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
この内容は京都大学工学部電気電子工学科における授業「電気電子工学のための量子論」の補助的資料として準備されたものです．個人使用以外の目的で利用される場合には著者の許諾を得てください．

第 5 章
演算子のスペクトル分解

演算子の作用は基底を定めると行列として具体的に捉えることができる．しかし, $n \times n$ の行列は見通しのよいものとはいえない．基底の選び方によっては, 行列が対角的になって n 個の対角成分で演算子の作用が表される．この章では, 正規演算子が正規直交基底を選ぶことで対角化されることを示す.

5.1 固有方程式

演算子 $\hat{A}$ に対する固有値 λ と固有ケット $|\lambda\rangle$ の関係 $\hat{A}|\lambda\rangle = \lambda|\lambda\rangle$ を

$$(\hat{A} - \lambda\hat{1})|\lambda\rangle = 0 \tag{5.1}$$

と表わし, さらに適当な正規直交基底 $\{|e_i\rangle\}$ を用いて行列で表現すると,

$$\sum_{j=1}^{n}(A_{ij} - \lambda\delta_{ij})a_j = 0 \quad (i = 1, 2, \ldots, n) \tag{5.2}$$

ただし, $A_{ij} = \langle e_i|\hat{A}|e_j\rangle$, $a_i = \langle e_i|\lambda\rangle$, そして, n はヒルベルト空間の次元である．この連立 1 次方程式がゼロでない解 (a_j) を持つためには,

$$\Phi(\lambda) = \det(A_{ij} - \lambda\delta_{ij}) = 0 \tag{5.3}$$

でなければならない．det は行列式を表す．これは λ に関する n 次方程式 (複素係数) である．代数学の基本定理によって, この方程式は複素数の範囲で解を

$$\hat{N} = \lambda\hat{P} + \hat{Q}\hat{N}\hat{P}$$
$$\doteq \left(\begin{array}{c|c} \lambda & 0 \\ \hline 0 & \hat{Q}\hat{N}\hat{Q} \end{array}\right)$$

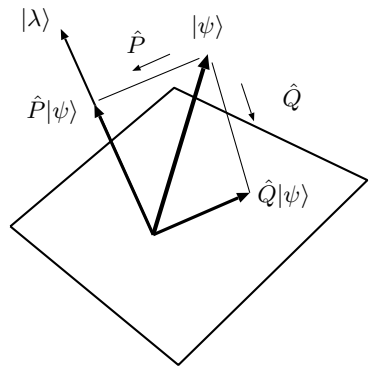

図 5.1　固有空間と補空間への射影

(重複を含めて) n 個もつ. すなわち, 固有値は重複を含めて n 個ある.

問題 5.1 特性方程式 $\Phi(\lambda) = 0$ が基底のとりかたに依らないことを示せ.

5.2　固有ケットと固有部分空間

ケット $|a_j\rangle$ が固有値 a_j の固有ケットである場合, 任意の $c \in \mathbb{C}$ に対して $c|a_j\rangle$ も同じ固有値をもつ固有ケットである. つまり, 固有ケットの集合 $\mathcal{V}_j = \{c|a_j\rangle | c \in \mathbb{C}\}$ は 1 次元部分空間になっている. 正規化されたケット $|a_j\rangle/\sqrt{\langle a_j|a_j\rangle}$ もこの中に含まれている.

固有値が縮退している場合には, 同じ固有値 a_j をもつ固有ケットを k_j 個独立に選ぶことができる*1). これらを, $|a_j, l\rangle$ $(l = 1, 2, \ldots, k_j)$ とする. k_j は縮退度を表す. この場合, 固有ケットの集合は k_j 次元部分空間となる:

$$\mathcal{V}_j = \{c_1|a_j, 1\rangle + c_2|a_j, 2\rangle + \ldots c_{k_j}|a_j, k_j\rangle \,|\, c_1, c_2, \ldots, c_{k_j} \in \mathbb{C}\} \quad (5.4)$$

全体像を見ておこう. 固有値方程式の相異なる解を a_j $(j = 1, 2, \ldots, d)$ とする. $d \leq n$ である. 固有値 a_j の縮退度を k_j とすると, $\sum_{j=1}^{d} k_j = n$ が成り立つ. そして, ヒルベルト空間は固有部分空間の直和

$$\mathcal{H} = \mathcal{V}_1 \oplus \cdots \oplus \mathcal{V}_d, \quad \dim \mathcal{V}_j = k_j \quad (5.5)$$

として表すことができる. ただし, 一般に $\mathcal{V}_i$ と $\mathcal{V}_j$ $(i \neq j)$ は必ずしも直交していないことに注意する.

