量子力学の基礎
北野正雄 (京都大学大学院工学研究科)
kitano@kuee.kyoto-u.ac.jp
2007 年 10 月 16 日

第 4 章 演算子

演算子はヒルベルト空間のベクトルを関係づけるものであり, 量子系の時間発展や測定の効果を記述するのに役立つ. もっとも重要な概念は共役演算子であり, これを通して, ユニタリ演算子, エルミート演算子, 射影演算子, 正規演算子など, 重要な働きをする演算子のクラス分けが行われる.

4.1 偏光を変える素子

光学では偏光を変える素子がよく用いられる. たとえば, 特定の方向の直線偏光のみを選択的に透過させる直線偏光子, 直線偏光を円偏光に変える 4 分の 1 波長板, 直線偏光の向きを変える回転子などがある.

たとえば, 直線偏光の偏光を θ 回転させる素子に,

$$|E'_{\mathrm{in}}\rangle = \tilde{E}_{\mathrm{H}}|\mathrm{H}\rangle \tag{4.1}$$

を入力すると,

$$|E_{\mathrm{out}}\rangle = \cos\theta\tilde{E}_{\mathrm{H}}|\mathrm{H}\rangle + \sin\theta\tilde{E}_{\mathrm{H}}|\mathrm{V}\rangle \tag{4.2}$$

のような偏光が出力に現れる. 同様に,

$$|E''_{\mathrm{in}}\rangle = \tilde{E}_{\mathrm{V}}|\mathrm{V}\rangle \tag{4.3}$$

を入力すると,

$$|E''_{\mathrm{out}}\rangle = -\sin\theta\tilde{E}_{\mathrm{V}}|\mathrm{H}\rangle + \cos\theta\tilde{E}_{\mathrm{V}}|\mathrm{V}\rangle \tag{4.4}$$

が得られる．さらに，これらの重ね合わせである

$$|E_{\mathrm{in}}\rangle = |E'_{\mathrm{in}}\rangle + |E''_{\mathrm{in}}\rangle = \tilde{E}_{\mathrm{H}}|\mathrm{H}\rangle + \tilde{E}_{\mathrm{V}}|\mathrm{V}\rangle \tag{4.5}$$

を入力すると，出力も重ね合わせられて

$$\begin{aligned}|E_{\mathrm{out}}\rangle &= |E'_{\mathrm{out}}\rangle + |E''_{\mathrm{out}}\rangle \\ &= (\cos\theta\tilde{E}_{\mathrm{H}} - \sin\theta\tilde{E}_{\mathrm{V}})|\mathrm{H}\rangle + (\sin\theta\tilde{E}_{\mathrm{H}} + \cos\theta\tilde{E}_{\mathrm{V}})|\mathrm{V}\rangle\end{aligned} \tag{4.6}$$

となる．

任意の入力偏光 $|E_{\mathrm{in}}\rangle$ に対して，出力偏光 $|E_{\mathrm{out}}\rangle$ が対応づけられている．この対応 $|E_{\mathrm{in}}\rangle \mapsto |E_{\mathrm{out}}\rangle$ を

$$|E_{\mathrm{out}}\rangle = R(\theta)|E_{\mathrm{in}}\rangle \tag{4.7}$$

と書くことができる．このようにベクトルに対して別のベクトルを線形的に対応させる作用は線形演算子とよばれる．

行列記法では

$$\begin{bmatrix}\tilde{E}_{\mathrm{H}} \\ \tilde{E}_{\mathrm{V}}\end{bmatrix}_{\mathrm{out}} = \begin{bmatrix}\cos\theta & -\sin\theta \\ \sin\theta & \cos\theta\end{bmatrix}\begin{bmatrix}\tilde{E}_{\mathrm{H}} \\ \tilde{E}_{\mathrm{V}}\end{bmatrix}_{\mathrm{in}} \tag{4.8}$$

と表すことができる．

問題 4.1 H 偏光のみを通す偏光子を表す演算子 L_{H} を行列で表せ．

問題 4.2 45° 偏光から右回り偏光，(−45°) 偏光から左回り偏光を作る波長板の作用を表す演算子 C を行列で表せ．

問題 4.3 $R(\theta)$ の作用を基底 $\{|\mathrm{R}\rangle, |\mathrm{L}\rangle\}$ を用いて表せ．

4.2 演算子

前節の議論を一般化しておこう． ケット $|\psi\rangle \in \mathcal{H}$ に対して，別のケット $|\psi'\rangle \in \mathcal{H}$ を対応させ，

$$\hat{A} : |\psi\rangle \mapsto |\psi'\rangle = \hat{A}|\psi\rangle. \tag{4.9}$$

と表す．演算子には，線形性を仮定する;

$$\hat{A}(c_1|\psi_1\rangle + c_1|\psi_2\rangle) = c_1\hat{A}|\psi_1\rangle + c_2\hat{A}|\psi_2\rangle \tag{4.10}$$

ただし，c_1, $c_2 \in \mathbb{C}$.

$\mathcal{H}$ から $\mathcal{H}$ への線形写像を線形作用素あるいは演算子 (operator) という．量子論では, 基底の変換, 系の時間発展, 物理量などの関連で重要な働きをする．演算子を表す文字の上には "^" (ハット) をつけて, 他の量と区別する．

恒等演算子 $\hat{1}$ は最も簡単な演算子であり,

$$\hat{1}|\psi\rangle = |\psi\rangle \tag{4.11}$$

のように, 同じケットを与える．$c \in \mathbb{C}$ に対して, $(c\hat{1})$ は

$$(c\hat{1})|\psi\rangle = c|\psi\rangle \tag{4.12}$$

のように, ケットの長さと位相を変える演算子である．(記法上, $\hat{1}$ を省略して, 単に c としても構わない.) とくに, $c = 0$ の場合はゼロ演算子 $\hat{0}$ になる．ゼロケット (長さ 0 のケット) は $\hat{0}|\psi\rangle = 0$ のように, 単に 0 で表すことが多い．

次に, $|\phi\rangle \in \mathcal{H}$ を用いて, 対応

$$|\psi\rangle \in \mathcal{H} \mapsto (\langle\phi|\psi\rangle)|\phi\rangle \in \mathcal{H} \tag{4.13}$$

を考える．つまり, $|\phi\rangle$ にスカラー $\langle\phi|\psi\rangle$ をかけたものを対応させるのである．これが線型演算子であることは容易に確かめられる．実際,

$$[\langle\phi|(\xi_1|\psi_1\rangle + \xi_2|\psi_2\rangle)]|\phi\rangle = \xi_1(\langle\phi|\psi_1\rangle)|\phi\rangle + \xi_2(\langle\phi|\psi_2\rangle)|\phi\rangle \tag{4.14}$$

この演算子を

$$\hat{P}_\phi = |\phi\rangle\langle\phi| \tag{4.15}$$

と表すことにする．念のため再度, その作用を表すと

$$\hat{P}_\phi|\psi\rangle = (|\phi\rangle\langle\phi|)|\psi\rangle = |\phi\rangle(\langle\phi|\psi\rangle) = |\phi\rangle\langle\phi|\psi\rangle, \tag{4.16}$$

である[*1)]．

例えば, H 偏光のみを通す偏光子の作用は $\hat{L}_\mathrm{H} = |\mathrm{H}\rangle\langle\mathrm{H}|$ と表すことができる: $\hat{L}_\mathrm{H}|\mathrm{H}\rangle = |\mathrm{H}\rangle\langle\mathrm{H}|\mathrm{H}\rangle = |\mathrm{H}\rangle$, $\hat{L}_\mathrm{H}|\mathrm{V}\rangle = |\mathrm{H}\rangle\langle\mathrm{H}|\mathrm{V}\rangle = 0$.

