

目次

第 1 章	はしがきに変えて	3
1.1	はしがきめいたもの	3
1.2	構成について	5
1.2.1	本書の構成	5
第 2 章	線型代数学	7
2.1	概論	7
2.2	ベクトル空間	8
2.2.1	体	8
2.2.2	ベクトル空間	9
2.2.3	部分空間	11
2.3	線型独立・線型従属	13
2.3.1	線型結合	13
2.3.2	線型独立	13
2.3.3	線型結合の記法	15
2.4	基底	17
2.4.1	線型独立なベクトルの最大個数	17
2.4.2	ベクトル空間の基底と次元	19
2.5	線型写像	23
2.5.1	線型写像の定義	23
2.5.2	表現行列	26
2.6	固有値問題	32
2.6.1	概念	32
2.6.2	固有値問題と対角化：物理とのつながり	35
2.6.3	固有値問題の例	38

2.7	内積	44
2.7.1	内積の公理	44
2.7.2	ベクトルの直交	46
2.8	正規直交基底	50
2.8.1	グラム・シュミットの直交化法	50
2.8.2	直和と直交補空間	54
2.9	自己共役演算子とスペクトル分解	57
2.9.1	演算子のベクトルへの作用	57
2.9.2	ユニタリ演算子	59
2.9.3	自己共役演算子	61
2.9.4	自己共役演算子のスペクトル分解	66
第 3 章	量子力学	68
3.1	概論	68
3.2	シュテルン・ゲルラッハ実験	69
3.2.1	磁気モーメントの離散化	69
3.2.2	観測による状態の変化	71
3.3	二重スリットの干渉実験	74
3.4	量子力学の基本的構成	79
3.5	状態ベクトル	81
3.6	物理量	84
3.6.1	物理量と自己共役演算子	84
3.6.2	交換関係	87
3.7	ボルンの確率則	91
3.7.1	ボルンの確率則	91
3.7.2	物理量の期待値	92
3.8	時間発展方程式	94
3.8.1	シュレーディンガー描像	95
3.8.2	ハイゼンベルク描像	99
3.9	射影仮説	101
3.10	例題：スピン $\frac{1}{2}$	103
3.10.1	例題 1: スピン $\frac{1}{2}$ 行列	103
3.10.2	例題 2: スピン $\frac{1}{2}$ の時間発展	106

第 1 章

はしがきに変えて

1.1 はしがきめいたもの

てる (X アカウント: @eluLLLeLu) が担当するのは線型代数学と量子力学の解説である。線型代数学に関しては教養部で習う程度の予備知識を仮定するが量子力学に関しては予備知識を仮定しない。この前提のもとで量子力学らしさを十分に感じられる電子スピン系の例題を理解するために必要な物理と数学の知識を講義ノート風にまとめた。古今東西、量子力学及び線型代数学の優れた解説や教科書は数多く出版されている。そんな中で新たに解説記事を執筆するのはまさに屋上屋根を重ねるようなもので、その意義がどれほどあるかは今になっても不明である。しかし筆者の講義経験を踏まえ、素晴らしい教科書と教科書の間を繋ぐ——定理や法則の内容をよりはっきり認識させ、初学者がより詳しい教科書へ挑戦するための足がかりを作るような——気楽な解説ならば存在してもよからうと思ひ、浅学非才を顧みず執筆を引き受けることとなった。この点、執筆のきっかけと励ましをくださった紅木氏には深く感謝する。

本書は上記の内容をなるべく易しく、また落ちこぼれを出さないことを目標に書いたつもりである。実際の講義では重要な点を何度も繰り返し述べるが、本書でもそのようにしている。その意味では一文一文を読み解く必要がある重要な書物ではなく、ある意味気楽な読み物である。そのため砕けた記述——およそ自然科学の教科書にはそぐわないような記述——も散見されるがこれはむしろ意識したものである。硬派で格調高い解説にも憧れはあるが、そのような例はすでに多くの名著があるし、何よりそんなものを書く実力が筆者にはない。読者も気楽に、コーヒーやビール片手に読み進めていただいて結構である。とは言うものの数学や物理の理論は自ら手を動かして計算することでのみ身に付く部分は確かに存在すると経験的には感じる。それを認めた上で、本書（の特に量子力学の部分）はなるべく目で追えるように、それこそゴロ

寝しながらでも読めるように書いたつもりである。しかし必要なことを難しいからといって説明を避けたり、曖昧に説明したりはしなかった。気にすべき点は何度も繰り返し注意をするし、気にすべき点でない部分は勇気を持って「深く考えなくて良い」と書いた。さらにこれを読んだ読者が「何か少しでも理解できた」と思っていただけよう、随所に演習問題も挿入した。演習問題は直前にある例題を発展させたものか、重要だが紙幅の都合上省かざるを得なかった証明問題を中心に収録した。証明問題の場合は十分なヒントをつけたが、ヒントにとらわれず自己流のやり方で証明を考えたり適当な文献にあたって調べたりすると理解が深まって良いだろう。