5.3　スペクトル分解と演算子の関数

後に述べるように, 任意の正規演算子 $\hat{N}$ は**正規直交**基底 $\{|e_i\rangle\}$ を適当に選

*1)　演算子に対する条件が必要であるが, それについては後に述べる.

ぶことによって,

$$\hat{N} = \sum_{i=1}^{n} n_i |e_i\rangle\langle e_i| = \sum_{i=1}^{n} n_i \hat{P}_i \tag{5.6}$$

のように表すことができる. $n_i \in \mathbb{C}$ は $\hat{N}$ の固有値, $|e_i\rangle$ は対応する固有ケットであり, $\hat{N}|e_i\rangle = n_i|e_i\rangle$ を満たす. $\hat{P}_i = |e_i\rangle\langle e_i|$ は対応する射影演算子であり, $\hat{P}_i\hat{P}_j = \hat{P}_i\delta_{ij}$ である. これを $\hat{N}$ のスペクトル分解という[*2]. 正規演算子がスペクトル分解できることは後に証明するが, ここではその有用性を見ておく.

スペクトル分解された演算子 $\hat{N}$ の 2 乗は

$$\begin{aligned}\hat{N}^2 &= \sum_{i=1}^{n} n_i \hat{P}_i \sum_{j=1}^{n} n_j \hat{P}_j = \sum_{i=1}^{n}\sum_{j=1}^{n} n_i n_j \hat{P}_i \hat{P}_j \\ &= \sum_{i=1}^{n}\sum_{j=1}^{n} n_i n_j \delta_{ij} \hat{P}_i = \sum_{i=1}^{n} n_i^2 \hat{P}_i \end{aligned} \tag{5.7}$$

と計算できる. 射影演算子の直交条件 $\hat{P}_i\hat{P}_j = \delta_{ij}\hat{P}_i$ を用いた. さらに,

$$\hat{N}^k = \sum_{i=1}^{n} n_i^k \hat{P}_i \tag{5.8}$$

もっと一般にべき展開された関数 $f(x) = \sum_k a_k x^k$ に対して

$$f(\hat{N}) = \sum_k a_k \hat{N}^k = \sum_k a_k \sum_{i=1}^{n} n_i^k \hat{P}_i = \sum_{i=1}^{n} f(n_i)\hat{P}_i \tag{5.9}$$

が得られる.

たとえば, $f(x) = \exp x = \sum_{k=0}^{\infty} x^k/k!$ に対して

$$\exp \hat{N} := \sum_{k=0}^{\infty} \frac{\hat{N}^k}{k!} = \sum_{i=1}^{n} (\exp n_i)\hat{P}_i \tag{5.10}$$

が定義できる. とくに, $\hat{N}$ が反エルミート演算子の場合, $\exp \hat{N}$ はユニタリになる.

指数関数のテイラー展開に依らない, 別の定義として

$$\exp x := \lim_{k\to\infty} \left(1 + \frac{x}{k}\right)^k \tag{5.11}$$

があるが, これを用いて,

$$\exp \hat{N} := \lim_{k\to\infty} \left(\hat{1} + \frac{\hat{N}}{k}\right)^k \tag{5.12}$$

のように考えることもできる.

すべての固有値がゼロでない場合,

*2) $\{\hat{P}_i\}$ が互いに直交する正射影演算子であることを強調する場合には, 直交スペクトル分解あるいは正スペクトル分解とよぶ.

$$\hat{N}^{-1} = \sum_{i=1}^{n} n_i^{-1} \hat{P}_i \tag{5.13}$$

は $\hat{N}$ の逆演算子である.

5.4 正規演算子のスペクトル分解定理

任意の正規演算子 $\hat{N}$ は正規直交基底 $\{|e_i\rangle\}$ を適当に選ぶことによって,

$$\hat{N} = \sum_{i=1}^{n} n_i |e_i\rangle\langle e_i| = \sum_{i=1}^{n} n_i \hat{P}_i \tag{5.14}$$

のように表すことができる. $n_i \in \mathbb{C}$ は $\hat{N}$ の複素固有値, $|e_i\rangle$ は対応する固有ケットであり, $\hat{N}|e_i\rangle = n_i|e_i\rangle$ を満たす. $\hat{P}_i = |e_i\rangle\langle e_i|$ は対応する射影演算子である.

