2 Introduction to Quantum Mechanics

2.1 Linear algebra

目次

1 Exercise 2.1:(Linear dependence: example)

Show that (1, -1), (1, 2) and (2, 1) are linearly dependent.

proof:

$$a_1 \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix} + a_2 \begin{pmatrix} 1 \\ 2 \end{pmatrix} + a_3 \begin{pmatrix} 2 \\ 1 \end{pmatrix} = 0, (a_1, a_2, a_3 \in \mathbb{C}) \tag{1}$$

とする。
この解の組 (a_1, a_2, a_3) は $t \in \mathbb{C}$ を任意の複素数として、

$$(a_1, a_2, a_3) = (t, t, -t) \tag{2}$$

と表すことが出来る。問題の三つのベクトルが一次独立であれば、$(a_1, a_2, a_3) = (0, 0, 0)$ のみが解となるため不適。よって一次従属である。

2 Exercise 2.2: (Matrix represetations: example)

Suppose V is a vector space with basis vectors $|0\rangle$ and $|1\rangle$, and A is a linear operator from V to V such that $A|0\rangle = |1\rangle$ *and* $A|1\rangle = |0\rangle$. Give a matrix representation for A, with respect to the input basis $|0\rangle, |1\rangle$, and the output basis $|0\rangle, |1\rangle$. Find input and output bases which give rise to a different matrix representation of A.

proof: V の基底 $\{|v_1\rangle = |0\rangle, |v_2\rangle = |1\rangle\}$ に対して演算子 $A : V \to V$ は、

$$A|v_1\rangle = 0|v_1\rangle + 1|v_2\rangle,$$
$$A|v_2\rangle = 1|v_1\rangle + 0|v_2\rangle$$

という作用をする。
定義より、演算子 $A : V \to W$ において、V の基底を $\{|v_1\rangle, \cdots, |v_n\rangle\}$,
W の基底を $\{|w_1\rangle, \cdots, |w_m\rangle\}$
とすれば、A の行列表現における (i, j) 成分 A_{ij} は

$$A|v_j\rangle = \sum_i A_{ij} |w_i\rangle \tag{1}$$

と定義されている。故に

$$A_{11} = 0, A_{12} = 1, A_{21} = 1, A_{22} = 0.$$

すなわち、

$$A = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}.$$

3　復習 1:(表現行列の定義)

線形写像 $f:V\to W$ において、V の基底を $\{v_1,\cdots,v_n\}$, W の基底を $\{w_1,\cdots,w_m\}$ とする。
ここで, 任意の $j(1\le j\le n)$ について、$f(v_j)=\sum_{i=1}^{m}a_{ij}w_i$ とする。
($f:V\to W$ より、任意の j$(1\le j\le n)$ について $f(v_j)$ は W の基底 $\{w_1,\cdots,w_m\}$ の線型結合で表される。)
このとき行列 A の (i, j) 成分を a_{ij} とすれば、

$$[f(v_1),\cdots,f(v_n)]=[w_1,\cdots,w_m]A \tag{1}$$

というような便宜的表記をすることができる。この行列 A を f の表現行列という。
この表現行列の便利な点
V の基底を $\{|v_1\rangle,\cdots,|v_n\rangle\}$ とすると、V の任意の元 v は $v=\sum_{j=1}^{n}x_jv_j,(\forall j,x_j\in\mathbb{C})$ として表すことが出来る。

$$f(v)=f(\sum_{j=1}^{n}x_jv_j)=\sum_{j=1}^{n}x_jf(v_j)=\sum_{j=1}^{n}x_j\sum_{i=1}^{m}a_{ij}w_i=\sum_{j=1}^{n}\sum_{i=1}^{m}x_ja_{ij}w_i=\sum_{i=1}^{m}(\sum_{j=1}^{n}a_{ij}x_j)w_i \tag{2}$$

ここで、

$$x=\begin{pmatrix}x_1\\ \vdots\\ x_n\end{pmatrix}$$

とすると、$\sum_{j=1}^{n}a_{ij}x_j$ は (m, 1) ベクトル Ax の i 成分となる。
ここで特に (2) において、

$$f(v)=\sum_{j=1}^{n}x_jf(v_j)=\sum_{i=1}^{m}(\sum_{j=1}^{n}a_{ij}x_j)w_i \tag{3}$$

が成立していることに注意すると、(1) の表記を用いて

$$[f(v)]=[f(v_1),\cdots,f(v_n)]x=[w_1,\cdots,w_m]Ax \tag{4}$$

と表すことが出来る。すなわち、V の基底 $\{v_1,\cdots,v_n\}$ に対する v の係数ベクトル x で W の基底 $\{w_1,\cdots,w_m\}$ の係数を Ax と表すことが出来る。これが表現行列の便利な点である。

4 Exercise 2.3: (Matrix representation for operator products)

Suppose A is a liear operator from vector space V to vector space W, and B is a linear operator from vector space W to vector space X. Let $|v_i\rangle$, $|w_j\rangle$ and $|x_k\rangle$ be bases for the vector spaces V, W, and X, respectively.
Show that the matrix representaion for the linear transformation BA is the matrix product of the matrix representations for B and A, with respect to the appropriate bases.

proof:
V,W,X の次元をそれぞれ n, m, l とし、基底をそれぞれ $\{|v_1\rangle, \cdots, |v_n\rangle\}$, $\{|w_1\rangle, \cdots, |w_m\rangle\}$, $\{|x_1\rangle, \cdots, |x_l\rangle\}$ とする。
このとき A, B について行列表現の定義より、任意の $i, (1 \leq i \leq n)$, $j, (1 \leq j \leq m)$ において、

$$A|v_i\rangle = \sum_{j=1}^{m} a_{ji} |w_j\rangle, \tag{1}$$

$$B|w_j\rangle = \sum_{k=1}^{l} b_{kj} |x_k\rangle \tag{2}$$

と表すことが出来る。これより、

$$\begin{aligned}
(BA)|v_i\rangle &= B(A|v_i\rangle) \\
&= B(\sum_{j=1}^{m} a_{ji} |w_j\rangle) \\
&= \sum_{j=1}^{m} a_{ji} B |w_j\rangle \\
&= \sum_{j=1}^{m} \sum_{k=1}^{l} a_{ji} b_{kj} |x_k\rangle \\
&= \sum_{k=1}^{l} (\sum_{j=1}^{m} b_{kj} a_{ji}) |x_k\rangle .
\end{aligned}$$