本書は100ページほどの分量であり、この紙幅で量子力学や線型代数学の広大な世界を説明し切ることは不可能である。そこで筆者なりに量子力学の数学的な構造が持つストーリー性を意識し、その道具としての線型代数学を数値例を紹介しながら解説することにした。したがって「あれも書いてない」「これも書いてない」などの不満が多々あるだろうが、『モノを書く時に重要なことは、何を書かないかを決めることだ』という先達の金言を参考にハイライト部分がはっきり理解できるように構成したつもりである。また、随所に関連事項や“予感”のような記述も散りばめることにした。これによりさまざまな箇所 で数学と物理の接点を意識してもらえれば幸いである。反面、このように書いた書物はどうしても整理整頓された綺麗な読み物にはなり得ない。そこでかなり充実した参考文献リストを紹介し、更なる学習への読書案内とした。リストの掲載順に特に意味するところはないが、どれもが素晴らしい名著である。一冊と言わず何冊か購入し並べて読んでみると良い。

また、筆者の専門は物性理論であり、数学が専門というわけでも量子力学の基礎論が専門というわけでもない。数学に関しても量子力学に関してもユーザーとしての立場である。そこで本書の解説は幾分数学に関しては簡素に、物理の部分に関しては言葉多く説明がされており、実にバランスが悪く不細工な体裁になっている。しかしそのような人間くささが一種本書の特徴になるだろうと開き直って、このバランスをむしろ積極的に崩していくように記述した。

長々と書いたが、要は本書を肴に量子力学の世界と緩く付き合いながら、必要に応じてもっとかつちりしたテキストにもチャレンジしていただきたいというのが筆者からのお願いである。また、そうして過ごす中で自分が大切にしたい問題を見出せれば最高である。しかし試幅の制限と筆者の不勉強がたり、当初の目標がどれだけ達成されているかは定かではない。個人的には悲観的に捉えているものの、読者が一人でも・僅かでも心に残る記述があればそれで目標は十分達成できたものとしたい。当然ながら本書の内容の誤植や誤解は筆者のてる一人の責任である。お気づきの点があればお叱りの声を含めてご連絡いただきたい。

1.2 構成について

1.2.1 本書の構成

本書ではまず、量子力学を理解するために必要な線型代数学の知識を整理する。ほとんどの大学の教養部前期で習う行列や行列式の定義、微分積分の知識は既知のものとし、抽象ベクトル空間から議論を開始する。数学パートのゴールは自己共役演算子のスペクトル分解を理解することである。尚ここで明確に断っておくが、本書で記述する数学は応用数学、もっといって”鷹揚数学”^{*1}に類するものであり、数学的な厳密性は全く気にしない。解説の仕方も公理・定義・定理といった整理された形は取らず、アイデアを紹介した後たくさんの具体例を挙げる形をとった。このような事情もあって解説の内容や構成は数学に詳しい読者からみて大変なご不満があらうかと思うが、その際はぜひ自ら厳密化・一般化を試みられ筆者までご連絡をいただきたい。筆者がそれを見て勉強し直させていただきたく思う。

さて、線型代数学の知識を整理した後は本命である量子力学の解説である。ここでは全くの初心者を想定し、解説を読み切った後は量子力学の基本的なルールを認識できるように書いた。とはいってもその量子力学のルールの解説はいくらか抽象的なものになってしまうことは避けられない。通り一遍の理屈を眺めるだけでは抽象的な概念の理解が進みにくい。量子力学に限った話ではないがこのことは筆者の、そして大多数の物理学者の経験則であるようだ。そこで抽象的な法則の理解を深めるために手で扱える具体例をいくつか扱おうと思う。しかしいたずらに高度な内容を解説しても身になるものはあるまい。特に後述するが本書では量子力学の初等的な解説には必ず説明がなされている波動力学の説明をほぼ全て割愛している。このような状況の中でも量子力学の”香り”を十分感じることが出来る系としてスピン $\frac{1}{2}$ （電子スピン）の系を取り上げる。この系は前半に学んだ有限次元の線型代数学の知識を用いることで十分に解析が可能であることがメリットである。量子力学パートのゴールはこれらの代表的な例題を解いてみることである。

次の章から本格的な解説を始めるが、その前に読者に練習問題を課す。

^{*1} この言葉に初めて触れたのは参考文献 [20] 中のはしがきであったと記憶している。大変便利な概念なのでよく使わせていただいている。しかし同文献の著者は物理学へ多大な貢献があるが、筆者はどちらかと言わずとも落ちこぼれの部類に属するからこの言葉の意味合いは若干異なってくる。

問題

- 本書に必ず存在する誤植・誤解を修正し，自ら正しく議論せよ．
- まとまった内容を読み終えたら本書を閉じ，自分なりの方法で読んだ内容を議論し直せ．必要ならば計算を行うことも推奨する．

第 2 章

線型代数学

2.1 概論

まずこれから学ぶことを一通り用語として登場させておきたいと思う（詳細な定義は後述する）。初学者はこの節を読んでもわからないはずなので飛ばしてよい。ただし目を通して専門用語に見慣れておくとは本格的に登場した時の学習ハードルが下がる。ある程度の知識がある方にとっては蛇足以外のなにものでもないが、数学と物理の接点を意識して読み流していただければと思う。