証明

$\hat{N}$ の固有値 λ を一つ選ぶ. 対応する固有空間を $\mathcal{V}_\lambda$ とする (縮退の可能性があるので, $\dim \mathcal{V}_\lambda = l \geq 1$ とする). $\hat{N}$ の正規性 ($\hat{N}\hat{N}^\dagger = \hat{N}^\dagger\hat{N}$) によって, $|\lambda\rangle \in \mathcal{V}_\lambda$ に対して,

$$\hat{N}\hat{N}^\dagger|\lambda\rangle = \hat{N}^\dagger\hat{N}|\lambda\rangle = \lambda\hat{N}^\dagger|\lambda\rangle \tag{5.15}$$

がいえる. この式は, $\hat{N}^\dagger|\lambda\rangle$ が $\hat{N}$ の固有値 λ の固有ベクトルであることを意味する. すなわち, $|\lambda\rangle \in \mathcal{V}_\lambda \Rightarrow \hat{N}^\dagger|\lambda\rangle \in \mathcal{V}_\lambda$ が成り立ち, $\hat{N}^\dagger$ は $\mathcal{V}_\lambda$ 上の演算子と考えることができる. この l 次元部分空間に制限された演算子 $\hat{N}^\dagger$ の固有値の 1 つを ν とし, 正規化された固有ベクトル $|\nu\rangle$ を選ぶ. $\hat{N}^\dagger|\nu\rangle = \nu|\nu\rangle$, $\hat{N}|\nu\rangle = \lambda|\nu\rangle$ である. このように, $\hat{N}$ と $\hat{N}^\dagger$ が共通の固有ケットを持つことが正規演算子の特徴である. ただし, 固有値は同じとは限らない*3).

この固有ベクトル $|\nu\rangle$ を用いて, 2 つの射影演算子 $\hat{P} = |\nu\rangle\langle\nu|$ と $\hat{Q} = \hat{1} - \hat{P}$ を導入する. $\hat{P}\hat{Q} = \hat{Q}\hat{P} = 0$, であることに注意する. すると, $\hat{N}$ を次のように表せる:

$$\hat{N} = (\hat{P} + \hat{Q})\hat{N}(\hat{P} + \hat{Q}) = \hat{P}\hat{N}\hat{P} + \hat{Q}\hat{N}\hat{P} + \hat{P}\hat{N}\hat{Q} + \hat{Q}\hat{N}\hat{Q}. \tag{5.16}$$

ここで, まず $\hat{P}\hat{N}\hat{P} = \lambda\hat{P}$ がいえる. また, $\hat{Q}\hat{N}\hat{P} = \lambda\hat{Q}\hat{P} = 0$ である. さらに, $\hat{Q}\hat{N}^\dagger\hat{P} = \nu\hat{Q}\hat{P} = 0$, すなわち $\hat{P}\hat{N}\hat{Q} = 0$ であることが分かる. よって

$$\hat{N} = \lambda\hat{P} + \hat{Q}\hat{N}\hat{Q} \tag{5.17}$$

と書ける. (図 5.1 を参照)

最後に, $\hat{Q}\hat{N}\hat{Q}$ が正規演算子であることを示す. そのために, $\hat{Q}\hat{N} =$

*3) 結果的に $\lambda^* = \nu$ であることが分かる.

$\hat{Q}\hat{N}(\hat{P}+\hat{Q}) = \hat{Q}\hat{N}\hat{Q}$, $\hat{Q}\hat{N}^\dagger = \hat{Q}\hat{N}^\dagger(\hat{P}+\hat{Q}) = \hat{Q}\hat{N}^\dagger\hat{Q}$ を用いる．すると，

$$\begin{aligned}\hat{Q}\hat{N}\hat{Q}\hat{Q}\hat{N}^\dagger\hat{Q} &= \hat{Q}\hat{N}\hat{Q}\hat{N}^\dagger\hat{Q} = \hat{Q}\hat{N}\hat{N}^\dagger\hat{Q} \\ &= \hat{Q}\hat{N}^\dagger\hat{N}\hat{Q} = \hat{Q}\hat{N}^\dagger\hat{Q}\hat{N}\hat{Q} = \hat{Q}\hat{N}^\dagger\hat{Q}\hat{Q}\hat{N}\hat{Q}\end{aligned} \tag{5.18}$$

となって，正規性が示せた．$\hat{Q}\hat{N}\hat{Q}$ は次元が $(n-1)$ の正規演算子と見なすことができる．したがって，同様の議論を $(n-1)$ 回繰り返すことで，対角化が完了する．