これより, 演算子 $BA : V \to X$ の行列表現の (k, i) 成分は $\sum_{j=1}^{m} b_{kj} a_{ji}$ と表され、これは A, B それぞれの行列表現による行列の積の (k, i) 成分に等しい。

5 Exercise 2.4: (Matrix representation for identity)

Show that the identity operator on a vector space V has a matrix representation which is one along the diagonal and zero everywhere else, if the matrix representation is taken with respect to the same input and output bases. This matrix is known as the identity matrix.

proof: ベクトル空間 V の基底を $\{|v_1\rangle, \cdots, |v_n\rangle\}$, V 上の identity operator を I とする。このとき、任意の $j, (1 \leq j \leq n)$ について

$$
\begin{aligned}
I |v_j\rangle &= \sum_{i=0}^{n} a_{ij} |v_i\rangle \\
&= |v_j\rangle .
\end{aligned}
$$

すなわち、

$$
a_{ij} = \begin{cases} 1 \ (i = j) \\ 0 \ (i \neq j) \end{cases}
$$

このような数を (i, j) 成分に持つ行列は、対角成分が 1 でその他が 0 の行列である。

6 Exercise 2.5(p.66):

Verify that $(\cdot,\cdot)$ just defined is an inner product on $\mathbb{C}^n$.

proof: 定義より、関数 $(\cdot,\cdot) : V \times V \to \mathbb{C}$ が次をみたすとき、内積と言われる。

(1) $(\cdot,\cdot)$ が第二引数に関して線形であること。すなわち

$$(\left|v\right\rangle, \sum_i \lambda_i \left|w_i\right\rangle) = \sum_i \lambda_i (\left|v\right\rangle, \left|w_i\right\rangle).$$

(2) $(\left|v\right\rangle, \left|w\right\rangle) = (\left|w\right\rangle, \left|v\right\rangle)^*$.

(3)$(\left|v\right\rangle, \left|v\right\rangle) \geq 0$. さらに、等号は $\left|v\right\rangle = 0$ のみである。

$(\cdot,\cdot)$ just defined とは、$((y_1, \cdots, y_n), (z_1, \cdots, z_n))$

7 Exercise 2.6:

Show that any inner product $(\cdot, \cdot)$ is cojugate-linear in the first argument ,

$$(\sum_i \lambda_i |w_i\rangle, |v\rangle) = \sum_i \lambda_i^* (|w_i\rangle, |v\rangle). \tag{1}$$

proof: 内積の定義 (本文 p.65) より、

$$(|v\rangle, \sum_i \lambda_i |w\rangle) = \sum_i \lambda_i (|v\rangle, |w_i\rangle), \tag{2}$$

$$(|v\rangle, |w\rangle) = (|w\rangle, |v\rangle)^*. \tag{3}$$

ゆえに、

$$\begin{aligned}
(\sum_i \lambda_i |w_i\rangle, |v\rangle) &= (\sum_i \lambda_i |w_i\rangle, |v\rangle)^{**} \\
&= ((\sum_i \lambda_i |w_i\rangle, |v\rangle)^*)^* \\
&= (|v\rangle, \sum_i \lambda_i |w_i\rangle)^* \\
&= (\sum_i \lambda_i (|v\rangle, |w_i\rangle))^* \\
&= \sum_i \lambda_i^* (|v\rangle, |w_i\rangle)^* \\
&= \sum_i \lambda_i^* (|w_i\rangle, |v\rangle).
\end{aligned}$$

ゆえに、内積は第一引数に関して反線型 (conjugate-linear) である。

8 復習 2(内積演算子、外積表現)

(内積演算子):標準的な量子力学における内積 $(|v\rangle, |w\rangle)$ の表記は $\langle v|w\rangle$ であり、$\langle v|$ はベクトル $|v\rangle$ の双対ベクトルを表す; 双対ベクトルとは、内積を有するベクトル空間 V から $\mathbb{C}$ への線型演算子であり、$\langle v| (|w\rangle) \equiv \langle v|w\rangle \equiv (|v\rangle, |w\rangle)$ として定義される。
(外積表現):$|v\rangle, |w\rangle$ をそれぞれ内積ベクトル空間 V, W のベクトルとする。このとき $|w\rangle \langle v|$ を V から W への線型演算子として次式で定義する。

$$(|w\rangle \langle v|)(|v'\rangle) \equiv |w\rangle \langle v|v'\rangle = \langle v|v'\rangle |w\rangle .$$

$|i\rangle, (1 \leq i \leq n)$ をベクトル空間 V の任意の正規直交基底とする。このとき任意のベクトル $|v\rangle$ は $v_i \in \mathbb{C}, (1 \leq i \leq n)$ を用いて $|v\rangle = \sum_i v_i |i\rangle$ と表すことが出来る。$\langle i|v\rangle = v_i$ であることに注意すると、

$$(\sum_i |i\rangle \langle i|) |v\rangle = \sum_i |i\rangle \langle i|v\rangle = \sum_i v_i |i\rangle = |v\rangle .$$

ゆえに

$$\sum_i |i\rangle \langle i| = I.$$

これは、正規直交基底による *completeness relation* として知られている。これを応用することで任意の線型演算子を外積表現で表すことが出来る。
$A : V \to W$ を線型演算子,$|v_i\rangle$ を V の正規直交基底、$|w_j\rangle$ を W の正規直交基底とする。このとき、

$$\begin{aligned} A &= I_W A I_V \\ &= \sum_{ij} |w_j\rangle \langle w_j|A|v_i\rangle \langle v_i| \\ &= \sum_{ij} \langle w_j|A|v_i\rangle |w_j\rangle \langle v_i| . \end{aligned}$$