本章ではまず抽象的なベクトル空間の公理から解説をする。量子力学への応用という観点で見ると、状態ベクトルが複素数体上の内積が備わった完備なベクトル空間であるヒルベルト空間の元である^{*1}。この時状態ベクトルを用いてどんな操作が許されるか、またどんな性質が備わっているかを認識するために抽象ベクトル空間の知識が必要である。特にベクトル空間の性質である状態の線型結合（重ね合わせ）は量子力学的な波動現象の根幹をなす概念であるため、線型独立性や基底の概念についてはやや詳しく述べる。

量子力学の演算子形式では物理量が演算子（作用素）^{*2}となるが、適切な基底を選び行列表示することが多い。量子力学に現れる演算子では全エネルギーに対応する演算子であるハミルトニアンが重要な演算子の一つとして挙げられる。ハミルトニアンの固有方程式がシュレーディンガー方程式に対応し、固有値が系の固有エネルギー・固有ベクトルが系の固有状態になる。本書では固有状態を求める作業に焦点を当て、

^{*1} 無限次元のベクトル空間のみをヒルベルト空間と呼ぶこともあるが、本章では物理流の書き方として有限次元のものもヒルベルト空間と呼ぶことにする。

^{*2} 数学では作用素、物理では演算子と呼ぶことが多い。本書では物理流の書き方で演算子と呼ぶことにする。

固有値問題に関してもやや詳しく説明をする。

また、行列をベクトルを変換する写像と捉えた時、固有ベクトルを固有値倍するという操作が行列の作用であると考えて良い。この事実を強調するため、基底変換と線型写像（変換）について詳しく述べた。基底の変換は視点の変更であり、物理の問題を考える時も極めて有用である。

固有状態がわかれば量子力学的期待値として物理量の値を求めることができるが、これは内積の形で与えられる。そこで内積空間についても説明をする^{*3}。物理法則の要請を満たすために物理量に対応する演算子には著しい制限がつくが、それは線型代数学の言葉で言うところの自己随伴（自己共役）演算子の性質である。自己共役演算子は射影演算子を用いて一意なスペクトル分解が可能であり、対角化が視覚的に見やすい形で現れる。本書における線型代数学は自己共役演算子のスペクトル分解の理解を目標にする。

改めて断っておくが、本書の記述は物理数学的な書き方であり、厳密性や一般性は全く意識していない。しかし簡単な例^{*4}を通してはっきりと定理の主張を認識できるように努めた。理論物理にとっての理解とは計算ができることであるという一面が否定しようもなく存在する。このため内容を深く理解したい場合、挙げられている例は眺めるだけでなく自ら鉛筆をとって計算を行うことを勧める。

2.2 ベクトル空間

2.2.1 体

体とは数の集合で四則が閉じている集合のことである。

体の例

- 実数全体の集合は体。以下では \mathbf{R} で表す。
- 複素数全体の集合は体。以下では \mathbf{C} で表す。
- 整数全体の集合は体ではない。例えば $2 \div 3$ の結果は整数ではない。

本書では基本的に複素数体を考える。

^{*3} 本書では有限次元の場合しか扱わないため、無限次元に特有である完備性の欠如など微妙な問題は扱わない。

^{*4} 何度も同じ例（パウリ行列）が現れるがこれは意図的なもので、量子力学への接続を意識している。

2.2.2 ベクトル空間

ある集合 V に次の演算が定義され、次の 8 つのベクトル空間の公理を満たす集合 V をベクトル空間という。

ベクトル空間の演算と公理

- 集合 V の要素に以下の演算が定義されている。

$$\begin{aligned} &|a\rangle + |b\rangle, \quad (|a\rangle, |b\rangle \in V), \\ &\alpha |a\rangle, \quad (\alpha \in C) \end{aligned} \quad (2.1)$$

- 上の演算が定義されている集合 V に対し、次の 8 つの性質が成り立つ時集合 V をベクトル空間という。

$$\begin{aligned} &|a\rangle, |b\rangle, |c\rangle \in V, \\ &\alpha, \beta \in C \end{aligned} \quad (2.2)$$

- (i) $|a\rangle + |b\rangle = |b\rangle + |a\rangle$
- (ii) $(|a\rangle + |b\rangle) + |c\rangle = |a\rangle + (|b\rangle + |c\rangle)$
- (iii) $|a\rangle + \mathbf{0} = \mathbf{0} + |a\rangle = |a\rangle$ となる $\mathbf{0}$ が存在する。
- (iv) $\alpha(\beta |a\rangle) = (\alpha\beta) |a\rangle$
- (v) $(\alpha + \beta) |a\rangle = \alpha |a\rangle + \beta |a\rangle$
- (vi) $\alpha(|a\rangle + |b\rangle) = \alpha |a\rangle + \alpha |b\rangle$
- (vii) $1(|a\rangle) = |a\rangle$ となる単位元 1 が存在する。
- (viii) $0 |a\rangle = \mathbf{0}$

これらの性質は和とスカラー倍の定義が自然なものであればやかましく確認せずとも通常は成り立つものである。物理との接続の都合上、零ベクトルは $|\mathbf{0}\rangle$ ではなく単に $\mathbf{0}$ とする^{*5}。また、ベクトル空間の元をベクトルと呼ぶ。これは重要なことだ。初めてベクトルを習って以来ベクトルとは矢印のことであった。それは決して間違いではないのだが、このようにベクトル空間の公理を満たすものがベクトルと定義しておくことで、矢印が描けない要素に対してもベクトルの理論を一般に適用することができる。