問題 5.2 エルミート演算子のスペクトル分解に対して，上に類似の議論を繰りかえせ．

5.5 縮退の影響

固有値の縮退がスペクトル分解においてどのような影響をもたらすか見ておこう．簡単のために，$n=3$, $d=2$ の場合を考える．スペクトル分解

$$\begin{aligned}\hat{N} &= \lambda_1|e_1\rangle\langle e_1| + \lambda_2|e_2\rangle\langle e_2| + \lambda_3|e_3\rangle\langle e_3| \\ &= \lambda_1\hat{p}_1 + \lambda_2\hat{p}_2 + \lambda_3\hat{p}_3\end{aligned} \tag{5.19}$$

において，$\lambda_1 \neq \lambda_2 = \lambda_3$ であったとする．すると，

$$\hat{N} = \lambda_1|e_1\rangle\langle e_1| + \lambda_2(|e_2\rangle\langle e_2| + |e_3\rangle\langle e_3|) = \lambda_1\hat{P}_1 + \lambda_2\hat{P}_2 \tag{5.20}$$

と整理することができる． ここで，$\hat{P}_1 = \hat{p}_1$，$\hat{P}_2 = \hat{p}_2 + \hat{p}_3$ とおいた．$\hat{P}_i\hat{P}_j = \hat{P}_i\delta_{ij}$ が成り立っている． ここで注意しなければならないのは，$\hat{P}_2$ の表現が一意的でないことである．つまり，部分空間における任意のユリタリ基底変換

$$|e_2'\rangle = |e_2\rangle U_{22} + |e_3\rangle U_{32}, \quad |e_3'\rangle = |e_2\rangle U_{23} + |e_3\rangle U_{33} \tag{5.21}$$

に対して

$$\hat{P}_2 = |e_2\rangle\langle e_2| + |e_3\rangle\langle e_3| = |e_2'\rangle\langle e_2'| + |e_3'\rangle\langle e_3'| \tag{5.22}$$

が成り立つ．

5.6 スペクトル分解のアルゴリズム

$\hat{A}$ をスペクトル分解可能な演算子であるとする．互いに異なる固有値を λ_i $(i=1,2,\ldots,d)$ とする．$d \leq n$ である．$\mathcal{V}_i$ を固有値 λ_i に対応する固有空間，$\hat{P}_i$ を対応する射影演算子であるとする．$|\psi_i\rangle \in \mathcal{V}_i$ に対して

$$(\hat{A} - \lambda_i \hat{1})|\psi_i\rangle = 0 \tag{5.23}$$

が成り立つ. 式を簡単にするため, $\lambda \in \mathbb{C}$ に対して

$$\hat{A}(\lambda) = \hat{A} - \lambda \hat{1} \tag{5.24}$$

を導入する. 任意の $|\psi\rangle \in \mathcal{H}$ に対して $\hat{P}_i|\psi\rangle \in \mathcal{V}_i$ なので,

$$\hat{A}(\lambda_i)\hat{P}_i = 0 \tag{5.25}$$

が成り立つ. これより,

$$\begin{aligned}
&\hat{A}(\lambda_1)\cdots\hat{A}(\lambda_{i-1})\hat{A}(\lambda_{i+1})\cdots\hat{A}(\lambda_d) \\
&= \hat{A}(\lambda_1)\cdots\hat{A}(\lambda_{i-1})\hat{A}(\lambda_{i+1})\cdots\hat{A}(\lambda_d)(\hat{P}_1 + \hat{P}_2 + \cdots + \hat{P}_d) \\
&= \hat{A}(\lambda_1)\cdots\hat{A}(\lambda_{i-1})\hat{A}(\lambda_{i+1})\cdots\hat{A}(\lambda_d)\hat{P}_i \\
&= (\lambda_i - \lambda_1)\cdots(\lambda_i - \lambda_{i-1})(\lambda_i - \lambda_{i+1})\cdots(\lambda_i - \lambda_d)\hat{P}_i
\end{aligned} \tag{5.26}$$

となることが分かる. これを用いると, 射影演算子を

$$\begin{aligned}
\hat{P}_i &= \frac{(\hat{A} - \lambda_1\hat{1})\cdots(\hat{A} - \lambda_{i-1}\hat{1})(\hat{A} - \lambda_{i+1}\hat{1})\cdots(\hat{A} - \lambda_d\hat{1})}{(\lambda_i - \lambda_1)\cdots(\lambda_i - \lambda_{i-1})(\lambda_i - \lambda_{i+1})\cdots(\lambda_i - \lambda_d)} \\
&= \prod_{j=1, j\neq i}^{d} \frac{\hat{A} - \lambda_j\hat{1}}{\lambda_i - \lambda_j}
\end{aligned} \tag{5.27}$$

のように, 演算子 $\hat{A}$ と固有値たちで表せる.