ここで、正規直交基底 $|v_k\rangle$ に対する A の作用は $A|v_k\rangle = \sum_j \langle w_j|A|v_k\rangle |w_j\rangle$ となる。これより、A の基底 $|v_i\rangle, |w_j\rangle$ に対する表現行列の (i, j) 成分を a_{ij} とすれば

$$a_{ij} = \langle w_i|A|v_j\rangle$$

となる。

9 Exercise 2.7:

Verify that $|w\rangle \equiv (1,1)$ and $|v\rangle \equiv (1,-1)$ are orthogonal. What are the normalized forms of these vectors?

proof:

$\langle w|v\rangle = 1 \times 1 + 1 \times (-1) = 0.$

ゆえに $|w\rangle, |v\rangle$ は直交している。また、ベクトル $|v\rangle$ の正規化ベクトル $|v'\rangle$ は、

$$|v'\rangle \equiv \frac{|v\rangle}{\sqrt{\langle v|v\rangle}} \tag{1}$$

で与えられる。

ゆえに、$|w\rangle, |v\rangle$ それぞれの正規化ベクトル $|w'\rangle, |v'\rangle$ は

$$\begin{aligned}
|w'\rangle &\equiv \frac{|w\rangle}{\sqrt{\langle w|w\rangle}} \\
&= \frac{(1,1)}{\sqrt{1 \cdot 1 + 1 \cdot 1}} \\
&= \frac{1}{\sqrt{2}}(1,1), \\
|v'\rangle &\equiv \frac{|v\rangle}{\sqrt{\langle v|v\rangle}} \\
&= \frac{(1,-1)}{\sqrt{1 \cdot 1 + (-1) \cdot (-1)}} \\
&= \frac{1}{\sqrt{2}}(1,-1).
\end{aligned}$$

10 Exercise2.8:

Prove that the Gram-Schmidt procedure produces an orthonormal basis for V.
proof: 帰納法による。内積を有するベクトル空間 V において、$|w_1\rangle, \cdots, |w_d\rangle$ を基底集合とする。p.66 のグラム・シュミットの正規直交化法により、正規直交基底集合 $|v_1\rangle, \cdots, |v_d\rangle$ を作る。このとき、

$$|v_1\rangle = \frac{|w_1\rangle}{\| |w_1\rangle \|}. \tag{1}$$

ゆえに、同じベクトル同士の内積が実数かつ負でないことに注意すれば、

$$\begin{aligned}
\langle v_1|v_1\rangle &= \frac{1}{\| |w_1\rangle \|^2} \langle w_1|w_1\rangle \\
&= \frac{1}{\|\sqrt{\langle w_1|w_1\rangle}\|^2} \langle w_1|w_1\rangle \\
&= 1.
\end{aligned}$$

これより、$|v_k\rangle, (1 \leq k \leq d)$ において、$k = 1$ のとき $\{|v_1\rangle\}$ の元は正規かつ直交している。
(実際は元が一つしかないため直交していると考えにくいが、詳しく言えば、$\{|v_1\rangle\}$ の任意の元 $|i\rangle, |j\rangle$ について

$$\langle i|j\rangle = \delta_{ij}$$

が成立しているということである。)
ここで、$k = n$ のときまでグラムシュミットの正規直交化法を行ったことによる集合 $\{|v_1\rangle, \cdots, |v_n\rangle\}$ が正規直交基底集合となっているとする。このとき、$|v_{n+1}\rangle$ を

$$|v_{n+1}\rangle \equiv \frac{|w_{n+1}\rangle - \sum_{i=1}^{n} \langle v_i|w_{n+1}\rangle |v_i\rangle}{\| |w_{n+1}\rangle - \sum_{i=1}^{n} \langle v_i|w_{n+1}\rangle |v_i\rangle \|} \tag{2}$$

と定義すると、任意の $k, (1 \leq k \leq n)$ について $\{|v_1\rangle, \cdots, |v_n\rangle\}$ が正規直交基底集合となっていることから、

$$\begin{aligned}
\langle v_k|v_{n+1}\rangle &= \frac{1}{\| |w_{n+1}\rangle - \sum_{i=1}^{n} \langle v_i|w_{n+1}\rangle |v_i\rangle \|} \left(\langle v_k|w_{n+1}\rangle - \sum_{i=1}^{n} \langle v_i|w_{n+1}\rangle \langle v_k|v_i\rangle\right) \\
&= \frac{1}{\| |w_{n+1}\rangle - \sum_{i=1}^{n} \langle v_i|w_{n+1}\rangle |v_i\rangle \|} (\langle v_k|w_{n+1}\rangle - \langle v_k|w_{n+1}\rangle) \\
&= 0.
\end{aligned}$$

また、$\langle v_{n+1}|v_{n+1}\rangle = 1$ は定義 (2) より明らかである。ゆえに $\{|v_1\rangle, \cdots, |v_{n+1}\rangle\}$ は正規直交基底集合である。すなわちこのようにして作られた基底集合 $\{|v_1\rangle, \cdots, |v_d\rangle\}$ は正規直交基底集合をなす。

11 復習 3:(Pauli operators)

$$
\begin{aligned}
\sigma_0 \equiv I \equiv \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}, \sigma_1 \equiv X \equiv \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}, \\
\sigma_2 \equiv Y \equiv \begin{bmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{bmatrix}, \sigma_3 \equiv Z \equiv \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix}.
\end{aligned}
$$

