

6 量子力学のための数学的準備 (II) ... 行列の復習

[6.A] Hermite (エルミート) 行列、unitary (ユニタリー) 行列、unitary 変換

- Hermite 行列 ... $A^\dagger = A$ を満たす行列
(対称行列の複素数版)
- unitary 行列 ... $U^\dagger U = U U^\dagger = \mathbf{1}$ を満たす行列
(直交行列の複素数版)
- unitary 変換 ... unitary 行列 U による、ベクトル $\mathbf{x}$ 、行列 A の次の変換
 $\mathbf{x} \rightarrow \mathbf{x}' = U^\dagger \mathbf{x}, A \rightarrow A' = U^\dagger A U$

[6.B] Hermite 行列の性質

- (1) 固有値はすべて実数であり、固有値の異なる固有ベクトルは互いに直交する。
- (2) unitary 変換により対角行列に変換できる。

[6.C] unitary 変換の性質

- (1) 連続した unitary 変換、逆変換も unitary 変換である。
- (2) ベクトルの Norm、内積、行列の固有値、行列式、対角和、を変えない。

[6.D] Commutator (交換子) ... $[A, B] \equiv AB - BA$

交換子は次のような性質を持つ。

- (1) $[aA + bB, cC + dD] = ac[A, C] + ad[A, D] + bc[B, C] + bd[D, D]$
(双線形性、 a, b, c, d は定数 (行列ではない通常の数))
- (2) $[A, B] = -[B, A]$
- (3) $[AB, C] = A[B, C] + [A, C]B$ (積の分解)

[6.1] (Hermite 行列)

A, B を 2 つの Hermite 行列とする時、

- (1) AB は Hermite か?
- (2) $[A, B]$ は Hermite か?
- (3) A^n は Hermite か?
- (4) 2 行 2 列の Hermite 行列の一般形を求めよ。

[6.2] (Hermite 行列の固有値、固有ベクトル)

2 つの $N \times N$ 行列 A, B が Hermite であるとする。(0 でない) ベクトル $\mathbf{x}_i$ が、 $A\mathbf{x}_i = \lambda_i \mathbf{x}_i$ を満たすとき (すなわち $\mathbf{x}_i$ が固有値 λ_i の固有ベクトルであるとき)、次の間に答えよ。

- (1) λ_i は実数である事を示せ。
- (2) 別のベクトル $\mathbf{x}_j$ が $A\mathbf{x}_j = \lambda_j \mathbf{x}_j$ をみたし $\lambda_j \neq \lambda_i$ とする。 $(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j) = 0$ を示せ。
- (3) ある unitary 行列 U をつかって $B = U^\dagger A U$ となるとき、 B と A は同じ固有値をもつ事を示せ。
- (4) 次の 2 つの Hermite 行列の固有値と固有ベクトルを求めよ。

$$A = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad B = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}$$

[6.3] (unitary 行列)

行列 U, V が unitary、 A, B が Hermite 行列、 $\mathbf{x}, \mathbf{y}$ が、(列) ベクトルであるとき、

- (1) $U^2, UV, [U, V]$ は unitary か?
- (2) e^{iA} は unitary である事を示せ。ただし、行列の exponential は

$$e^{iA} \equiv \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} (iA)^n = 1 + iA + \frac{1}{2!} (iA)^2 + \dots$$

で定義される。

- (3) $A_u = U^\dagger A U$ が Hermite である事を示せ。
- (4) 前問で定義される A_u にたいして、 $\text{tr} A_u = \text{tr} A (= \sum_i A_{ii})$, $\det A_u = \det A$ を示せ。また、 $B_u = U^\dagger B U$ とすると、

$$U^\dagger [A, B] U = [A_u, B_u]$$

を示せ。

- (5) $\mathbf{x}' = U\mathbf{x}, \mathbf{y}' = U\mathbf{y}$ とすると、 $(\mathbf{x}', \mathbf{y}') = (\mathbf{x}, \mathbf{y})$ を示せ。ただし、内積は $(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = \sum_i x_i^* y_i$ で定義される。

[6.4] (Commutator, Anti-Commutator)

任意の演算子 (ここでは行列と考えてよい) A, B に対して、commutator は、 $[A, B] = AB - BA$, anti-commutator (反交換子) は、 $\{A, B\} = AB + BA$, と定義される。以下の関係式を示せ。

- (1) $[A, BC] = [A, B]C + B[A, C]$
- (2) $[AB, C] = A[B, C] + [A, C]B$
- (3) $[A, [B, C]] + [B, [C, A]] + [C, [A, B]] = 0$
- (4) $[A, BC] = \{A, B\}C - B\{A, C\}$
- (5) $[AB, C] = A\{B, C\} - \{A, C\}B$
- (6) $[A, \{B, C\}] + [B, \{C, A\}] + [C, \{A, B\}] = 0$

[6.5] (Hermite 行列の対角化)

一般に $N \times N$ 行列が $A^\dagger A = AA^\dagger$ を満たす時、 A に対して適当な unitary 変換 $B = U^\dagger A U$ を行なうと、 B を対角行列に取れる。(このことから、Hermite 及び unitary 行列は対角化可能である事が分かる。)

このことを Hermite 行列の場合に示してみよう。

- (1) A が N 個の一次独立な固有ベクトル $\mathbf{x}_i (i = 1, 2, \dots, N)$ を持つとする。この時、 $(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j) = \delta_{ij}$ を満たすように固有ベクトルの組を選べることを示せ。
- (2) 上の固有ベクトルの組を用いて $N \times N$ 行列 $U = (\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \dots, \mathbf{x}_N)$ を定義すると、 U は unitary であることを示せ。
- (3) 前問で定義した U により、 A が対角化できることを示せ。

[6.6] (同時対角化*) 2つの Hermite 行列 A, B が交換する場合、

$$AB = BA$$

A の固有ベクトルが、同時に B の固有ベクトルとなるようにとることができる。これを示せ。

量子力学レポート問題 6.

[R6.1] (パウリ行列とその交換関係)

次の3つの行列を Pauli のスピン行列と呼ぶ。

$$\sigma_1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_2 = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix},$$

(1) この Pauli 行列の積に対して成り立つ次の関係式を示せ。

$$\sigma_i \sigma_j = I \delta_{ij} + i \epsilon_{ijk} \sigma_k$$

ただし、 I は単位行列である。

(2) 上の関係を利用して、

$$\exp(i\mathbf{x} \cdot \boldsymbol{\sigma}) = I \cos x + i\hat{\mathbf{x}} \cdot \boldsymbol{\sigma} \sin x$$

を示せ。ただし、 $\mathbf{x}$ は3次元ベクトル、 $x = |\mathbf{x}|$ はベクトルの大きさ、 $\hat{\mathbf{x}} = \mathbf{x}/x$ は $\mathbf{x}$ 方向の単位ベクトルである。

これは、 $i \times$ (Hermite 行列) の $\exp$ が unitary 行列になることの具体的な例である。