^{*5} 本書では扱わないが、普通 $|\mathbf{0}\rangle$ は場の量子化で粒子が存在しない状態である真空状態を表すと定義するためである。

大切なことは「それが何か（物理的な）イメージが湧かなくても、数学的にこの操作は許される」ということを保証できることだ。量子力学の章で詳しく述べるが、量子力学ではミクロな世界の物理状態がベクトルになる（状態ベクトル）。このセンテンスの意味は最初わかりづらいと思う。しかしベクトルである以上、ベクトルが満たす数学的な性質が成立するという態度が重要である。抽象的な状態ベクトルという量を導入することで量子力学の記述が可能になることをのちの章で学ぶ。また、物理では（特に量子力学では）内積が重要であり、これを表現しやすくするためにベクトル \mathbf{a} を $|\mathbf{a}\rangle$ などと表記する。これは物理学者ディラックが導入した記法であり、ブラケット記法と呼ぶ。 $|\mathbf{a}\rangle$ はケットベクトルであり、「ケット・エー」とか「単に「ベクトルエー」などと読む。本書ではベクトルをディラックのブラケット記号を用いて表す。つまりベクトル $|\mathbf{a}\rangle$ を列ベクトルに対応させ

$$|\mathbf{a}\rangle = \begin{bmatrix} a \\ b \end{bmatrix} \quad (2.3)$$

などとなる。ここに $a, b \in \mathbf{C}$ である。また、行ベクトルを $\langle \mathbf{a}|$ の表記に対応させる。 $\langle \mathbf{a}|$ をブラベクトルと言う。ただし $\langle \mathbf{a}|$ は $|\mathbf{a}\rangle$ の対として^{*6}導入し、式 (2.3) のように列ベクトルが定義されている時

$$\langle \mathbf{a}| = [a^*, b^*] \quad (2.4)$$

である。 a^* は a の複素共役である。物理では、ブラベクトルは単独で現れることはなく必ずケットベクトルとセットで現れることをコメントしておく。もちろん数学では行ベクトルからなるベクトル空間を単独で考えることもある。また本書ではベクトルや行列の転置を右上に t を表示することで表す。例えば

$$[1, 2]^t = \begin{bmatrix} 1 \\ 2 \end{bmatrix} \quad (2.5)$$

を意味する。文章中で列ベクトルを表示するのにスペースを省略したい場合は行ベクトルの転置で表現する。また、成分を示さずに単にベクトルといった場合は列ベクトルをイメージしてほしい。

ここでベクトル空間の例をいくつか挙げよう。

^{*6} より正確に言えばケットベクトル $|\mathbf{a}\rangle$ の双対基底として $\langle \mathbf{a}|$ を導入する。詳しくは参考文献を参照のこと。

ベクトル空間の例

- 2 次元列ベクトル空間

$$|\mathbf{a}\rangle = \begin{bmatrix} a \\ b \end{bmatrix} \quad (2.6)$$

- n 次元列ベクトル空間

$$|\mathbf{a}\rangle = \begin{bmatrix} a_1 \\ a_2 \\ \vdots \\ a_n \end{bmatrix} \quad (2.7)$$

- n 次元行ベクトル空間

$$\langle \mathbf{a}| = [a_1^*, a_2^*, \dots, a_n^*] \quad (2.8)$$

問題

- これらがベクトル空間の公理を満たしていることを確認せよ.

2.2.3 部分空間

あるベクトル空間 V の部分集合 W が V に定義されている和とスカラー倍に対してベクトル空間になっている時, W を V の部分空間という. この必要十分条件は以下ようになる.

部分空間の必要十分条件

- (i) $\mathbf{0} \in W$
- (ii) $|\mathbf{a}\rangle, |\mathbf{b}\rangle \in W \rightarrow |\mathbf{a}\rangle + |\mathbf{b}\rangle \in W$
- (iii) $|\mathbf{a}\rangle \in W, \alpha \in \mathbf{C} \rightarrow \alpha |\mathbf{a}\rangle \in W$

証明はコメントを残し省略する. コメントは以下の通り: 必要性は明らか. 十分性は W を V の部分集合としてとっていることに注意すれば良い.

問題

- 部分空間の必要十分条件が上の形で与えられることを示せ.