12 Exercise 2.9:(Pauli operators and the outer product)

The Pauli matrices can be considered as operators with respect to an orthonormal basis $|0\rangle, |1\rangle$ for a two-dimensional Hilbert space. Express each of the Pauli operators in the outer product notation.
proof: 復習 3 より $\{|0\rangle, |1\rangle\}$ を基底とするベクトル空間上の演算子 I, X, Y, Z の外積表現はそれぞれ,

$$\begin{aligned} I &= |0\rangle\langle 0| + |1\rangle\langle 1|, \\ X &= |1\rangle\langle 0| + |0\rangle\langle 1|, \\ Y &= i\,|0\rangle\langle 1| - i\,|1\rangle\langle 0|, \\ Z &= |0\rangle\langle 0| - |1\rangle\langle 1|. \end{aligned}$$

(外積表現については復習 2 も参照して下さい。)

13 Exercise 2.10:

Suppose $|v_i\rangle$ is an orthonormal basis for an inner product space V. What is the matrix representation for the operator $|v_j\rangle\langle v_k|$, with respect to the $|v_i\rangle$ basis?

proof: $|v_j\rangle\langle v_k|$ 自体が基底 $|v_i\rangle$ に関する外積表現であるので、この演算子の表現行列は (k, j) 成分が 1 で、それ以外は 0 の行列である。(外積表現については, 復習 2 を参照して下さい.)

14 Exercise 2.11:(Eigendecomposition of the Pauli matrices)

Find the eigenvectors, eigenvalues, and diagonal representations of the Pauli matrices $X, Y, and\ Z$.
proof: 線型演算子 A の対角化表現は、A の固有値 λ_i と対応する固有ベクトル $|i\rangle$ を用いて $A = \sum_i \lambda_i |i\rangle \langle i|$ として表される。対角化表現が可能な演算子を対角化可能という。
そのため、まず I, X, Y, Z の固有値の固有ベクトルを求め、その後対角化表現を求める。

- I について $I = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$ より、

$$\det(I - xE) = \begin{vmatrix} 1-x & 0 \\ 0 & 1-x \end{vmatrix} = (1-x)^2.$$

ゆえに固有値は 1 で, 対応する固有ベクトルは $|0_I\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, |1_I\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$.
これより、$I = |0_I\rangle \langle 0_I| + |1_I\rangle \langle 1_I|$.

- X について $X = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$ より、

$$\det(X - xE) = \begin{vmatrix} -x & 1 \\ 1 & -x \end{vmatrix} = (x-1)(x+1).$$

ゆえに固有値は $1, -1$ で, 対応する固有ベクトルは
固有値 1 に関して $|0_X\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}$, 固有値-1 に関して $|1_X\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix}$.
これより, $X = |0_X\rangle \langle 0_X| - |1_X\rangle \langle 1_X|$.

- Y について $Y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}$ より、

$$\det(Y - xE) = \begin{vmatrix} x & -i \\ i & x \end{vmatrix} = (x+1)(x-1).$$

ゆえに固有値は $1, -1$ で, 対応する固有ベクトルは
固有値 1 に関して $|0_Y\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ -i \end{pmatrix}$, 固有値 -1 に関して $|1_Y\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} -i \\ 1 \end{pmatrix}$.
これより、$Y = |0_Y\rangle \langle 0_Y| - |1_Y\rangle \langle 1_Y|$.

- Z について $Z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$ より、

$$\begin{aligned} \det(Z - xE) &= \begin{vmatrix} 1-x & 0 \\ 0 & -1-x \end{vmatrix} \\ &= (1-x)(1+x) \end{aligned}$$

ゆえに固有値は $1, -1$ で, 対応する固有ベクトルは
固有値 1 に関して $|0_Z\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$ 固有値 -1 に関して $|1_Z\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$.
これより、$Z = |0_Z\rangle \langle 0_Z| - |1_Z\rangle \langle 1_Z|$.

15　復習 3.5:(エルミート変換の一意性)

任意の内積空間 $(V, (\cdot,\cdot))$ に作用する任意の線形作用素 A に対して、次を満たすような線形作用素 $A^\dagger$ が一意に定まる。

$$\forall \left|x\right\rangle, \left|y\right\rangle \in V, \quad (\left|x\right\rangle, A\left|y\right\rangle) = (A^\dagger \left|x\right\rangle, \left|y\right\rangle).$$

proof: まず、$A^\dagger$ の存在を示す。
V の正規直交基底を任意に一つ定め、$< e_1, \cdots, e_n >$ とする。ここで、$x \in V$ に対して、$A^\dagger x = \sum_i^n (Ae_i, x)e_i$ と置けば、$A^\dagger$ は V の線形変換である。このとき、任意の $y \in V$ に対して、$y = \sum_i^n y_i e_i$ とすると、

$$(A^\dagger x, y) = (\sum_i^n (Ae_i, x)e_i, y) = \sum_i^n (Ae_i, x)^*(e_i, y) = \sum_i^n y_i(x, Ae_i).$$

また、

$$(x, Ay) = (x, \sum_i^n y_i Ae_i) = \sum_i^n y_i(x, Ae_i)$$

ゆえに、任意の $x, y \in V$ について $(A^\dagger x, y) = (x, Ay)$ が成り立つ。
ここからは一意性を示す。f, g を V から V への写像であるとする。任意の $x, y \in V$ に対して $(f(x), y) = (g(x), y)$ が成り立つとすると、$0 = (f(x), y) - (g(x), y) = (f(x) - g(x), y)$ であるが、ここで特に $y = f(x) - g(x)$ と置けば $\|f(x) - g(x)\|^2 = (f(x) - g(x), f(x) - g(x)) = 0$ となる。よって $f(x) - g(x) = 0$ である。したがって $f(x) = g(x)$ であり、x は任意だから $f = g$ である。これより特に任意の $x, y \in V$ に対して、$(A_1^\dagger x, y) = (x, Ay) = (A_2^\dagger x, y)$ であるから、上記で示したとおり $A_1^\dagger = A_2^\dagger$ が分かる。