同様に $|\phi\rangle, |\varphi\rangle \in \mathcal{H}$ に対して演算子 $\hat{S}_{\phi\varphi} = |\phi\rangle\langle\varphi|$ を

$$\hat{S}_{\phi\varphi}|\psi\rangle = (|\phi\rangle\langle\varphi|)|\psi\rangle = |\phi\rangle\langle\varphi|\psi\rangle \tag{4.17}$$

で定義することができる．

2 つの演算子 $\hat{A}_1$, $\hat{A}_2$ は, 任意の $|\psi\rangle \in \mathcal{H}$ に対する作用が同じとき, すなわち, $\hat{A}_1|\psi\rangle = \hat{A}_2|\psi\rangle$ が成り立つとき等しいと考えて, $\hat{A}_1 = \hat{A}_2$ と書く．基底ベクトルのすべてに対して, $\hat{A}_1|e_i\rangle = \hat{A}_2|e_i\rangle$ $(i = 1, 2, \ldots, n)$ が成り立てば

*1) 無闇に括弧が多いのは意味をはっきりさせるためである．ディラックの記法の利点はこのような括弧を忘れて計算を進められることであるが, 最初のうちは慎重に進める方がよい．

$\hat{A}_1 = \hat{A}_2$ であることは, 線型性と基底の完全性から明らかである.

2 つの演算子 $\hat{A}_1$, $\hat{A}_2$ の和 $\hat{A}_1 + \hat{A}_2$ を

$$(\hat{A}_1 + \hat{A}_2)|\psi\rangle = \hat{A}_1|\psi\rangle + \hat{A}_2|\psi\rangle \tag{4.18}$$

で定義する. 任意の $\hat{A}_1$, $\hat{A}_2$ に対して $\hat{A}_2 + \hat{A}_1 = \hat{A}_1 + \hat{A}_2$ が成り立つ.

演算子 $\hat{A}$ のスカラー倍 $c\hat{A}$ を

$$(c\hat{A})|\psi\rangle = c(\hat{A}|\psi\rangle) \tag{4.19}$$

で定義する. ただし $c \in \mathbb{C}$ である.

問題 4.4 $|\mathrm{V}\rangle\langle\mathrm{H}|$, $|\mathrm{V}\rangle\langle\mathrm{H}| - |\mathrm{H}\rangle\langle\mathrm{V}|$ はそれぞれどのような演算子か.

2 つの演算子 $\hat{A}_1$, $\hat{A}_2$ の積 $\hat{A}_1\hat{A}_2$ は

$$(\hat{A}_1\hat{A}_2)|\psi\rangle = \hat{A}_1(\hat{A}_2|\psi\rangle) \tag{4.20}$$

で定義する. $\hat{A}_1\hat{A}_2$ は $\hat{A}_2$ を先に作用させ, $\hat{A}_2|\psi\rangle$ を得, その後に $\hat{A}_2$ を作用させることを意味している[*2]. その順序は意味があり, 一般に $\hat{A}_1\hat{A}_2 \neq \hat{A}_2\hat{A}_1$ である[*3].

例えば, $\hat{P}_\phi = |\phi\rangle\langle\phi|$, $\hat{P}_\varphi = |\varphi\rangle\langle\varphi|$, $|\phi\rangle \neq |\varphi\rangle$ に対して $\hat{P}_\phi\hat{P}_\varphi \neq \hat{P}_\varphi\hat{P}_\phi$ である.

$\hat{A}_1\hat{A}_2 = \hat{A}_2\hat{A}_1$ が成り立つ場合, $\hat{A}_1$ と $\hat{A}_2$ は交換可能, あるいは可換 (commutable) であるという. 任意の演算子は自分自身と交換可能である. 恒等演算子 $\hat{1}$ は任意の演算子と交換可能である.

演算子 $\hat{A}_1\hat{A}_2$ と $\hat{A}_2\hat{A}_1$ の差

$$[\hat{A}_1, \hat{A}_2] = \hat{A}_1\hat{A}_2 - \hat{A}_1\hat{A}_2 \tag{4.21}$$

は新しい演算子を定義する. これを交換子 (commutator) とよぶ. 可換な演算子の交換子はゼロである. たとえば, $[\hat{A}, \hat{A}] = 0$, $[\hat{A}, \hat{1}] = 0$.

問題 4.5 非負の整数 n に対して $[\hat{A}^n, \hat{A}] = 0$ であることを示せ.

$\hat{S}_{\phi\varphi} = |\phi\rangle\langle\varphi|$, $\hat{S}_{uv} = |u\rangle\langle v|$ としよう.

$$\hat{S}_{\phi\varphi}\hat{S}_{uv}|\psi\rangle = \hat{S}_{\phi\varphi}|u\rangle(\langle v|\psi\rangle) = |\phi\rangle(\langle\varphi|u\rangle)(\langle v|\psi\rangle) \tag{4.22}$$

これが $|\psi\rangle$ に対する作用であることを考慮して

$$\hat{S}_{\phi\varphi}\hat{S}_{uv} = |\phi\rangle(\langle\varphi|u\rangle)\langle v| = (\langle\varphi|u\rangle)|\phi\rangle\langle v| = \langle\varphi|u\rangle\hat{S}_{\phi v} \tag{4.23}$$

---

*2) 積の形で表されているが, 実際には作用の合成であり, $(\hat{A}_1 \circ \hat{A}_2)|\psi\rangle = \hat{A}_1(\hat{A}_2|\psi\rangle)$ などと定義するのが適当である.

*3) $\hat{A}_1 =$「バターをぬる」, $\hat{A}_2 =$「トースターでやく」などを考えれば明らか.

と表すことができる．結果としては, ブラケットを機械的に並べ, 適当に括って解釈すればよいようになっている:

$$(|\phi\rangle\langle\varphi|)(|u\rangle\langle v|) = |\phi\rangle\langle\varphi|u\rangle\langle v| = |\phi\rangle(\langle\varphi|u\rangle)\langle v|. \tag{4.24}$$

一般の演算子 $\hat{A}$ に関して

$$\hat{A}\hat{S}_{\phi\varphi} = \hat{A}|\phi\rangle\langle\varphi| = (\hat{A}|\phi\rangle)\langle\varphi| = |\phi'\rangle\langle\varphi| = \hat{S}_{\phi'\varphi}. \tag{4.25}$$

ただし, $|\phi'\rangle = \hat{A}|\phi\rangle$.