部分空間の例を挙げる．二つ目の斉次連立一次方程式の解空間の例は重要．

ベクトル空間の例

- 複素数体上の三次元ベクトルの全体

$$V = \left\{ |\mathbf{x}\rangle = \begin{bmatrix} c_1 \\ c_2 \\ c_3 \end{bmatrix} \mid c_1, c_2, c_3 \in \mathbf{C} \right\} \quad (2.9)$$

はベクトル空間をなす．さらに

$$W = \left\{ |\mathbf{x}\rangle = \begin{bmatrix} c_1 \\ c_2 \\ 0 \end{bmatrix} \mid c_1, c_2 \in \mathbf{C} \right\} \quad (2.10)$$

を考えると， W は V の部分空間である．

- n 次の斉次連立一次方程式の解全体は n 次元ベクトル空間全体の部分空間である．

さらに具体的な例として三次元の場合を考えて

$$A = \begin{bmatrix} 1 & 2 & -1 \\ 3 & 7 & 3 \end{bmatrix}, \quad |\mathbf{x}\rangle = \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{bmatrix} \quad (2.11)$$

としたとき

$$W = \{ |\mathbf{x}\rangle \in \mathbf{R}^3 \mid A|\mathbf{x}\rangle = \mathbf{0} \} \quad (2.12)$$

は3次元列ベクトル空間 \mathbf{R}^3 の部分空間になっている．

n 次の斉次連立一次方程式に対する証明はコメントを残し省略する．コメントは以下の通り：部分空間の必要十分条件を律儀に確かめればよい． $\mathbf{0}$ が W の元であることは自明．和とスカラー倍に対しても適当なベクトル $|\mathbf{y}\rangle \in W$ に対し $A|\mathbf{y}\rangle = \mathbf{0}$ が成り立つことを念頭におけば良い．

問題

- n 次の斉次連立一次方程式の解空間が n 次元列ベクトル空間 \mathbf{R}^n の部分空間になっていることを示せ．

2.3 線型独立・線型従属

2.3.1 線型結合

ベクトル空間 V のベクトル $|v\rangle$ が V のベクトル $|u_1\rangle, \dots, |u_n\rangle$ と複素数 c_i を用いて

$$|v\rangle = c_1 |u_1\rangle + c_2 |u_2\rangle + \dots + c_n |u_n\rangle \quad (2.13)$$

と表されている時、 $|v\rangle$ を $|u_1\rangle, \dots, |u_n\rangle$ の線型結合で表したという。また式 (2.13) でこれを $\mathbf{0}$ に等しいとしたものを $|u_1\rangle, \dots, |u_n\rangle$ の線型関係という。

2.3.2 線型独立

ベクトル空間 V のベクトル $|u_1\rangle, \dots, |u_n\rangle$ が線型関係を満たす係数 c_1, \dots, c_n がすべて 0 に限られる時、 $|u_1\rangle, \dots, |u_n\rangle$ は線型独立であるという。また線型独立でない時、線型従属であるという。線型独立である時の線型関係を自明な線形関係ともいう。

線型独立と線型従属の例

- 複素数体上の二次元ベクトルの全体 $V = \mathbf{C}^2$ において

$$|\psi_{z+}\rangle = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix}, \quad |\psi_{z-}\rangle = \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix} \quad (2.14)$$

は線型独立。実際,

$$c_1 |\psi_{z+}\rangle + c_2 |\psi_{z-}\rangle = \mathbf{0} \quad (2.15)$$

を考えると、唯一の解は $c_1 = c_2 = 0$ のみである。

- 複素数体上の二次元ベクトルの全体 $V = \mathbf{C}^2$ において

$$|\psi_{y+}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} i \\ 1 \end{bmatrix}, \quad |\psi_{y-}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} 1 \\ -i \end{bmatrix} \quad (2.16)$$

は線型独立。実際,

$$c_1 |\psi_{y+}\rangle + c_2 |\psi_{y-}\rangle = \mathbf{0} \quad (2.17)$$

を考えると、唯一の解は $c_1 = c_2 = 0$ のみである。

- 複素数体上の二次元ベクトルの全体 $V = \mathcal{C}^2$ において

$$|a\rangle = \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \end{bmatrix}, \quad |b\rangle = \begin{bmatrix} -i \\ -i \end{bmatrix} \quad (2.18)$$

は線型従属。実際、

$$c_1 |a\rangle + c_2 |b\rangle = \mathbf{0} \quad (2.19)$$

を考えると、たとえば $c_1 = i, c_2 = 1$ が考えられる（定数倍により無数に存在）。

コメントは以下の通り：線型独立性の判定には行列の rank が重要な意味を果たす。すなわち線型関係の係数行列の rank が変数の数と一致している時それらのベクトルは線型独立である。行列式の理論ではハイライトになる部分ではあるが残念ながら本書では触れられない。また、線型独立とはどのベクトルを持ってきても他のベクトル組の線型結合では表せないという意味だ。一個一個のベクトルが独立して方向を作っていると言っても良いだろう。つまり線型独立なベクトルを“くまなく集めて”くれば、空間内のすべてのベクトルを線型独立なベクトルの線型結合で表現することができるだろう。くまなくとはどういうことか、そしてそのイメージが正しいかが後述の“基底”の概念に繋がる。

また、線型従属である必要十分条件は次のようになる。

線型従属の必要十分条件

- 線型空間 V のベクトル $|\mathbf{u}_1\rangle, \dots, |\mathbf{u}_n\rangle$ が線型従属である必要十分条件は、 $|\mathbf{u}_1\rangle, \dots, |\mathbf{u}_n\rangle$ の少なくとも一つが他の $n-1$ 個のベクトルの線型結合で書けることである。