16 Exercise 2.12:

Prove that the matrix $\begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 1 & 1 \end{bmatrix}$ is not diagonalizable.

proof: $\begin{vmatrix} 1-x & 0 \\ 1 & 1-x \end{vmatrix} = (1-x)^2$ より、固有値は 1. 固有値 1 に対する固有ベクトルは $|0\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$ である。これより、$\begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 1 & 1 \end{bmatrix}$ が対角化可能であるとすれば $|0\rangle \langle 0|$ と表せる。ここで $|1\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$ とすると、$(|0\rangle \langle 0|) |1\rangle = 0$, $\begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 1 & 1 \end{bmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} \neq 0$. ゆえに対角化可能とすると矛盾が生じるため対角化可能でない。

17 Exercise 2.13:

If $|w\rangle$ and $|v\rangle$ are any two vectors, show that $(|w\rangle \langle v|)^\dagger = |v\rangle \langle w|$.

proof: Suppose $|\psi\rangle$, $|\phi\rangle$ are arbitrary vectors in V.

$$\begin{aligned} (|\psi\rangle, (|w\rangle \langle v|) |\phi\rangle)^* &= \big((|w\rangle \langle v|)^\dagger |\psi\rangle, |\phi\rangle\big)^* \\ &= \big(|\phi\rangle, (|w\rangle \langle v|)^\dagger |\psi\rangle\big) \\ &= \langle\phi| (|w\rangle \langle v|)^\dagger |\psi\rangle . \end{aligned}$$

On the other hand,

$$\begin{aligned} (|\psi\rangle, (|w\rangle \langle v|) |\phi\rangle)^* &= (\langle\psi|w\rangle \langle v|\phi\rangle)^* \\ &= \langle\phi|v\rangle \langle w|\psi\rangle . \end{aligned}$$

Thus

$$\begin{aligned} \langle\phi| (|w\rangle \langle v|)^\dagger |\psi\rangle = \langle\phi|v\rangle \langle w|\psi\rangle \ \text{ for arbitrary vectors } |\psi\rangle, |\phi\rangle \\ \therefore (|w\rangle \langle v|)^\dagger = |v\rangle \langle w| \end{aligned}$$

(復習 3.5 による。)

18 Exercise 2.14:(Anti-linearity of the adjoint)

Show that the adjoint operation is anti-linear,

$$(\sum_i a_i A_i)^\dagger = \sum_i a_i^* A_i^\dagger.$$

proof: ベクトル空間 V の任意のベクトル $|v\rangle$,$|w\rangle$ に対して,

$$\begin{aligned}
(|v\rangle, \sum_i a_i A_i |w\rangle) &= \sum_i a_i (|v\rangle, A_i |w\rangle) \\
&= \sum_i a_i (A_i^\dagger |v\rangle, |w\rangle) \\
&= (\sum_i a_i^* A_i^\dagger |v\rangle, |w\rangle).
\end{aligned}$$

ここで内積が第一引数に関して反線型であることと、第二引数に関して線型であることを用いた。

19 Exercise 2.15:

Show that $(A^\dagger)^\dagger = A$.

proof: ベクトル空間 V の任意のベクトル $|v\rangle, |w\rangle$ について

$$\begin{aligned}
(|v\rangle, A^\dagger |w\rangle) &= (A^\dagger |w\rangle, |v\rangle)^* \\
&= (|w\rangle, A |v\rangle)^* \\
&= (A |v\rangle, |w\rangle).
\end{aligned}$$

20 Exercise 2.16:

Show that any projector P satisfies the equation $P^2 = P$.

proof:

$$\begin{aligned}
P^2 &= (\sum_{i=1}^{k} |i\rangle \langle i|)(\sum_{j=1}^{k} |j\rangle \langle j|) \\
&= \sum_{i=1}^{k} \sum_{j=1}^{k} (|i\rangle \langle i|)(|j\rangle \langle j|) \\
&= \sum_{i=1}^{k} \sum_{j=1}^{k} |i\rangle \langle i|j\rangle \langle j| \\
&= \sum_{i=1}^{k} \sum_{j=1}^{k} |i\rangle \delta_{ij} \langle j| \\
&= \sum_{i=1}^{k} |i\rangle \langle i| \\
&= P.
\end{aligned}$$

21 復習 4(正規行列の性質):

複素正方行列 A が正規行列であるとは,$A^\dagger A = AA^\dagger$ を満たすことを言う。

- 性質 1:A を正規行列とし、A の固有値 $\alpha \in \mathbb{C}$ に対する固有空間を V_α とするとき、$x \in V_\alpha^\perp$ ならば $Ax \in V_\alpha^\perp$ が成立する。

  proof: $x \in V_\alpha^\perp, y \in V_\alpha$ とすると、$A(A^\dagger y) = A^\dagger(Ay) = A^\dagger(\alpha y) = \alpha(A^\dagger y)$ なので、$A^\dagger y \in V_\alpha$ である。よって、$(Ax) \cdot y = x \cdot (A^\dagger y) = 0$.

- 性質 2:A を正規行列,P がユニタリ行列とすると、$B = P^{-1}AP = P^\dagger AP$ は正規行列である。

  proof:

$$\begin{aligned}
BB^\dagger &= (P^\dagger AP)(P^\dagger AP)^\dagger \\
&= (P^\dagger AP)(P^\dagger A^\dagger P) \\
&= P^\dagger AA^\dagger P \\
&= P^\dagger A^\dagger AP \\
&= P^\dagger A^\dagger PP^\dagger AP \\
&= (P^\dagger AP)^\dagger (P^\dagger AP) \\
&= B^\dagger B.
\end{aligned}$$

  ゆえに B は正規行列である。

- 性質 3:複素 n 次正方行列 A がユニタリ対角化可能 $\Leftrightarrow$ A が正規行列.

  proof: まず、次の補題を証明しておく。

  補題: 任意のベクトル空間 V とその部分空間 W について、$V = W \oplus W^\perp$. ここで、$\oplus$ は直和を表す。

  (表記について:
  - V がその部分空間 $W_1, \cdots, W_k$の直和である $\Leftrightarrow$

    $V = \{w_1 + w_2 + \cdots w_k | w_i \in W_i, (1 \leq i \leq k)\}$

    かつ

    $w_1 + w_2 + \cdots w_k = 0,\ (w_i \in W_i, (1 \leq i \leq k))$ ならば $w_i = 0, (1 \leq i \leq k)$.
  - V の部分空間 W の直交補空間 $W^\perp$ は下式で表される.