4.3 1の分解

任意のベクトル $|\psi\rangle \in \mathcal{H}$ は正規直交基底 $\{|e_i\rangle\}$ を用いて

$$\begin{aligned} |\psi\rangle &= \xi_1|e_1\rangle + \xi_2|e_2\rangle + \ldots + \xi_n|e_n\rangle, \\ \xi_i &= \langle e_i|\psi\rangle \quad (i = 1, 2, \ldots, n) \end{aligned} \tag{4.26}$$

と展開できる．これは基底の完全性 (completeness) を意味する．さらに,

$$\begin{aligned} |\psi\rangle &= \xi_1|e_1\rangle + \xi_2|e_2\rangle + \ldots + \xi_n|e_n\rangle \\ &= \langle e_1|\psi\rangle|e_1\rangle_+\langle e_2|\psi\rangle|e_2\rangle + \ldots + \langle e_n|\psi\rangle|e_n\rangle \\ &= |e_1\rangle\langle e_1|\psi\rangle + |e_2\rangle\langle e_2|\psi\rangle + \ldots + |e_n\rangle\langle e_n|\psi\rangle \\ &= (|e_1\rangle\langle e_1| + |e_2\rangle\langle e_2| + \ldots + |e_n\rangle\langle e_n|)|\psi\rangle \end{aligned} \tag{4.27}$$

であり, この等式が任意の $|\psi\rangle$ に対して成立しているので,

$$|e_1\rangle\langle e_1| + |e_2\rangle\langle e_2| + \ldots + |e_n\rangle\langle e_n| = \hat{1} \tag{4.28}$$

と表すことができる．この式は 1 の分解 (resolution of identity) と呼ばれる．1 の分解は成分を用いた式を導く過程で有用である．

4.4 演算子の行列表示

1 の分解を利用すると演算子 $\hat{A}$ を次のように変形することができる．

$$\hat{A} = \hat{1}\hat{A}\hat{1} = \left(\sum_{i=1}^{n}|e_i\rangle\langle e_i|\right)\hat{A}\left(\sum_{j=1}^{n}|e_j\rangle\langle e_j|\right) \tag{4.29}$$

$$\begin{aligned} &= \sum_{i=1}^{n}\sum_{j=1}^{n}(|e_i\rangle\langle e_i|)\hat{A}(|e_j\rangle\langle e_j|) \\ &= \sum_{i=1}^{n}\sum_{j=1}^{n}|e_i\rangle(\langle e_i|(\hat{A}|e_j\rangle))\langle e_j| = \sum_{i=1}^{n}\sum_{j=1}^{n}A_{ij}|e_i\rangle\langle e_j| \end{aligned} \tag{4.30}$$

ただし, $A_{ij} = \langle e_i|(\hat{A}|e_j\rangle)$ である. これを演算子 $\hat{A}$ の行列表示という. 基底を定めると, 演算子の作用はこの行列の要素で決定づけることができるのである. すなわち,

$$|\psi'\rangle = \hat{A}|\psi\rangle = \sum_{i=1}^{n}\sum_{j=1}^{n} A_{ij}|e_i\rangle\langle e_j|\psi\rangle = \sum_{i=1}^{n}\sum_{j=1}^{n} A_{ij}\xi_j|e_i\rangle \tag{4.31}$$

を $|\psi'\rangle = \sum_{i=1}^{n} \xi'_i|e_i\rangle$ と比較すると, $\xi'_i = \sum_{j=1}^{n} A_{ij}\xi_j$ のように行列計算に帰着されることがわかる. つまり,

$$\begin{bmatrix} \xi'_1 \\ \vdots \\ \xi'_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} A_{11} & \dots & A_{1n} \\ \vdots & & \vdots \\ A_{n1} & \dots & A_{nn} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \xi_1 \\ \vdots \\ \xi_n \end{bmatrix} \tag{4.32}$$

と表せる. 基底を定めれば,

$$\hat{A} \doteq \begin{bmatrix} A_{11} & \dots & A_{1n} \\ \vdots & & \vdots \\ A_{n1} & \dots & A_{nn} \end{bmatrix} \tag{4.33}$$

と考えてよい.

$|\psi\rangle = \sum_i \xi_i|e_i\rangle$ に $\hat{A}$ を作用させた場合,

$$\hat{A}|\psi\rangle = \sum_i \xi'_i|e_i\rangle, \quad \xi'_i = \sum_j A_{ij}\xi_j$$
$$\hat{A}|\psi\rangle = \sum_i \xi_i|e'_i\rangle, \quad |e'_i\rangle = \hat{A}|e_i\rangle = \sum_j |e_j\rangle A_{ji} \tag{4.34}$$

という 2 つの見方ができることに注意する. 前者はすでに見たように, 成分が変換を受けるというものである. 後者は基底ベクトルがそれぞれ $\hat{A}$ によって変換されるという見方である. 行列記法で書けば,

$$\Big[|e'_1\rangle, \dots, |e'_n\rangle\Big] = \Big[|e_1\rangle, \dots, |e_n\rangle\Big] \begin{bmatrix} A_{11} & \dots & A_{1n} \\ \vdots & & \vdots \\ A_{n1} & \dots & A_{nn} \end{bmatrix} \tag{4.35}$$

となる.

問題 4.6 $\hat{P}_{ij} = |e_i\rangle\langle e_j|$ を行列で表せ.

問題 4.7 $\hat{P}_{ij}$ の行列表示を利用して, 式 (4.30) の最後の式を行列表示せよ.

問題 4.8 恒等演算子 $\hat{1}$ を行列を用いて表せ.

名前	記号	空間	行列表示
ケット	$\lvert\cdot\rangle$	$\mathcal{H}$	$\begin{bmatrix}\cdot\\ \cdot\end{bmatrix}$
ブラ	$\langle\cdot\rvert$	$\mathcal{H}^* = (\mathcal{H}\to\mathbb{C})$	$[\cdot\quad\cdot]$
スカラー積	$\langle\cdot\vert\cdot\rangle$	$\mathbb{C}$	$[\cdot\quad\cdot]\begin{bmatrix}\cdot\\ \cdot\end{bmatrix} = \cdot$
演算子	$\sum\lvert\cdot\rangle\langle\cdot\rvert$	$\mathcal{H}\to\mathcal{H}$	$\sum\begin{bmatrix}\cdot\\ \cdot\end{bmatrix}[\cdot\quad\cdot] = \begin{bmatrix}\cdot & \cdot\\ \cdot & \cdot\end{bmatrix}$

表 4.1 ブラケット記法のまとめ

表 4.1 にブラとケットの使いかたをまとめておく.

ブラケットの計算は行列の計算に置き換えることができる. 具体的な問題を扱う場合には行列は便利な場合があるが, それ以外はブラケットが圧倒的に使いやすい. ここでも今後行列は多くは登場しないだろう.

4.5 共役演算子

任意の演算子に対して共役演算子というものを対応させることができる. ここでは内積を用いた導入と, 双対空間を利用した導入方法を併記する. 後者はやや複雑だが, ブラケット記法との整合性がよい.

4.5.1 内積による定義

$\mathcal{H}$ 上の演算子 $\hat{A}$ を固定して考える. 任意の $|\psi\rangle, |\phi\rangle \in \mathcal{H}$ に対して,

$$(\hat{B}|\phi\rangle, |\psi\rangle) = (|\phi\rangle, \hat{A}|\psi\rangle) \tag{4.36}$$

が成り立つ場合, $\hat{B}$ を $\hat{A}$ の共役演算子 (conjugate operator) とよび, $\hat{A}^\dagger$ と表す [図 4.1 参照].

