で定義すれば，実ユークリッド空間の座標とベクトル・テンソルの変換性と同じになる。実ユークリッド空間の変換では，U_{ij} が実数だから，(2) と (3) の違いはない。

（物理量の回転） <u>基底はそのまま固定</u>しておいて物理量の方を変形（回転など）することを考える。物理量をユニタリ行列 U で，（**注．**上の (9) と同じ形であるが，基底は元のままである。）

$$\textbf{物理量の変化：} \qquad Q' = UQU^\dagger \tag{10}$$

と変換するとき，変換の表式 (2) と (3) を用いれば，以下の等式が得られる：

$$\langle \boldsymbol{e}_i|Q'|\boldsymbol{e}_j\rangle = \langle \boldsymbol{e}'_i|Q|\boldsymbol{e}'_j\rangle \tag{11}$$

つまり,「元の基底系による Q' の行列要素」と「変換した基底系による元の Q の行列要素」は同じ形になる。ハイゼンベルグ表示とシュレーディンガ表示の同等性は，$U = \mathrm{e}^{itH/\hbar}$ と置くことに相当する。

例　量子化軸を $\boldsymbol{n} = (\sin\theta\cos\phi, \sin\theta\sin\phi, \cos\theta)$ 方向に選んだ場合のスピン

$$\sigma_z' = \boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{\sigma} = n_x\sigma_x + n_y\sigma_y + n_z\sigma_z = \begin{pmatrix} \cos\theta & \mathrm{e}^{-i\phi}\sin\theta \\ \mathrm{e}^{i\phi}\sin\theta & -\cos\theta \end{pmatrix} \tag{12}$$

は，回転のユニタリ行列

$$U = \mathrm{e}^{-(i\phi/2)\sigma_z}\mathrm{e}^{-(i\theta/2)\sigma_y} = \begin{pmatrix} \mathrm{e}^{-i\phi/2}\cos(\theta/2) & -\mathrm{e}^{-i\phi/2}\sin(\theta/2) \\ \mathrm{e}^{i\phi/2}\sin(\theta/2) & \mathrm{e}^{i\phi/2}\cos(\theta/2) \end{pmatrix} \tag{13}$$

を用いた変換

$$\sigma_z' = U\sigma_z U^\dagger \tag{14}$$

で与えられる。この新しい演算子 σ_z' の固有値 ± 1 に対応する固有ベクトルは,

$$\textbf{固有ベクトルの変化：}\quad Q|q\rangle = q|q\rangle \quad \text{のとき} \quad (UQU^\dagger)\,U|q\rangle = UQ|q\rangle = q\,U|q\rangle \tag{15}$$

により $U|q\rangle$，すなわち

$$|+'\rangle = U|+\rangle = \mathrm{e}^{-i\phi/2}\cos\frac{\theta}{2}|+\rangle + \mathrm{e}^{i\phi/2}\sin\frac{\theta}{2}|-\rangle = \begin{pmatrix} \mathrm{e}^{-i\phi/2}\cos(\theta/2) \\ \mathrm{e}^{i\phi/2}\sin(\theta/2) \end{pmatrix} \tag{16}$$

$$|-'\rangle = U|-\rangle = -\mathrm{e}^{-i\phi/2}\sin\frac{\theta}{2}|+\rangle + \mathrm{e}^{i\phi/2}\cos\frac{\theta}{2}|-\rangle = \begin{pmatrix} -\mathrm{e}^{-i\phi/2}\sin(\theta/2) \\ \mathrm{e}^{i\phi/2}\cos(\theta/2) \end{pmatrix} \tag{17}$$

となる。これは基底の変換に伴う列ベクトルの変換式 (7) と同じ形をしているので混同しがちであるが,そうではない。ベクトルの成分を決めている基底は，元の基底系 $\{|+\rangle, |-\rangle\}$ のままである。

これに対して基底のユニタリ変換の考えでは，(3) により新たな基底を以下のようにとればよい：

$$|e_0'\rangle = U^\dagger|+\rangle = \mathrm{e}^{i\phi/2}\cos\frac{\theta}{2}|+\rangle - \mathrm{e}^{i\phi/2}\sin\frac{\theta}{2}|-\rangle \tag{18}$$

$$|e_1'\rangle = U^\dagger|-\rangle = e^{-i\phi/2}\sin\frac{\theta}{2}|+\rangle + \mathrm{e}^{-i\phi/2}\cos\frac{\theta}{2}|-\rangle \tag{19}$$

このとき，(8) の行列要素の変換式により，σ_z はこの 新たな基底系 で (12) と全く同じ形の行列で表される。同時に σ_z の固有ベクトル $|+\rangle = (1,0)^T$，$|-\rangle = (0,1)^T$ も，(7) により，当然のことながら新たな基底系 $\{|\boldsymbol{e}_0'\rangle, |\boldsymbol{e}_1'\rangle\}$ で，上の (16)，(17) と全く同じ形の成分をもつ列ベクトルに変換される：

$$|+\rangle \;\to\; U\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathrm{e}^{-i\phi/2}\cos(\theta/2) \\ \mathrm{e}^{i\phi/2}\sin(\theta/2) \end{pmatrix} \tag{20}$$

$$|-\rangle \;\to\; U\begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -\mathrm{e}^{-i\phi/2}\sin(\theta/2) \\ \mathrm{e}^{i\phi/2}\cos(\theta/2) \end{pmatrix} \tag{21}$$

ここで,「新たな基底を $|+'\rangle$，$|-'\rangle$ にとったら σ_z はどう表されるか？」という疑問が出るかもしれないが，今度は (14) で定義された σ_z' が元のパウリ行列 σ_z と同じ形で表されるだけで，殆ど意味がない。

要するに，同じことを「物理量の変換」と見るか,「（逆向きの）座標の変換」と見るかの違いであり，上のように違いを意識しなくても支障はない場合もある。しかしながら一般には，物理量を行列形で，状態を列ベクトル（または行ベクトル）の形で書くときは，その成分を与えている基底が何であるかがあいまいになり，頭が混乱することがある。事情のよく分っている人が書いた教科書では，こんなことをいちいち断ってはいないので，一度は注意深く確かめながら読み進む方がいいだろう。