    $W^\perp = \{v \in V | w \cdot v = 0, \forall w \in W\}$)

  補題の証明:

  W の正規直交基底 $w_1, \cdots, w_k$ を延長した V の基底を $w_1, \cdots, w_k, w'_1, \cdots, w'_{n-k}$ とする。

  (補足:[基底の延長]

  基底 $w_i, (1 \leq i \leq k)$ に含まれない V のベクトル w'_1 をとると、

$$\begin{aligned}
(\sum_i a_i w_i) + a'_1 w'_1 = 0 \Leftrightarrow (\sum_i a_i w_i) &= -a'_1 w'_1 \\
&\Leftrightarrow \forall i \in 1, \cdots, k, a_i = 0, a'_1 = 0. \\
&\Leftrightarrow w_1, \cdots, w_k, w'_1 \text{は一次独立。}
\end{aligned}$$

このように基底を延長することで V の基底を作ることができる。)
gram-schmidt の直交化により、最初の k 個を変えずに正規直交基底を作ることができる。V のベクトル $v = \sum_i \lambda_i w_i + \sum_j \lambda'_j w'_j$ が $W^\perp$ に属する条件は、各 $w_i, (1 \le i \le k)$ との内積が 0 になることである。
(補足:

$$\begin{aligned}
v \in W^\perp &\Leftrightarrow \forall w \in W, v \cdot w = 0 \\
&\Leftrightarrow \forall w \in W, \forall \lambda_i, \lambda'_j \in \mathbb{C}, (\sum_i \lambda_i w_i + \sum_j \lambda'_j w'_j) \cdot w = 0 \\
&\Leftrightarrow \forall w \in W, \forall \lambda_i, \lambda'_j \in \mathbb{C}, \sum_i \lambda_i^* w_i \cdot w + \sum_j \lambda'^*_j w'_j \cdot w = 0 \\
&\Leftrightarrow \forall w \in W, \forall \lambda_i \in \mathbb{C}, \sum_i \lambda_i^* w_i \cdot w = 0 \quad (\because \text{各 } w_i, w'_j \text{は正規直交基底をなす}) \\
&\Leftrightarrow \forall w \in W, \forall i \in \{1, \cdots, k\}, \lambda_i = 0
\end{aligned}$$

)
これは $\lambda_i = 0, (1 \le i \le k)$ と同値。よって、$W^\perp$ の任意のベクトルは $w'_j, (1 \le j \le n-k)$ の線形和で書けるため、$W^\perp$ の正規直交基底は $w'_1, \cdots, w'_{n-k}$ である。補題の証明は以上。
帰納法で証明する。
・n = 1 の時は,$\Leftarrow, \Rightarrow$ 共に成立している。
・n > 1 とする。まず $\Leftarrow$ を証明する。
A を正規行列とする。　線形変換 $f : \mathbb{C}^n \to \mathbb{C}^n$ を $f(x) = Ax, x \in \mathbb{C}^n$ と定義する。A の固有値 α に対する固有空間 V_α の直交補空間 $V_\alpha^\perp$ を考える。V_α の正規直交基底を Λ, V_α の次元 $dimV_\alpha = m$ とし、$V_\alpha^\perp$ の正規直交基底を Υ とすると、Λ, Υ を並べて得られる Ω は $\mathbb{C}$ の正規直交基底である ($\because$ 補題). ここで性質 1 より、f の Ω に関する表現行列は、$U^{-1}AU = \alpha E_m \oplus A_1$ で表される。ここで U は、正規直交基底 Ω を並べてできるユニタリ行列である。性質 2 より、$U^{-1}AU$ は正規行列である。これより (n - m) 次正方行列 A_1 は正規行列である。帰納法の仮定から (n - m) 次ユニタリ行列 U_1 が存在して、$U_1^{-1}A_1U_1$ は対角行列となる。$P = U(E_m \oplus U_1)$ とおくと、

$$\begin{aligned}
PP^\dagger &= U(E_m \oplus U_1)(U(E_m \oplus U_1))^\dagger \\
&= U(E_m \oplus U_1)(E_m \oplus U_1)^\dagger U^\dagger \\
&= U(E_m \oplus U_1U_1^\dagger)U^\dagger \\
&= I, \\
P^{-1}AP &= P^\dagger AP \\
&= (U(E_m \oplus U_1))^\dagger A(U(E_m \oplus U_1)) \\
&= (E_m \oplus U_1^\dagger)U^\dagger AU(E_m \oplus U_1) \\
&= (E_m \oplus U_1^\dagger)(\alpha E_m \oplus A_1)(E_m \oplus U_1) \\
&= \alpha E_m \oplus U_1^\dagger A_1 U_1.
\end{aligned}$$

ゆえに P はユニタリ行列であり、$U_1^\dagger A_1 U_1$ が対角行列となることから $P^{-1}AP = P^\dagger AP$ は対角行列となる。以上より,$\Leftarrow$ が示せた。
A について、あるユニタリ行列 U が存在して、$D = U^{-1}AU$ が対角行列であるとする。この時、性質 2 より $A = UDU^{-1}$ は正規行列となる。 これより $\Rightarrow$ が示せた。