$\hat{A}^\dagger$ が $|\phi\rangle$ に対する線形演算子であることを確認しよう:

$$\begin{aligned}(c_1|\phi_1\rangle + c_2|\phi_2\rangle, \hat{A}|\psi\rangle) &= c_1^*(|\phi_1\rangle, \hat{A}|\psi\rangle) + c_2^*(|\phi_2\rangle, \hat{A}|\psi\rangle)\\ &= c_1^*(\hat{A}^\dagger|\phi_1\rangle, |\psi\rangle) + c_2^*(\hat{A}^\dagger|\phi_2\rangle, |\psi\rangle)\\ &= (c_1\hat{A}^\dagger|\phi_1\rangle + c_2\hat{A}^\dagger|\phi_2\rangle, |\psi\rangle)\end{aligned} \tag{4.37}$$

である. 一方,

$$(c_1|\phi_1\rangle + c_2|\phi_2\rangle, \hat{A}|\psi\rangle) = (\hat{A}^\dagger(c_1|\phi_1\rangle + c_2|\phi_2\rangle), |\psi\rangle). \tag{4.38}$$

であり, これが任意の $|\psi\rangle$ について成り立つので,

$$\hat{A}^\dagger(c_1|\phi_1\rangle + c_2|\phi_2\rangle) = c_1\hat{A}^\dagger|\phi_1\rangle + c_2\hat{A}^\dagger|\phi_2\rangle \tag{4.39}$$

が得られる.

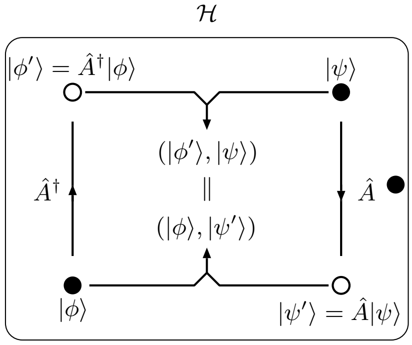

図 4.1　内積記法における共役演算子.

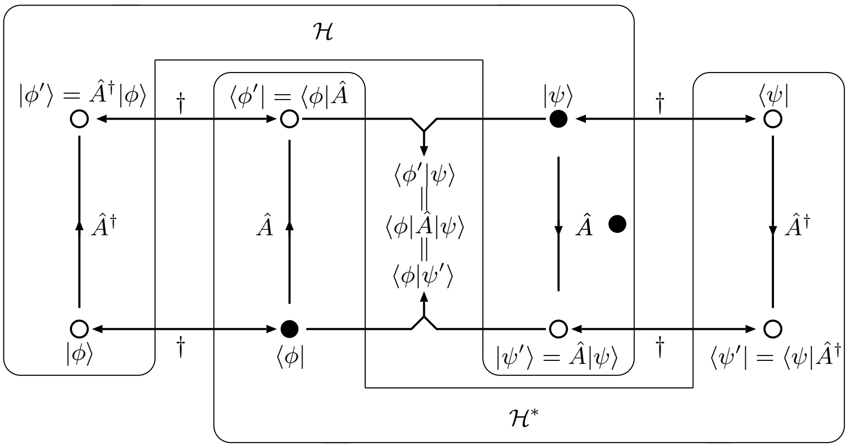

図 4.2　ブラケット記法における共役演算子.

4.5.2　双対空間上の演算子

ブラケット記法による共役演算子の導入に先だって双対演算子というものを考える.

$\mathcal{H}$ 上の演算子 $\hat{A}$ を固定して考える. 一方, $|\psi\rangle \in \mathcal{H}$, $\langle\phi| \in \mathcal{H}^*$ を任意に選ぶものする [図 4.2 の黒丸にまず注目].

まず, $|\psi'\rangle = \hat{A}|\psi\rangle$ とおき, $\langle\phi|$ を作用させる:

$$\langle\phi|\psi'\rangle = \langle\phi|(\hat{A}|\psi\rangle) = \langle\phi'|\psi\rangle. \tag{4.40}$$

この式を満たす $\langle\phi'| \in \mathcal{H}^*$ が存在することは $\mathcal{H}^*$ の定義から当然である. それは 2 番目の表式が $|\psi\rangle$ に関する線形汎関数をあたえているからである.

ここで,

$$\langle\phi'| = \langle\phi|\hat{A} \tag{4.41}$$

と書くことにする[*4)]. これは双対空間 $\mathcal{H}^*$ 上の新しい演算子 (双対演算子とも

*4)　このように後ろから演算子を作用させることを後置記法 (postfix notation) とよぶ. 通

よばれる) を定義していることになる．厳密にいえば, 元の $\mathcal{H}$ 上の演算子 $\hat{A}$ とは別物なので, 別の記号を用いるべきであるが,

$$(\langle\phi|\hat{A})|\psi\rangle = \langle\phi|(\hat{A}|\psi\rangle) = \langle\phi|\hat{A}|\psi\rangle \tag{4.42}$$

のように, どちらの意味に解釈しても結果が変わらないので, 同じ記号を割り当てておく*5)．また, 最後の式のように, 括弧をつけないのが普通である*6)．

問題 4.9 このように導入された, $\mathcal{H}^*$ 上の $\hat{A}$ が, 線形演算子になっていることを確かめよ．

問題 4.10 $\langle\phi|\hat{A}\hat{B}|\psi\rangle$ は何通りに解釈できるか? さまざまに括弧を付けて違いを明らかにしてみよ．(3 通りよりは多い.)

4.5.3 共役演算子

双対空間 $\mathcal{H}^*$ において, 関係 $\langle\phi'| = \langle\phi|\hat{A}$ が成り立っているとする．このとき, $|\phi\rangle = (\langle\phi|)^\dagger \in \mathcal{H}$ と, $|\phi'\rangle = (\langle\phi'|)^\dagger \in \mathcal{H}$ の間には線形関係が成り立っている．この関係は具体的には

$$(|\phi'\rangle)^\dagger = (|\phi\rangle)^\dagger\hat{A}, \quad \text{すなわち}, \quad |\phi'\rangle = ((|\phi\rangle)^\dagger\hat{A})^\dagger \tag{4.43}$$

と表すことができる (図 4.2 の左半分を参照)．この関係を, $\mathcal{H}$ 上の演算子として $\hat{A}^\dagger$ で表す;

$$|\phi'\rangle = \hat{A}^\dagger|\phi\rangle \tag{4.44}$$

これが線形演算子であることは, 次のように確かめられる:

$$\begin{aligned}\hat{A}^\dagger(c_1|\phi_1\rangle + c_2|\phi_1\rangle) &= ((c_1|\phi_1\rangle + c_2|\phi_1\rangle)^\dagger\hat{A})^\dagger\\ &= ((c_1^*\langle\phi_1| + c_2^*\langle\phi_1|)\hat{A})^\dagger\\ &= (c_1^*\langle\phi_1|\hat{A} + c_2^*\langle\phi_1|\hat{A})^\dagger\\ &= c_1(\langle\phi_1|\hat{A})^\dagger + c_2(\langle\phi_1|\hat{A})^\dagger\\ &= c_1\hat{A}^\dagger|\phi_1\rangle + c_2\hat{A}^\dagger|\phi_2\rangle.\end{aligned} \tag{4.45}$$

さらに, $|\psi'\rangle = \hat{A}|\psi\rangle$ のとき,

常のものは前置 (prefix) 記法とよばれる．$a+b$ における和のようなものは中置 (infix) 記法という．慣習にこだわらなければ, $+ab$, $ab+$ などと表すことも可能である．日本語の "a に b を足す" は後置記法だといえる．

*5) 重複 (overlay) という．整数の和 $i+j$ とベクトルの和 $\boldsymbol{a}+\boldsymbol{b}$ における和の記号 "+" は重複の例である．

*6) 演算子が二つの意味に自然に解釈できることは, ブラケット記法の目立たないが非常に重要なポイントである．

$$\langle\psi'| = \langle\psi|\hat{A}^\dagger \tag{4.46}$$

として, $\mathcal{H}^*$ に対しても, $\hat{A}^\dagger$ が定義できる (図 4.2 の右半分). $\mathcal{H}$ 上の $\hat{A}^\dagger$ と区別する必要がないことは, $\hat{A}$ の場合と同様である.