証明はコメントを残し省略する。コメントは以下の通り：必要性についてはまず線型関係を書いてみる。線型従属であることは仮定していいので、どれか一つの係数が0でないことを用いて良い。その係数で他の係数を割ってみよ。十分性は $|\mathbf{u}_n\rangle$ を他の $n-1$ 個の線型結合で表してみよ。それを線型関係に置き直すと、 $|\mathbf{u}_n\rangle$ の係数が0でなくても n 個のベクトルに関する線型関係が満たされていることになる。

問題

- 線型従属である必要十分条件を示せ。

例は線型従属の例をみよ。また、次の定理は重要である。

線型結合で表現できる条件

- $|\mathbf{u}_1\rangle, |\mathbf{u}_2\rangle, \dots, |\mathbf{u}_n\rangle$ が線型独立であり、 $|\mathbf{u}\rangle, |\mathbf{u}_1\rangle, |\mathbf{u}_2\rangle, \dots, |\mathbf{u}_n\rangle$ が線型従属である時、 $|\mathbf{u}\rangle$ は $|\mathbf{u}_1\rangle, |\mathbf{u}_2\rangle, \dots, |\mathbf{u}_n\rangle$ の線型結合で表せる。

証明は以下の通り：まず $|\mathbf{u}_1\rangle, |\mathbf{u}_2\rangle, \dots, |\mathbf{u}_n\rangle$ が線型独立であることから

$$c_1 |\mathbf{u}_1\rangle + c_2 |\mathbf{u}_2\rangle + \dots + c_n |\mathbf{u}_n\rangle = 0 \quad (2.20)$$

を満たすのは $c_1 = c_2 = \dots = c_n = 0$ のみである。一方 $|\mathbf{u}\rangle, |\mathbf{u}_1\rangle, |\mathbf{u}_2\rangle, \dots, |\mathbf{u}_n\rangle$ が線型従属であるため

$$c |\mathbf{u}\rangle + c_1 |\mathbf{u}_1\rangle + c_2 |\mathbf{u}_2\rangle + \dots + c_n |\mathbf{u}_n\rangle = 0 \quad (2.21)$$

を満たす自明でない線型関係が成立する。ここで $c = 0$ とすると、自明でない線型関係が成り立つためには c_1, c_2, \dots, c_n のうち 0 でないものが存在しなければならない。これは $|\mathbf{u}_1\rangle, |\mathbf{u}_2\rangle, \dots, |\mathbf{u}_n\rangle$ が線型独立であることに反する。そこで $c \neq 0$ である。すべての項を $c \neq 0$ で割ると

$$|\mathbf{u}\rangle = -\frac{c_1}{c} |\mathbf{u}_1\rangle - \frac{c_2}{c} |\mathbf{u}_2\rangle - \dots - \frac{c_n}{c} |\mathbf{u}_n\rangle \quad (2.22)$$

以上より $|\mathbf{u}\rangle$ を $|\mathbf{u}_1\rangle, |\mathbf{u}_2\rangle, \dots, |\mathbf{u}_n\rangle$ の線型結合で表せたので、定理が示された。

2.3.3 線型結合の記法

複数のベクトルの線型独立性を一般に扱いたい場合、ベクトルと行列の積を考えると便利である。 n 次正方形行列 $A = [a_{ij}]$ とベクトルの組 $|\mathbf{u}_1\rangle, \dots, |\mathbf{u}_n\rangle$ で以下のような演算を考える*7。

$$\begin{aligned} [|\mathbf{v}_1\rangle, \dots, |\mathbf{v}_n\rangle] A &= [|\mathbf{v}_1\rangle, \dots, |\mathbf{v}_n\rangle] \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1n} \\ \vdots & \vdots & \cdots & \vdots \\ a_{n1} & a_{n2} & \cdots & a_{nn} \end{bmatrix} \\ &= [a_{11} |\mathbf{v}_1\rangle + \cdots + a_{n1} |\mathbf{v}_n\rangle, \dots, a_{1n} |\mathbf{v}_1\rangle + \cdots + a_{nn} |\mathbf{v}_n\rangle] \end{aligned} \quad (2.23)$$

*7 行列 A は正方形行列に限らず、一般に $m \times n$ の行列でよい。本書では物理への応用を考えるため、正方形行列の理論のみを扱う。

線型独立と線型従属の例

- 複素数体上の二次元ベクトルの全体 $V = \mathbf{C}^2$ において

$$\begin{aligned} [|\psi_{z+}\rangle, |\psi_{z-}\rangle] \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix} \\ = [|\psi_{z+}\rangle, -|\psi_{z-}\rangle] \end{aligned} \quad (2.24)$$

- 複素数体上の二次元ベクトルの全体 $V = \mathbf{C}^2$ において

$$\begin{aligned} [|\psi_{z+}\rangle, |\psi_{z-}\rangle] \begin{bmatrix} 2 & 1-i \\ 1+i & 3 \end{bmatrix} \\ = [2|\psi_{z+}\rangle + (1+i)|\psi_{z-}\rangle, (1+i)|\psi_{z+}\rangle + 3|\psi_{z-}\rangle] \end{aligned} \quad (2.25)$$