22 Exercise2.17:

Show that a normal matrix is Hermitian if and only if it has real eigenvalues.
（補足）固有値が全て実数である、と言う意味。
proof: 行列 A が正規行列であるとする。すなわち $AA^\dagger = A^\dagger A$. このとき、行列 A はユニタリ対角化可能であることから、あるユニタリ行列 U が存在し、$D \equiv U^\dagger AU$ は対角行列となる。(対角化可能については復習 4 を参照してください。) ここで、A の固有ベクトルが実数であるとすると、$D = D^\dagger$ となる。このとき、$A = UDU^\dagger = (U^\dagger)^\dagger(D^\dagger)^\dagger U^\dagger = (UD^\dagger U^\dagger)^\dagger = (UDU^\dagger)^\dagger = A^\dagger$. ゆえに、$A$ は Hermitian である。
逆に A が Hermitian とする。A の固有値 $\alpha \in \mathbb{C}$ に対する固有空間 V_α の固有ベクトルを $v \in V_\alpha$ とする。ここで、次の補題を示す。
・補題：正規行列 A について、その固有値 α に対する固有空間 V_α のベクトルを $x \in V_\alpha$ とすると、

$$Ax = \alpha x \Leftrightarrow A^\dagger x = \alpha^* x.$$

proof:

$$\begin{aligned}
Ax = \alpha x &\Leftrightarrow (A - \alpha E)x = 0 \\
&\Leftrightarrow ((A - \alpha E)x, (A - \alpha E)x) = 0 \\
&\Leftrightarrow (x, (A - \alpha E)^\dagger (A - \alpha E)x) = 0 \\
&\Leftrightarrow (x, (A - \alpha E)(A - \alpha E)^\dagger x) = 0, (\text{ここで } AA^\dagger = A^\dagger A \text{ を用いた}) \\
&\Leftrightarrow ((A - \alpha E)^\dagger x, (A - \alpha E)^\dagger x) = 0 \\
&\Leftrightarrow (A - \alpha E)^\dagger x = 0 \\
&\Leftrightarrow A^\dagger x = \alpha^* x.
\end{aligned}$$

A は Hermitian より、正規行列であるので、この補題より、$A^\dagger v = Av = \alpha^* v = \alpha v$. ここから、$(\alpha^* - \alpha)v = 0$. V_α は 0 でない元を含むため、$\alpha^* = \alpha$. ゆえに α は実数である。

23 Exercise 2.18:

Show that all eigenvalues of a unitary matrix have modulus 1, that is, can be written in the form $e^{i\theta}$ for some real θ.

proof: ユニタリ行列 U の固有値を α, 対応する固有空間のベクトルを $v \in V_\alpha$ とする。このとき、$Uv = \alpha v$. $U^{-1} = U^\dagger$ より、$v = \alpha U^\dagger v = \alpha\alpha^* v = |\alpha|^2 v$. (こちらの補題も参照してください。) これより、$|\alpha|^2 = 1$. すなわちある θ が存在し、$\alpha = e^{i\theta}$.

24 Exercise2.19:(Pauli matrices: Hermitian and unitary)

Show that the Pauli matrices are Hermitian and unitary.

proof: 復習 3 より、

$$\sigma_0 \equiv I \equiv \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}, \sigma_1 \equiv X \equiv \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix},$$
$$\sigma_2 \equiv Y \equiv \begin{bmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{bmatrix}, \sigma_3 \equiv Z \equiv \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix}.$$

ここで行列 A において、$A^\dagger = (A^*)^t$ となることを考慮すると、任意の $i, (0 \leq i \leq 3)$ について, $(\sigma_i^*)^t = \sigma_i, \sigma_i(\sigma_i^*)^t = I$, となることが分かる。

25 Exercise 2.20:(Basis changes)

Suppose A' and A'' are matrix representations of an operator A on a vector space V with respect to two different orthonormal bases, $|v_i\rangle$ and $|w_i\rangle$. Then the elements of A' and A'' are $A'_{ij} = \langle v_i|A|v_j\rangle$ and $A''_{ij} = \langle w_i|A|w_j\rangle$. Characterize the relationship between A' and A''.
large proof: $|w_i\rangle$ は V の基底であるから、V の元 $|v_j\rangle$ は $|w_i\rangle$ の線型結合で表される。すなわち、$|v_j\rangle = \sum_{i'} p_{i'j}\,|w'_i\rangle$. p_{ij} を成分とする行列を P とする。
これより、

$$\begin{aligned}
A'_{ij} &= \langle v_i|A|v_j\rangle \\
&= (\sum_{i'} p^*_{i'i}\,\langle w'_i|)A(\sum_k p_{kj}\,|w_k\rangle) \\
&= \sum_{i',k} \langle w'_i|p^*_{i'i}p_{kj}A|w_k\rangle \\
&= \sum_{i',k} p^*_{i'i}p_{kj}\,\langle w'_i|A|w_k\rangle \\
&= \sum_{i',k} p^*_{i'i}p_{kj}A''_{i'k} \\
&= \sum_{i'} p^*_{i'i}(\sum_k A''_{i'k}\cdot p_{kj}) \\
&= \sum_{i'} p^*_{i'i}(A'P)_{i'j} \quad \text{(ここで行列 } V \text{ の } (i,j) \text{ 成分を } V_{ij} \text{と表記する。)} \\
&= \sum_{i'} (P^\dagger)_{ii'}(A''P)_{i'j} \\
&= (P^\dagger A''P)_{ij}
\end{aligned}$$

ゆえに、$A' = P^\dagger A''P$.