$\hat{A}^\dagger$ は $\hat{A}$ の共役演算子 (adjoint operator) と呼ばれる[*7].

共役演算子について, いくつかの性質を知っておく必要がある.

$$\begin{aligned}
&(\hat{A}^\dagger)^\dagger = \hat{A}\\
&(\hat{A}_1 + \hat{A}_2)^\dagger = \hat{A}_1^\dagger + \hat{A}_2^\dagger\\
&(\hat{A}_1\hat{A}_2)^\dagger = \hat{A}_2^\dagger\hat{A}_1^\dagger\\
&(c\hat{A})^\dagger = c^*\hat{A}^\dagger
\end{aligned} \tag{4.47}$$

$\hat{B}|\phi\rangle$ と $\hat{A}|\psi\rangle$ の内積は

$$(\hat{B}|\phi\rangle, \hat{A}|\psi\rangle) = (\langle\phi|\hat{B}^\dagger)(\hat{A}|\psi\rangle) = \langle\phi|\hat{B}^\dagger\hat{A}|\psi\rangle \tag{4.48}$$

となることに注意する. 同様に, $\hat{A}|\psi\rangle$ の長さ (の 2 乗) は

$$||\hat{A}|\psi\rangle||^2 = (\hat{A}|\psi\rangle, \hat{A}|\psi\rangle) = \langle\psi|\hat{A}^\dagger\hat{A}|\psi\rangle \tag{4.49}$$

と書くことができる.

また,

$$\langle\phi|\hat{A}|\psi\rangle^* = (\langle\phi|\hat{A}|\psi\rangle)^\dagger = (|\psi\rangle^\dagger\hat{A}^\dagger\langle\phi|^\dagger) = \langle\psi|\hat{A}^\dagger|\phi\rangle \tag{4.50}$$

である. さらに,

$$\langle e_i|\hat{A}^\dagger|e_j\rangle = \langle e_j|\hat{A}|e_i\rangle^*, \quad \text{すなわち,} \quad (\hat{A}^\dagger)_{ij} = (\hat{A}_{ji})^*. \tag{4.51}$$

行列記法では,

$$\hat{A} \doteq \begin{bmatrix} A_{11} & \dots & A_{1n}\\ \vdots & \ddots & \vdots\\ A_{n1} & \dots & A_{nn}\end{bmatrix}, \quad \text{のとき,} \quad \hat{A}^\dagger \doteq \begin{bmatrix} A_{11}^* & \dots & A_{n1}^*\\ \vdots & \ddots & \vdots\\ A_{1n}^* & \dots & A_{nn}^*\end{bmatrix} \tag{4.52}$$

となる. 共役演算子の行列表示は元の演算子の転置行列の複素共役であることが分かった.

問題 4.11 この節での議論を行列記法を用いて繰り返してみよ.

---

*7) この演算子の共役関係は直接的には $\mathcal{H}$ 上の演算子と $\mathcal{H}^*$ 上の演算子の間に定義されたのだが, $\mathcal{H}$ ($\mathcal{H}^*$) 上の演算子同士の関係に拡大 (overlay) されたことに注意する.

4.6 固有値と固有ケット

演算子 $\hat{A}$ の作用によってケット $|\psi\rangle$ は別のケット $|\phi\rangle$ に変換される.

$$|\phi\rangle = \hat{A}|\psi\rangle \tag{4.53}$$

一般に $|\phi\rangle$ は, $|\psi\rangle$ とは方向も大きさも異なるケットである. しかし, ケットをうまく選べば, これらの方向が一致する場合がある. すなわち,

$$\hat{A}|\lambda\rangle = \lambda|\lambda\rangle \tag{4.54}$$

が成り立つ場合がある. このようなケット $|\lambda\rangle$ を演算子 $\hat{A}$ の固有ケットといい, λ をその固有値とよぶ. 固有値は一般に複素数である. $c \in \mathbb{C}$ のとき, $c|\lambda\rangle$ も同じ固有値をもつ固有ケットである. すなわち, $\hat{A}(c|\lambda\rangle) = \lambda(c|\lambda\rangle)$.

固有値と固有ケット (の集まり) は演算子の作用を特徴づける働きをする. 演算子 $\hat{A}$ が適当な条件を満たせば, 空間の次元 n に等しい数の互いに独立な固有ケット $|\lambda_i\rangle$ を選ぶことができる:

$$\hat{A}|\lambda_i\rangle = \lambda_i|\lambda_i\rangle \quad (i = 1, 2, \ldots, n) \tag{4.55}$$

$|\lambda_i\rangle$ が互いに独立なので, 任意のケット $|\psi\rangle$ は

$$|\psi\rangle = c_1|\lambda_1\rangle + c_2|\lambda_2\rangle + \ldots + c_n|\lambda_n\rangle \tag{4.56}$$

のように展開できる. そこで, $\hat{A}$ の作用は

$$\hat{A}|\psi\rangle = \lambda_1 c_1|\lambda_1\rangle + \lambda_2 c_2|\lambda_2\rangle + \ldots + \lambda_n c_n|\lambda_n\rangle \tag{4.57}$$

のように, 簡単な形で表すことができる.

特に量子力学では, 固有ケットが独立であるだけでなく, 直交性を満たす場合が重要であるが, このための条件については第 5 章で述べる.

ブラ $\langle\lambda| = (|\lambda\rangle)^\dagger$ は演算子 $\hat{A}^\dagger$ の固有ブラでその固有値は λ^* である. なぜなら, $\hat{A}|\lambda\rangle = \lambda|\lambda\rangle$ の共役が

$$\langle\lambda|\hat{A}^\dagger = \lambda^*\langle\lambda|. \tag{4.58}$$

だからである.

線形独立な 2 つの固有ケット $|\lambda\rangle, |\nu\rangle$ の固有値が等しい場合, すなわち, $\lambda = \nu$ の場合, 固有値が縮退しているという.