たとえば, $d = 2$ の場合, $\hat{A}$ のスペクトル分解は

$$\hat{A} = \lambda_1 \frac{\hat{A} - \lambda_2\hat{1}}{\lambda_1 - \lambda_2} + \lambda_2 \frac{\hat{A} - \lambda_1\hat{1}}{\lambda_2 - \lambda_1} \tag{5.28}$$

と表すことができる.

問題 5.3 $d = 3$ の場合のスペクトル分解を示せ.

問題 5.4 $\hat{A} = \mathrm{diag}(1, 1, 2)$ をスペクトル分解せよ. diag は引数を要素にもつ対角行列を表す.

問題 5.5 2 次元の行列で表現される演算子:

$$\hat{\sigma}_1 \doteq \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{\sigma}_2 \doteq \begin{pmatrix} 0 & -\mathrm{i} \\ \mathrm{i} & 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{\sigma}_3 \doteq \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \tag{5.29}$$

はパウリ演算子と呼ばれる. これらのエルミート演算子をスペクトル分解してみよ.

5.7 スペクトル分解できない場合

演算子が正規直交基底でスペクトル分解できるための必要十分条件は, 演算子が正規であることである. 正規でない一般の演算子は正規直交基底でスペクトル分解できないのであるが, その理由を調べておこう.

一般論は式が複雑になるだけなので, ここでは 2 次元の場合を見ることにする. 一般の次元においても事情は本質的に同じである.

5.7.1 固有空間の非直交性

(正規ではない) 演算子 $\hat{A}$ の固有値を λ_1, λ_2 とおく. ここではまず縮退していない場合, $\lambda_1 \neq \lambda_2$ を考える. $\hat{A}$ の作用は, 固有ベクトルが直交していないので,

$$\hat{A}|e_1\rangle = \lambda_1|e_1\rangle, \quad \hat{A}(k|e_1\rangle + |e_2\rangle) = \lambda_2(k|e_1\rangle + |e_2\rangle) \tag{5.30}$$

と表すことができる. $|e_1\rangle$ は λ_1 に対する固有空間の単位ケット, $|e_2\rangle$ はそれに直交する任意の単位ケットである. $k \neq 0$ は $k|e_1\rangle + |e_2\rangle$ が λ_2 に対する固有空間に入るように決められているとする. これより, $|e_2\rangle$ に対する作用は

$$\hat{A}|e_2\rangle = k(\lambda_2 - \lambda_1)|e_1\rangle + \lambda_2|e_2\rangle \tag{5.31}$$

であることが分かる. したがって, $\hat{A}$ の行列表示は

$$\hat{A} \doteq \begin{bmatrix} \lambda_1 & k(\lambda_2 - \lambda_1) \\ 0 & \lambda_2 \end{bmatrix} \tag{5.32}$$

である. 特性方程式が $\Phi(\lambda) = (\lambda - \lambda_1)(\lambda - \lambda_2)$ となっていることが確認できる.

非直交のケットの組を

$$|f_1\rangle = |e_1\rangle, \quad |f_2\rangle = k|e_1\rangle + |e_2\rangle \tag{5.33}$$

と定義する. ここで,

$$\langle g_i|f_j\rangle = \delta_{ij} \quad (i, j = 1, 2) \tag{5.34}$$

を満たすような $|g_1\rangle$, $|g_2\rangle$ を求めよう. これは $\{|f_1\rangle, |f_2\rangle\}$ に対する双対基底であり, 具体的には,

$$|g_1\rangle = |e_1\rangle - k|e_2\rangle \quad |g_2\rangle = |e_2\rangle \tag{5.35}$$

と求めることができる. これらも非正規, 非直交である. そして, 演算子 $\hat{A}$ は

$$\hat{A} = \lambda_1|f_1\rangle\langle g_1| + \lambda_2|f_2\rangle\langle g_2| = \lambda_1\hat{S}_1 + \lambda_2\hat{S}_2 \tag{5.36}$$

のように表現することができる. $\hat{S}_1 + \hat{S}_2 = \hat{1}$ である.