この記法に慣れると線型変換の議論がかなり明快になるので、いくつか自分で例を作って慣れておくことを勧める。また、次の定理も重要。

線型結合記法と零行列

- $[|\mathbf{a}_1\rangle, \dots, |\mathbf{a}_n\rangle]$ が線型独立、かつ A が n 次正方行列であり

$$[|\mathbf{a}_1\rangle, \dots, |\mathbf{a}_n\rangle] A = [\mathbf{0}, \dots, \mathbf{0}] \quad (2.26)$$

である時、 A は零行列 O である。

証明はコメントを残し省略する。コメントは以下の通り： A を具体的に成分で置いて条件式を書いてみよ。 $[|\mathbf{a}_1\rangle, \dots, |\mathbf{a}_n\rangle]$ が線型独立であることから線型関係の係数はすべて 0 になり、 $A = O$ である。

問題

- 上の定理を示せ。

この定理から直ちに次の定理が従う。

線型結合記法と行列相当

- $[|\mathbf{a}_1\rangle, \dots, |\mathbf{a}_n\rangle]$ が線型独立、かつ A と B が n 次正方行列であり

$$[|\mathbf{a}_1\rangle, \dots, |\mathbf{a}_n\rangle] A = [|\mathbf{a}_1\rangle, \dots, |\mathbf{a}_n\rangle] B \quad (2.27)$$

である時、 $A = B$ 。

証明はコメントを残し省略する．コメントは以下の通り：
仮定から

$$[|\mathbf{a}_1\rangle, \dots, |\mathbf{a}_n\rangle] A = [|\mathbf{a}_1\rangle, \dots, |\mathbf{a}_n\rangle] B. \quad (2.28)$$

右辺を左辺から引いて

$$[|\mathbf{a}_1\rangle, \dots, |\mathbf{a}_n\rangle] (A - B) = [0, \dots, 0]. \quad (2.29)$$

ここに上の定理を用いれば良い．

問題

- 上の定理を示せ．

2.4 基底

2.4.1 線型独立なベクトルの最大個数

ベクトル空間 V の集合 X を考える．この集合の中に r 個の線型独立なベクトルがあり， $r+1$ 個のどんなベクトルも線型従属である時， r を集合 X の線型独立な最大個数という．

線型独立なベクトルの最大個数の例

- 次のようなベクトル $|\psi_{z+}\rangle, |\psi_{z-}\rangle, |\psi_z\rangle$ からなる集合を考えよう：

$$|\psi_{z+}\rangle = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix}, \quad |\psi_{z-}\rangle = \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix}, \quad |\psi_z\rangle = \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \end{bmatrix} \quad (2.30)$$

とする．(図 2.1) この時集合 $X = \{|\psi_{z+}\rangle, |\psi_{z-}\rangle, |\psi_z\rangle\}$ の線型独立な最大個数は 2 である．例えば $|\psi_z\rangle$ は $|\psi_{z+}\rangle$ と $|\psi_{z-}\rangle$ の線型結合で表せるし， $|\psi_{z-}\rangle$ が $|\psi_z\rangle$ と $|\psi_{z+}\rangle$ の線型結合で表せるとしても良い．つまり二次元空間上の任意のベクトルはこれらベクトルのうち任意の二つを選ぶとその線型結合で表現できる．

- 複素数体上の二次元ベクトル空間全体の適当な部分空間 W を考え，そ

の元について上の例で用いた $|\psi_{z+}\rangle, |\psi_{z-}\rangle, |\psi_z\rangle$ を用いて、たとえば

$$\begin{aligned} |\mathbf{w}_1\rangle &= c_{11} |\psi_{z+}\rangle + c_{12} |\psi_{z-}\rangle + c_{13} |\psi_z\rangle, \\ |\mathbf{w}_2\rangle &= c_{21} |\psi_{z+}\rangle + c_{22} |\psi_{z-}\rangle + c_{23} |\psi_z\rangle, \\ |\mathbf{w}_3\rangle &= c_{31} |\psi_{z+}\rangle + c_{32} |\psi_{z-}\rangle + c_{33} |\psi_z\rangle \end{aligned} \quad (2.31)$$

と表したとしよう．ここで $|\psi_z\rangle = |\psi_{z+}\rangle + |\psi_{z-}\rangle$ から

$$\begin{aligned} |\mathbf{w}_1\rangle &= (c_{11} + c_{13}) |\psi_{z+}\rangle + (c_{12} + c_{13}) |\psi_{z-}\rangle, \\ |\mathbf{w}_2\rangle &= (c_{21} + c_{23}) |\psi_{z+}\rangle + (c_{22} + c_{23}) |\psi_{z-}\rangle, \\ |\mathbf{w}_3\rangle &= (c_{31} + c_{33}) |\psi_{z+}\rangle + (c_{32} + c_{33}) |\psi_{z-}\rangle \end{aligned} \quad (2.32)$$

である． $|\psi_{z+}\rangle$ と $|\psi_{z-}\rangle$ は $|\mathbf{w}_1\rangle$ と $|\mathbf{w}_2\rangle$ の線型結合で書けることから、 $|\mathbf{w}_3\rangle$ も $|\mathbf{w}_1\rangle$ と $|\mathbf{w}_2\rangle$ の線型結合で書ける．すなわち集合 $Y = \{|\mathbf{w}_1\rangle, |\mathbf{w}_2\rangle, |\mathbf{w}_3\rangle\}$ の線型独立な最大個数は 2 である．集合内のベクトルの数を増やしても変わらないことは明らかであろう．