$[\hat{A}, \hat{B}] = 0$ が成り立っているとする. $|a\rangle$ が $\hat{A}$ の固有ケットのとき, $\hat{A}\hat{B}|a\rangle = \hat{B}\hat{A}|a\rangle = a\hat{B}|a\rangle$ から, $\hat{B}|a\rangle$ は $\hat{A}$ の固有値 a の固有ケットになる. 固有値 a が縮退していなければ, $\hat{B}|a\rangle$ は $|a\rangle$ の定数倍であり, $\hat{B}|a\rangle = b|a\rangle$ と表すことができる. つまり, $|a\rangle$ は, $\hat{A}$ と $\hat{B}$ の同時固有ケットである. 縮退のある場合については後に述べる.

4.7 ユニタリ演算子

任意の $|\phi\rangle, |\psi\rangle \in \mathcal{H}$ について

$$(\hat{U}|\phi\rangle, \hat{U}|\psi\rangle) = (|\phi\rangle, |\psi\rangle) \tag{4.59}$$

が成り立つ場合, 演算子 $\hat{U}$ はユニタリ (unitary) とよばれる. すなわち, 内積 (角度や長さ) を保存する変換である. ブラケット表示すると,

$$\langle\phi|\hat{U}^\dagger\hat{U}|\psi\rangle = \langle\phi|\psi\rangle \tag{4.60}$$

これが, 任意の $|\phi\rangle$, $|\phi\rangle$ について成り立つので, これより, ユニタリ条件は

$$\hat{U}^\dagger\hat{U} = \hat{1}, \tag{4.61}$$

と表すこともできる.

式 (4.61) の両辺に左から $\hat{U}$ を, 右から $\hat{U}^\dagger$ を作用させると, $\hat{U}\hat{U}^\dagger(\hat{U}\hat{U}^\dagger - \hat{1}) = 0$ が得られる. 交換可能な演算子 $\hat{A}$, $\hat{B}$ に対して, $\hat{A}\hat{B} = 0$ が成り立てば, $\hat{A} = 0$ または $\hat{B} = 0$ なので, $\hat{U}\hat{U}^\dagger = \hat{1}$ がいえる.

一般に, 演算子 $\hat{A}$ に対して $\hat{A}\hat{B} = \hat{B}\hat{A} = \hat{1}$ を満す演算子 $\hat{B}$ が存在するとき, これを $\hat{A}$ の逆行列といい $\hat{A}^{-1}$ と表す. 逆演算子を用いるとユニタリ条件は

$$\hat{U}^\dagger = \hat{U}^{-1} \tag{4.62}$$

と表すことができる.

ユニタリ演算子の逆演算子はユニタリである.

問題 4.12 ユニタリ演算子の積はユニタリであることを示せ. 和はどうか.

問題 4.13 ユニタリ演算子 $\hat{U}$ と複素数 c に対して, $c\hat{U}$ がユニタリになる条件は何か.

問題 4.14 ユニタリ演算子の条件を「任意の $|\psi\rangle \in \mathcal{H}$ について $\langle\psi|\hat{U}^\dagger\hat{U}|\psi\rangle = \langle\psi|\psi\rangle$ が成り立つ」としてもよいことを示せ.

成分 $U_{ij} = \langle e_i|\hat{U}|e_j\rangle$ を導入すると, 成分に対するユニタリ条件

$$\sum_{k=1}^{n} U_{ki}^* U_{kj} = \delta_{ij} \tag{4.63}$$

が得られる. 実際, 式 (4.61) の両辺を $\langle e_i|$, $|e_j\rangle$ で挟むと左辺は,

$$\begin{aligned}\langle e_i|\hat{U}^\dagger\hat{U}|e_j\rangle &= \sum_k \langle e_i|\hat{U}^\dagger|e_k\rangle\langle e_k|\hat{U}|e_j\rangle \\ &= \sum_k (\hat{U}^\dagger)_{ik} U_{kj} = \sum_k U_{ki}^* U_{kj}.\end{aligned} \tag{4.64}$$

右辺は $\langle e_i|\hat{1}|e_j\rangle = \delta_{ij}$.

行列 U_{ij} を n 個の縦ベクトルを並べたもの:

$$[U_{ij}] = [\boldsymbol{u}_1, \boldsymbol{u}_2, \cdots \boldsymbol{u}_n], \quad \boldsymbol{u}_j = [U_{1j}, U_{2j}, \cdots, U_{nj}]^{\mathrm{T}} \tag{4.65}$$

であると見なすと, 式 (4.63) は $\boldsymbol{u}_i^* \cdot \boldsymbol{u}_j = \delta_{ij}$ と書き直すことができる. 横ベクトルに分解した場合も同様の性質を持っている.

ユニタリ変換 $\hat{U}$ の正規化された固有ケットと固有値をそれぞれ $|u\rangle$, u とすると, $\hat{U}|u\rangle = u|u\rangle$ より

$$\langle u|\hat{U}^\dagger \hat{U}|u\rangle = |u|^2 \langle u|u\rangle = |u|^2 \tag{4.66}$$

一方, ユニタリ性より

$$\langle u|\hat{U}^\dagger \hat{U}|u\rangle = \langle u|u\rangle = 1 \tag{4.67}$$

なので, $|u|^2 = 1$ であることがわかる. すなわち, 固有値の絶対値は 1 である:

$$u = \mathrm{e}^{\mathrm{i}\phi}. \tag{4.68}$$

4.8 ユニタリ変換

あるユニタリ演算子 $\hat{U}$ を選び, すべての $|\psi\rangle \in \mathcal{H}$ を $|\psi'\rangle = \hat{U}|\psi\rangle$ に, すべての $\langle\phi| \in \mathcal{H}^*$ を $\langle\phi'| = \langle\phi|\hat{U}^\dagger$ に置き換える. このとき, $\langle\phi'|\psi'\rangle = \langle\phi|\hat{U}^\dagger\hat{U}|\psi\rangle = \langle\phi|\psi\rangle$ であり, 内積は変化しない. さらに,

$$\langle\phi|\hat{A}|\psi\rangle = \langle\phi'|\hat{U}\hat{A}\hat{U}^\dagger|\psi'\rangle \tag{4.69}$$

なので, $\hat{A}' = \hat{U}\hat{A}\hat{U}^\dagger$ と定義すれば, $\langle\phi'|\hat{A}'|\psi'\rangle = \langle\phi|\hat{A}|\psi\rangle$ と書くことができる. このような変換をユニタリ変換とよぶ.

問題 4.15 演算子 $\hat{A}$, $\hat{B}$ に対して $\hat{A}+\hat{B}$, $\hat{A}\hat{B}$ はどのように変換されるか.

時刻 $t=T$ における状態 $|\psi(T)\rangle$ と時刻 $t=0$ における状態 $|\psi(0)\rangle$ は演算子で関係づけることができる.

$$|\psi(T)\rangle = \hat{U}(T)|\psi(0)\rangle \tag{4.70}$$

ユニタリ演算子 $\hat{U}(T)$ を時間発展演算子とよぶ. これについては, 第 6 章でくわしく述べる.

4.8.1 基底の変換

正規直交基底 $\{|e_i\rangle\}$ $(i = 1, 2, \ldots, n)$ の各基底ベクトルを同じユニタリ演算子 $\hat{U}$ で変換してみよう: $|e'_i\rangle = \hat{U}|e_i\rangle$. これらは

$$\langle e'_i|e'_j\rangle = \langle e_i|\hat{U}^\dagger\hat{U}|e_j\rangle = \langle e_i|e_j\rangle = \delta_{ij} \tag{4.71}$$

を満たすので, 新しい正規直交基底 $\{|e'_i\rangle\}$ が得られたことになる. このようにユニタリー演算子は正規直交基底を変更する際に用いることができる.