これはスペクトル分解に類似しているが, $\hat{S}_1$, $\hat{S}_2$ が正射影演算子になっていない. すなわち, $\hat{S}_1^2 = \hat{S}_1$, $\hat{S}_2^2 = \hat{S}_2$, $\hat{S}_1\hat{S}_2 = \hat{S}_1\hat{S}_2 = 0$ は成り立っているが, $\hat{S}_1$ も $\hat{S}_2$ もエルミートではない. 非直交スペクトル分解とよぶこともある.

問題 5.6 幾何学的な意味を考えよ.

問題 5.7 $\hat{S}_1$ の固有値と固有ベクトルを求めよ.

問題 5.8 演算子 (5.32) を公式 (5.28) を用いて非直交スペクトル分解せよ.

問題 5.9 2 次元の正規演算子は

$$\hat{N} = \mathrm{e}^{\mathrm{i}\varphi} s_0 \hat{1} + \mathrm{e}^{\mathrm{i}\phi}(s_1\hat{\sigma}_1 + s_2\hat{\sigma}_2 + s_3\hat{\sigma}_3) \tag{5.37}$$

φ, $\phi \in [-\pi, \pi)$, s_0, s_1, s_2, $s_3 \in \mathbb{R}$, の形で表せることを示せ.

5.7.2 縮退 — ケース 1

k を有限の値に保ったまま, 固有値が近づいた, $(\lambda_2 \to \lambda_1)$ とすると,

$$\hat{A} \to \begin{bmatrix} \lambda_1 & 0 \\ 0 & \lambda_1 \end{bmatrix} \tag{5.38}$$

となって対角化され, 正規演算子になる. 特性方程式は $\Phi(\lambda) = (\lambda - \lambda_1)^2$ である. 2 次元の任意のケット $|\psi\rangle = c_1|e_1\rangle + c_2|e_2\rangle$ に対して $\hat{A}|\psi\rangle = \lambda|\psi\rangle$ となる. そして, 2 つの直交するケットを固有ケットとして選ぶことができる. さらに,

$$\hat{A} = \lambda_1(|e_1\rangle\langle e_1| + |e_2\rangle\langle e_2|) \tag{5.39}$$

とスペクトル分解することができる. 縮退によって, 固有空間の次元が 2 になり非直交性の問題が解消されたことになる*4).

5.7.3 縮退 — ケース 2

次に, $k(\lambda_2 - \lambda_1) = K$ を有限の値に保ったまま, $\lambda_2 \to \lambda_1$ とすると,

$$\hat{A} \to \begin{bmatrix} \lambda_1 & K \\ 0 & \lambda_1 \end{bmatrix} \tag{5.40}$$

となる. ここで問題になるのは, 極限操作に伴って $k \to \infty$ となるので,

$$|f_2\rangle \to e^{\mathrm{i}\phi}|f_1\rangle \tag{5.41}$$

*4) 固有値が縮退することは本来稀なことであるが, 系の対称性に起因する縮退は一般的である. また, 調整可能なパラメータが十分多い場合にはそれらを調整して縮退状態をつくることができる.

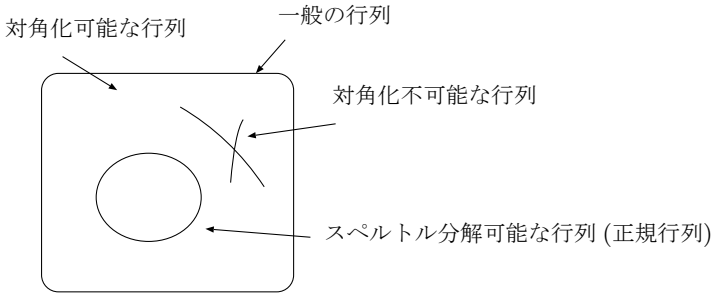

図 5.2 対角化可能性による行列の分類. 正規行列はユニタリ行列で対角化可能なものである. いいかえると, 正規直交基底で対角的になるものである. 対角化可能でない行列は例外的なものであり, 一般に要素を少し変化させると, 対角化可能なものになる (構造不安定性). したがって, 物理では登場の機会は極めて少ない.

となることである. つまり, 固有ケットを 1 つしかとれなくなるのである. このために, スペクトル分解に類似の式さえ作れなくなるという困った状況に陥る.

これは線形代数における一般固有値問題*5) という概念が必要となる状況である. 行列のジョルダン標準形などはこれに関する概念である. 極限のとり方からも想像されるように, 非常に特異な状況に関するものであり, 少なくとも通常の量子論で一般固有値問題が必要となるケースはほとんどないといってよい.