26 復習 5:スペクトル分解 (本文 p.72)

theorem : (*Spectral decomposition*) Any normal operator M on a vector space V is diagonal with respect to some orthonormal basis for V. Conversely, any diagonalizable operator is normal.

proof: "正規作用素 $M: V \to V$ は対角化可能である" ことを V の部分空間 W の次元 d における帰納法を用いて示す。

· $d = 1$ の時、W の基底を $|v\rangle$ とする。この時、V で定義された任意の $W \subset V$ 上の正規作用素 $M: V \to V$ の作用は、基底に対する作用の和で表されるので、ある $\alpha \in \mathbb{C}$ を用いて $M|v\rangle = \alpha |v\rangle$ と表すことができる。ゆえに、一次元に作用する正規作用素 M は対角化可能で、$M = \alpha |v\rangle \langle v|$ と表すことができる。(ここで大事なのは、$W \setminus V$ における M の作用は気にしないことである。とにかく、W 上において、M は $M = \alpha |v\rangle \langle v|$ と同じ作用をすることを示したのである。)

·V の次元を d とする。W を次元が $(d-1)$ であるような、V の部分空間としたとき、正規作用素 $M: W \to W$ は W の正規直交基底で対角化可能であるとする。λ を M の固有値とし、P_λ を対応する固有空間の正規化された固有ベクトル $|\lambda\rangle$ への射影作用素とし、Q_λ をその補空間への射影作用素とする。つまり、$P_\lambda = |\lambda\rangle \langle\lambda|, Q_\lambda = I_V - P_\lambda$ である。

この時、$M = I_V M I_V = (P_\lambda + Q_\lambda) M (P_\lambda + Q_\lambda) = P_\lambda M P_\lambda + Q_\lambda M P_\lambda + P_\lambda M Q_\lambda + Q_\lambda M Q_\lambda$. 明らかに,$P_\lambda M P_\lambda = \lambda P_\lambda$. また、$Q_\lambda M P_\lambda = 0$. ここで、$|v\rangle$ を部分空間 P_λ のベクトルとすれば、$MM^\dagger |v\rangle = M^\dagger M |v\rangle = \lambda M^\dagger |v\rangle$. ゆえに $M^\dagger |v\rangle$ は固有値 λ をもつような部分空間 P_λ の要素である。すなわち $Q_\lambda M^\dagger P_\lambda = 0$. これのエルミート共役 (自己随伴共役) をとれば,$P_\lambda M Q_\lambda = 0$. これらより、$M = P_\lambda M P_\lambda + Q_\lambda M Q_\lambda$.

次に、$Q_\lambda M Q_\lambda$ が正規であることを示す。$Q_\lambda M = Q_\lambda M (P_\lambda + Q_\lambda) = Q_\lambda M Q_\lambda$, $Q_\lambda M^\dagger = Q_\lambda M^\dagger (P_\lambda + Q_\lambda) = Q_\lambda M^\dagger Q_\lambda$. また、射影作用素 Q_λ の性質 $Q_\lambda^2 = Q_\lambda$ より、

$$\begin{aligned}
Q_\lambda M Q_\lambda Q_\lambda M^\dagger Q_\lambda &= Q_\lambda M Q_\lambda M^\dagger Q_\lambda \ (\because Q_\lambda^2 = Q_\lambda) \\
&= Q_\lambda M M^\dagger Q_\lambda \ (\because Q_\lambda M Q_\lambda = Q_\lambda M) \\
&= Q_\lambda M^\dagger M Q_\lambda \ (\because MM^\dagger = M^\dagger M) \\
&= Q_\lambda M^\dagger Q_\lambda M Q_\lambda \ (\because Q_\lambda M^\dagger = Q_\lambda M^\dagger Q_\lambda) \\
&= Q_\lambda M^\dagger Q_\lambda Q_\lambda M Q_\lambda \ (\because Q_\lambda^2 = Q_\lambda).
\end{aligned}$$

ゆえに,$Q_\lambda M Q_\lambda$ は $(d-1)$ 次元の部分空間 W に作用する正規作用素と考えることができる。帰納法の仮定より、$Q_\lambda M Q_\lambda : V \to V$ は、W において Q_λ の正規直交基底を用いて対角化可能である。

$Q_\lambda M Q_\lambda$ の $|x\rangle \in V \setminus W$ に対する作用を考えると、$V \setminus W$ はすなわち、$|\lambda\rangle$ で張られる空間に等しいため、$Q_\lambda = I_V - P_\lambda$ であることから、$Q_\lambda M Q_\lambda |x\rangle = 0$ であることがわかる。この議論より、λ_i を Q_λ の正規直交基底とすると、V 上で $Q_\lambda M Q_\lambda = \sum_i \lambda_i |\lambda_i\rangle \langle\lambda_i|$ と表される。

これらより、$M = P_\lambda M P_\lambda + Q_\lambda M Q_\lambda = \lambda |\lambda\rangle \langle\lambda| + \sum_i \lambda_i |\lambda_i\rangle \langle\lambda_i|$ はベクトル空間全体の正規直交基底で対角化可能である。

また、$M = P_\lambda M P_\lambda + Q_\lambda M Q_\lambda$ であることから、$Q_\lambda M Q_\lambda$ の固有値を ν, 対応する固有ベクトルを $|\nu\rangle$ とす

れば、

$$\begin{aligned} M\left|\nu\right\rangle &= P_\lambda M P_\lambda \left|\nu\right\rangle + Q_\lambda M Q_\lambda \left|\nu\right\rangle \\ &= Q_\lambda M Q_\lambda \left|\nu\right\rangle \\ &= \nu \left|\nu\right\rangle . \end{aligned}$$

すなわち、$Q_\lambda M Q_\lambda$ の固有値、固有ベクトルは M の固有値、固有ベクトルであることが分かる。
これを踏まえずとも、$M = \sum_i \lambda_i \left|\lambda_i\right\rangle \left\langle\lambda_i\right|$ と表されている M は、固有値 λ_i とこの値に対応する固有ベクトル $\left|\lambda_i\right\rangle$ を持つことが分かる。

27 Exercise 2.21:

Repeat the proof of the spectral decomposition in Box 2.2 for the case when M is Hermitian, simplifying the proof wherever possible.

proof:

28 appendix

$\langle u|\rho|u\rangle := Tr_B(\rho I_A \otimes |u\rangle \langle u|) = (Tr_B\rho)(I_A \otimes |u\rangle \langle u|)$