逆に 2 組の正規直交基底 $\{|e_i\rangle\}$, $\{|e'_i\rangle\}$ があったとき, 演算子

$$\hat{U} = \sum_{k=1}^{n} |e'_k\rangle\langle e_k| \tag{4.72}$$

はユニタリである. この演算子の $\{|e_i\rangle\}$ に対する行列表示の要素を求めると,

$$U_{ij} = \langle e_i|\hat{U}|e_j\rangle = \sum_k \langle e_i|e'_k\rangle\langle e_k|e_j\rangle = \sum_k \langle e_i|e'_k\rangle\delta_{kj} = \langle e_i|e'_j\rangle \tag{4.73}$$

また, $\{|e'_i\rangle\}$ 基底に対しては

$$U'_{ij} = \langle e'_i|\hat{U}|e'_j\rangle = \sum_k \langle e'_i|e'_k\rangle\langle e_k|e'_j\rangle = \sum_k \delta_{ik}\langle e_k|e'_j\rangle = \langle e_i|e'_j\rangle \tag{4.74}$$

つまり, どちらの基底に対しても成分は変わらない.

4.8.2 成分の変換

ケット $|\psi\rangle$ の成分 ξ_i は基底の変換によって次のように変化する.

$$\xi_i = \langle e_i|\psi\rangle = \sum_j \langle e_i|e'_j\rangle\langle e'_j|\psi\rangle = \sum_j U_{ij}\xi'_j \tag{4.75}$$

ブラ $\langle\phi|$ の成分 ζ_i は基底の変換によって次のように変化する.

$$\eta_i = \langle\phi|e_i\rangle = \sum_j \langle\phi|e'_j\rangle\langle e'_j|e_i\rangle = \sum_j \eta'_j U^*_{ij} \tag{4.76}$$

演算子 $\hat{A}$ の成分の変換則は

$$\begin{aligned} A_{ij} &= \langle e_i|\hat{A}|e_j\rangle \\ &= \sum_k \sum_l \langle e_i|e'_k\rangle\langle e'_k|\hat{A}|e'_l\rangle\langle e'_l|e_j\rangle = \sum_k \sum_l U_{ik}A'_{kl}U^*_{jl} \end{aligned} \tag{4.77}$$

4.9 エルミート演算子

演算子 $\hat{T}$ が, 任意の $|\psi\rangle, |\phi\rangle \in \mathcal{H}$ に対して,

$$(\hat{T}|\phi\rangle, |\psi\rangle) = (|\phi\rangle, \hat{T}|\psi\rangle) \tag{4.78}$$

を満たすとき, エルミート (Hermite) あるいは自己共役 (self-adjoint) である

とよばれる．（無限次元の場合にこれらの用語は区別されることがある．）ブラケット記法では,

$$\langle\phi|\hat{T}^\dagger|\psi\rangle = \langle\phi|\hat{T}|\psi\rangle \tag{4.79}$$

となるので, エルミート条件は次のようにも書ける:

$$\hat{T}^\dagger = \hat{T}. \tag{4.80}$$

成分 $T_{ij} = \langle e_i|\hat{T}|e_j\rangle$ で表すと, エルミート条件は

$$T^*_{ji} = T_{ij} \tag{4.81}$$

である．

また,

$$(\hat{U}^\dagger\hat{T}\hat{U})^\dagger = \hat{U}^\dagger\hat{T}^\dagger\hat{U} = \hat{U}^\dagger\hat{T}\hat{U} \tag{4.82}$$

から, エルミート性がユニタリ変換に際して保たれることが分かる．

問題 4.16 2 つのエルミート演算子の和はエルミートであることを示せ．積はどうか?

問題 4.17 エルミート演算子のスカラー倍がエルミートになる条件は何か.

問題 4.18 任意の演算子 $\hat{A}$ について, $\hat{A}^\dagger\hat{A}$, $\hat{A}^\dagger + \hat{A}$ がそれぞれエルミートであることを示せ.

さて

$$\hat{D} = \sum_{i=1}^{n} d_i|e_i\rangle\langle e_i|, \quad d_i \in \mathbb{R} \tag{4.83}$$

という形の演算子を考える．行列表示では $d_{ij} = \langle e_i|\hat{D}|e_j\rangle = d_i\delta_{ij}$ であり対角要素しか持たない．これは明らかにエルミート演算子である．基底を取り換えると, 対角行列ではなくなるが, エルミート性は保たれる．

エルミート演算子 $\hat{A}$ の正規化された固有ベクトルと固有値を $|a\rangle$, a とする．すなわち, $\hat{A}|a\rangle = a|a\rangle$ であるとする．

$$\langle a|\hat{A}|a\rangle = a\langle a|a\rangle = a \tag{4.84}$$

複素共役をとると,

$$a^* = (\langle a|\hat{A}|a\rangle)^\dagger = \langle a|\hat{A}^\dagger|a\rangle = \langle a|\hat{A}|a\rangle = a \tag{4.85}$$

が得られるので, $a^* = a$, つまり固有値 a は実数であることがわかる．また, それぞれ固有値 a_1, a_2 をもつ固有ケット $|a_1\rangle$, $|a_2\rangle$ に対して

$$
\begin{aligned}
0 &= \langle a_1|\hat{A}|a_2\rangle - \langle a_1|\hat{A}|a_2\rangle = \langle a_1|\hat{A}^\dagger|a_2\rangle - \langle a_1|\hat{A}|a_2\rangle \\
&= a_1\langle a_1|a_2\rangle - a_2\langle a_1|a_2\rangle = (a_1 - a_2)\langle a_1|a_2\rangle
\end{aligned} \tag{4.86}
$$

となるので, $a_1 \neq a_2$ なら, 固有ケットは直交していることが分かる.

$\hat{B}^\dagger = -\hat{B}$ をみたす演算子を反エルミート (anti-Hermite) という. エルミート演算子 $\hat{A}$ に対して $\mathrm{i}\hat{A}$ は反エルミートである. 反エルミート演算子の固有値は純虚数である.

問題 4.19 任意の演算子 $\hat{A}$ について, $\hat{A}^\dagger - \hat{A}$ が反エルミートであることを示せ.

4.10 非負演算子

エルミート演算子 $\hat{R}$ が任意の $|\psi\rangle \in \mathcal{H}$ に対して, $\langle\psi|\hat{R}|\psi\rangle \geq 0$ を満たすとき, 非負 (non-negative) 演算子と呼ばれる. 非負演算子の固有値は $\lambda_i \geq 0$ である. 同様に, $\langle\psi|\hat{R}|\psi\rangle > 0$ を満たすとき, 正値演算子と呼ばれる. 正値演算子の固有値は $\lambda_i > 0$ である. 正定値 (positive definite) 演算子とよばれることもある. この場合には正値は非負の意味で使われる.

4.11 射影演算子

射影演算子 (projection operator) とは

$$
\hat{P}^2 = \hat{P} \tag{4.87}
$$

を満たすエルミート演算子である*8).