5.8 行列の対角化との関係

念のため, スペクトル分解と線形代数における行列の対角化との関係を確認しておこう. 行列 A がベクトル $\boldsymbol{x}$, $\boldsymbol{y}$ を $\boldsymbol{y} = A\boldsymbol{x}$ のように関係づけているとき, ベクトルの基底変換 $\boldsymbol{x}' = L\boldsymbol{x}$, $\boldsymbol{y}' = L\boldsymbol{y}$ を行うと, $\boldsymbol{y}' = (L^{-1}AL)\boldsymbol{x}'$ となるが, 正則行列 L をうまく選ぶことによって,

$$D = L^{-1}AL = \mathrm{diag}(\lambda_1, \lambda_2, \ldots \lambda_n) \tag{5.42}$$

が対角行列にできる場合, 行列 A は対角化可能であるという. D の要素が A の固有値に対応する. 式 (5.42) を, 逆に解くと

$$A = LDL^{-1} \tag{5.43}$$

である. 逆行列 L^{-1} の転置を $M = (L^{-1})^{\mathrm{T}}$ とおく. L と M をそれぞれ n 個の縦ベクトルにスライスする：

$$L = \Big[\boldsymbol{f}_1, \boldsymbol{f}_1, \cdots, \boldsymbol{f}_n\Big], \quad M = \Big[\boldsymbol{g}_1, \boldsymbol{g}_1, \cdots, \boldsymbol{g}_n\Big]. \tag{5.44}$$

すると,

*5) 今の場合, $(\hat{A} - \lambda\hat{1})|\,\rangle = 0$ を満たすのは, $|\,\rangle = |e_1\rangle$ だけであるが, 固有値, 固有ケットの条件を $(\hat{A} - \lambda\hat{1})^2|\,\rangle = 0$ と拡張すれば, $|\,\rangle = |e_2\rangle$ によって満たされる.

$$
\begin{aligned}
A = LDM^{\mathrm{T}} &= \Big[\boldsymbol{f}_1, \boldsymbol{f}_1, \cdots, \boldsymbol{f}_n\Big] \begin{bmatrix} \lambda_1 & & & \\ & \lambda_2 & & \\ & & \ddots & \\ & & & \lambda_n \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \boldsymbol{g}_1^{\mathrm{T}} \\ \boldsymbol{g}_1^{\mathrm{T}} \\ \vdots \\ \boldsymbol{g}_n^{\mathrm{T}} \end{bmatrix} \\
&= \lambda_1 \boldsymbol{f}_1 \boldsymbol{g}_1^{\mathrm{T}} + \lambda_2 \boldsymbol{f}_2 \boldsymbol{g}_2^{\mathrm{T}} + \cdots \lambda_n \boldsymbol{f}_n \boldsymbol{g}_n^{\mathrm{T}} \\
&= \lambda_1 S_1 + \lambda_2 S_2 + \cdots \lambda_n S_n \qquad (5.45)
\end{aligned}
$$

が得られる．これは式 (5.36) に対応する．行列 $S_i = \boldsymbol{f}_i \boldsymbol{g}_i^{\mathrm{T}}$ が $S_i S_j = \delta_{ij} S_i$ を満たすことは, $I = LL^{-1} = LM^{\mathrm{T}}$ から, 簡単に確かめられる．しかし, S_i は一般にエルミートではない．

もし, L がユニタリ行列なら,

$$
M = (L^{-1})^{\mathrm{T}} = (L^{\dagger})^{\mathrm{T}} = L^{*} \qquad (5.46)
$$

なので, $\boldsymbol{g}_i = \boldsymbol{f}_i^{*}$ となる．つまり,

$$
A = \lambda_1 \boldsymbol{f}_1 \boldsymbol{f}_1^{*\mathrm{T}} + \lambda_2 \boldsymbol{f}_2 \boldsymbol{f}_2^{*\mathrm{T}} + \cdots \lambda_n \boldsymbol{f}_n \boldsymbol{f}_n^{*\mathrm{T}}. \qquad (5.47)
$$

において, $S_i = \boldsymbol{f}_i \boldsymbol{f}_i^{*\mathrm{T}}$ はエルミートであり, (正) 射影行列になる．実際,

$$
S_i^{\dagger} = (\boldsymbol{f}_i \boldsymbol{f}_i^{*\mathrm{T}})^{*\mathrm{T}} = (\boldsymbol{f}_i^{*} \boldsymbol{f}_i^{\mathrm{T}})^{\mathrm{T}} = \boldsymbol{f}_i \boldsymbol{f}_i^{*\mathrm{T}} = S_i. \qquad (5.48)
$$

このとき, 行列 A は正規である．

5.9 交換子

演算子は作用の順序に意味がある．たとえば $\hat{A}\hat{B}|\psi\rangle$, と $\hat{B}\hat{A}|\psi\rangle$ は一般に異なっている．この違いに相当する演算子

$$
[\hat{A}, \hat{B}] = \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A} \qquad (5.49)
$$

を交換関係, または交換子という．$[\hat{A}, \hat{B}]$ のとき, $\hat{A}$, $\hat{B}$ は交換可能, あるいは可換であるといわれる．以下の演算規則は簡単に導ける．

$$
\begin{aligned}
&[\hat{A}, \hat{A}] = 0, \\
&[\hat{A}, \hat{B}] = -[\hat{B}, \hat{A}] \\
&[\hat{A}, \hat{B}\hat{C}] = \hat{B}[\hat{A}, \hat{C}] + [\hat{A}, \hat{B}]\hat{C} \\
&[\hat{A}\hat{B}, \hat{C}] = \hat{A}[\hat{B}, \hat{C}] + [\hat{A}, \hat{C}]\hat{B} \qquad (5.50)
\end{aligned}
$$

交換子の計算を行う場合には, むやみに展開せず, これらの式を利用するのがコツである[*6)]．さらに,

*6) 微分のチェーンルールとの類似性に注意する: $(fg)' = f'g + fg'$

$$[\hat{A},[\hat{B},\hat{C}]]+[\hat{B},[\hat{C},\hat{A}]]+[\hat{C},[\hat{A},\hat{B}]]=0 \tag{5.51}$$

なども成り立つ.

問題 5.10 上式が成り立っていることを確かめよ.

5.10 スペクトル分解と交換可能性

2 つの演算子 $\hat{A}$, $\hat{B}$ が

$$\hat{A}=\sum_i a_i\hat{P}_i,\quad \hat{B}=\sum_i b_i\hat{P}_i \tag{5.52}$$

であったとしよう.

$$\hat{A}\hat{B}=\sum_i\sum_j a_ib_j\hat{P}_i\hat{P}_j=\sum_i\sum_j a_ib_j\delta_{ij}P_i=\sum_i a_ib_iP_i \tag{5.53}$$

であり, 明らかに $\hat{B}\hat{A}$ に等しい. したがって, $[\hat{A},\hat{B}]=0$. このように固有ケットがすべて共通の演算子同士は交換可能である.

逆にいえば, 固有ケットの不一致が演算子の交換を妨げているということである.

固有値が縮退している場合には少し注意が必要である. 簡単な具体例 ($n=3$) を用いて調べておく.

$$\begin{aligned}\hat{A}&=a_1|a_1\rangle\langle a_1|+a_2|a_2\rangle\langle a_2|+a_3|a_3\rangle\langle a_3|\\ \hat{B}&=b_1|b_1\rangle\langle b_1|+b_2|b_2\rangle\langle b_2|+b_3|b_3\rangle\langle b_3|\end{aligned} \tag{5.54}$$

というスペクトル分解に対して, $|a_1\rangle=|b_1\rangle$, $|a_2\rangle\neq|b_2\rangle$, $|a_3\rangle\neq|b_3\rangle$ であったとする. さらに, $a_2=a_3$ であったとする. ($|a_2\rangle=|a_3\rangle$ ではないことに注意する.) この場合,

$$\begin{aligned}\hat{A}&=a_1|a_1\rangle\langle a_1|+a_2\left(|a_2\rangle\langle a_2|+|a_3\rangle\langle a_3|\right)\\ &=a_1|b_1\rangle\langle b_1|+a_2\left(|b_2\rangle\langle b_2|+|b_3\rangle\langle b_3|\right)\\ &=a_1|b_1\rangle\langle b_1|+a_2|b_2\rangle\langle b_2|+a_3|b_3\rangle\langle b_3|\end{aligned} \tag{5.55}$$

と変形できるので, $\hat{A}$, $\hat{B}$ は共通の基底を持つことができる.

問題 5.11 $[\hat{A},\hat{B}]=0$ かつ $[\hat{B},\hat{C}]=0$ のとき, $[\hat{A},\hat{C}]=0$ は成り立つか?

参考文献

志賀 浩二: 固有値問題 30 講 (朝倉書店)

Michael A.Nielsen, Isaac L.Chuang, 木村 達也: 量子コンピュータと量子通信 (1) (オーム社)

笠原晧司: 線型代数と固有値問題 (現代数学社)

韓 太舜, 伊理正夫: ジョルダン標準系 (東京大学出版会, 1982)