規格化された任意の $|\psi\rangle$ に対して $\hat{P}_\psi = |\psi\rangle\langle\psi|$ は射影演算子である. 実際, $(|\psi\rangle\langle\psi|)(|\psi\rangle\langle\psi|) = |\psi\rangle\langle\psi|$, $(|\psi\rangle\langle\psi|)^\dagger = |\psi\rangle\langle\psi|$. 幾何学的にいえば, $\hat{P}_\psi$ は $|\psi\rangle$ が張る 1 次元部分空間への射影を与える演算子である.

規格化された 2 つの状態が $\langle\psi_1|\psi_2\rangle = 0$ を満たせば, $|\psi_1\rangle\langle\psi_1| + |\psi_2\rangle\langle\psi_2|$ は射影演算子である. $|\psi_1\rangle$, $|\psi_2\rangle$ が張る 2 次元部分空間への射影をあたえる. 一般に射影演算子 $\hat{P}$ はある部分空間への射影を与える.

一般に, 2 つの射影演算子 $\hat{P}_1$, $\hat{P}_2$ が $\hat{P}_1\hat{P}_2 = \hat{P}_2\hat{P}_1 = 0$ を満たすとき, 互いに直交しているという. このとき, $\hat{P}_1 + \hat{P}_2$ は射影演算子である. $\mathcal{V}_1 \oplus \mathcal{V}_2$ への射影である.

---

*8) エルミート性を要求せず, 式 (4.87) をみたす演算子を射影演算子とよぶ場合がある. エルミート性を強調するために, 正射影 (orthogonal projection) 演算子や直交射影演算子とよばれることもあるが, ここでは, 単に射影演算子といえばエルミート性を満たしていると考える.

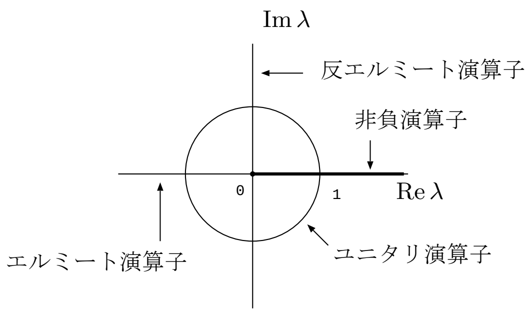

図 4.3　正規演算子の固有値による分類

分類	定義	固有値
正規演算子	$\hat{N}^\dagger\hat{N} = \hat{N}\hat{N}^\dagger$	$\lambda_i \in \mathbb{C}$
エルミート演算子	$\hat{T}^\dagger = \hat{T}$	$\lambda_i \in \mathbb{R}$
ユニタリ演算子	$\hat{U}^\dagger = \hat{U}^{-1}$	$\lambda_i \in \mathbb{C}$, $\lvert\lambda_i\rvert = 1$
射影演算子	$\hat{P}^2 = \hat{P}$	$\lambda_i \in \{0, 1\}$
非負演算子	$\forall\lvert\psi\rangle : \langle\psi\rvert\hat{R}\lvert\psi\rangle \geq 0$	$\lambda_i \in \mathbb{R}$, $\lambda_i \geq 0$

表 4.2　正規演算子のいろいろなクラス

P が射影演算子なら, $\hat{Q} = \hat{1} - \hat{P}$ も射影演算子になる. 直交補空間 $\mathcal{V}_\perp$ への射影をあたえる.

射影演算子の固有値は 0 または 1 である. 実際, $\hat{P}|p\rangle = p|p\rangle$ であるとすると, $0 = (\hat{P}^2 - \hat{P})|p\rangle = (p^2 - p)|p\rangle$ なので, $p = 0$ または $p = 1$ でなければならない.

問題 4.20 演算子 $\hat{S}_{ab} = |a\rangle\langle b|$ が $\hat{S}_{ab}^2 = \hat{S}_{ab}$ となるための条件を求めよ. $\hat{S}_{ab}$ がエルミートになる条件を示せ.

4.12　正規演算子

演算子 $\hat{N}$ が

$$\hat{N}^\dagger\hat{N} = \hat{N}\hat{N}^\dagger \tag{4.88}$$

を満たすとき, 正規 (normal) 演算子であるとよばれる.

別の定義は, 任意の $|\phi\rangle, |\psi\rangle \in \mathcal{H}$ に対して

$$(\hat{N}|\phi\rangle, \hat{N}|\psi\rangle) = (\hat{N}^\dagger|\phi\rangle, \hat{N}^\dagger|\psi\rangle), \tag{4.89}$$

あるいは,

$$\langle\phi|\hat{N}^\dagger\hat{N}|\psi\rangle = \langle\phi|\hat{N}\hat{N}^\dagger|\psi\rangle \tag{4.90}$$

が成り立つことである[*9)].

ユニタリ演算子, エルミート演算子, 反エルミート演算子はいずれも正規演算子である. 射影演算子はエルミートなので正規演算子である[*10)].

任意の演算子 $\hat{A}$ に対して

$$\hat{A} = \frac{\hat{A}+\hat{A}^\dagger}{2} + \mathrm{i}\frac{\hat{A}-\hat{A}^\dagger}{2\mathrm{i}} = \hat{A}_1 + \mathrm{i}\hat{A}_2 \tag{4.91}$$

という分解をすると, $\hat{A}_1$, $\hat{A}_2$ はそれぞれエルミートである. 複素数に対応させて考えると, $\hat{A}_1 = (\hat{A}+\hat{A}^\dagger)/2$ は実部に, $\hat{A}_2 = (\hat{A}-\hat{A}^\dagger)/2\mathrm{i}$ は虚部に相当するものである.

とくに $[\hat{A}_1, \hat{A}_2] = 0$ の場合には

$$\hat{A}^\dagger\hat{A} = \hat{A}\hat{A}^\dagger \tag{4.92}$$

が成り立つ. すなわち正規演算子になる. 正規性もユニタリ変換下で保たれることに注意する.

エルミート演算子 $\hat{A}_1$, $\hat{A}_2$ が可換であるので, 同時固有ケットが存在する:

$$\hat{A}_1|\lambda\rangle = a_1|\lambda\rangle, \quad \hat{A}_2|\lambda\rangle = a_2|\lambda\rangle. \tag{4.93}$$

a_1, $a_2 \in \mathbb{R}$.

$$\hat{A}|\lambda\rangle = (a_1 + \mathrm{i}a_2)|\lambda\rangle = a|\lambda\rangle \tag{4.94}$$

ただし, $a = a_1 + \mathrm{i}a_2$.

正規演算子は次章で見るようにスペクトル分解定理において重要な役割を果たす. 量子論に登場する演算子は若干の例外を除いてはすべて正規である.

表 4.2 に正規演算子とそのサブクラスに関するまとめを書いておく.

問題 4.21 任意の正規演算子 $\hat{N}$ は互いに可換なユニタリ演算子 $\hat{U}$ とエルミート演算子 $\hat{T}$ の積で表せることを示せ.

---

*9) 通常の内積記号を用いるのはこれで最後になるだろう. 以後は一貫してブラケット記法を用いる.

*10) 正規演算子は量子論で非常に重要な役割を果たす. しかし, 量子論の教科書において陽に取り上げられることは少ない. 線形代数の教科書においても同様である.