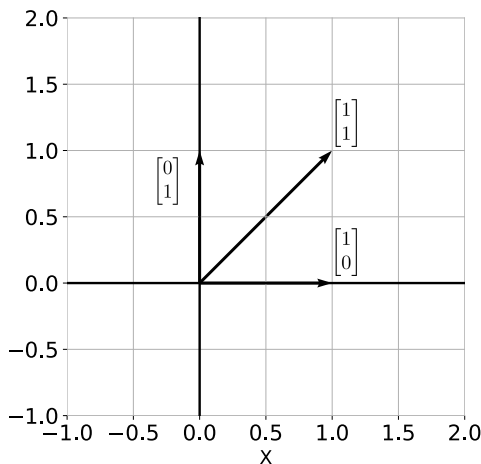


図 2.1 基底ベクトルの例． $X = \{|\psi_{z+}\rangle, |\psi_{z-}\rangle, |\psi_z\rangle\}$ をそれぞれ図示したもの．
どの二つをとってもその線型結合でこの空間上のすべてのベクトルを表現できる．

以上の例を踏まえ、以下の二つの定理は基本的である．

線型独立なベクトルの最大個数と線型結合

- ベクトル空間 V の二つの組 $\{|v_1\rangle, |v_2\rangle, \dots, |v_m\rangle\}$ と $\{|u_1\rangle, |u_2\rangle, \dots, |u_n\rangle\}$ を考える. $|v_1\rangle, |v_2\rangle, \dots, |v_m\rangle$ が $|u_1\rangle, |u_2\rangle, \dots, |u_n\rangle$ の線型結合で書けるならば,

$$\{|v_1\rangle, |v_2\rangle, \dots, |v_m\rangle\} \text{ の最大個数} \leq \{|u_1\rangle, |u_2\rangle, \dots, |u_n\rangle\} \text{ の最大個数} \quad (2.33)$$

である.

- $\{|u_1\rangle, |u_2\rangle, \dots, |u_n\rangle\}$ の線型独立なベクトルの最大個数が r 個であることと, $\{|u_1\rangle, |u_2\rangle, \dots, |u_n\rangle\}$ の中に r 個の線型独立なベクトルが存在し, 残りの $n - r$ 個のベクトルは r 個のベクトルの線型結合で表せることは同値.

証明はコメントを残し省略する. コメントは以下の通り: 線型独立なベクトルの最大個数が r 個であるとしてみて, その表現を具体的にいくつか書き下してみると良い. 定理の示す内容は先に挙げた例で確認すれば十分.

問題

- 上の定理を示せ.

2.4.2 ベクトル空間の基底と次元

ベクトル空間 V を考える. V のすべてのベクトルが V に属するベクトルの組 $|u_1\rangle, |u_2\rangle, \dots, |u_n\rangle$ の線型結合で表される時, $|u_1\rangle, |u_2\rangle, \dots, |u_n\rangle$ は V を生成するという.

ベクトル空間の生成

- 二次元列基本ベクトル $|e_1\rangle = [1, 0]^t, |e_2\rangle = [0, 1]^t$ は複素数体上の二次元ベクトル空間 C^2 を生成する. 実際, 複素数体上の二次元ベクトル空間 C^2 の任意のベクトルは線型結合の係数 c_1, c_2 を複素数として適当に選ぶことで表現できる.

$$c_1 |e_1\rangle + c_2 |e_2\rangle = \begin{bmatrix} c_1 \\ c_2 \end{bmatrix} \quad (2.34)$$

- ベクトル $|\psi_{z+}\rangle, |\psi_{z-}\rangle$ は複素数体上の二次元ベクトル空間 \mathcal{C}^2 を生成する。実際、複素数体上の二次元ベクトル空間 \mathcal{C}^2 の任意のベクトルは線型結合の係数 c_1, c_2 を適当に選ぶことで表現できる。

$$c_1 |\psi_{z+}\rangle + c_2 |\psi_{z-}\rangle = \begin{bmatrix} c_1 \\ -c_2 \end{bmatrix} \quad (2.35)$$

ベクトル空間の生成に関して、ベクトルの組に線型独立を要請していないことに注意しよう。しかし線型独立なベクトルを“くまなく、無駄なく”集めてくれば、任意のベクトルを線型独立なベクトルの線型結合で表現できそうな直感はある。この直感は有限次元（次元の正しい定義は後述）ベクトル空間では厳密に正しい。先走って結論を述べてしまったが、ベクトル空間の生成と線型独立性の間には重要な関係がある。それが基底という概念である。

ここでベクトル空間 V のベクトルの組 $\{|\mathbf{u}_1\rangle, |\mathbf{u}_2\rangle, \dots, |\mathbf{u}_n\rangle\}$ が以下の二つの条件を満たすとき、 $\{|\mathbf{u}_1\rangle, |\mathbf{u}_2\rangle, \dots, |\mathbf{u}_n\rangle\}$ をベクトル空間 V の基底という。

ベクトル空間の基底

- $\{|\mathbf{u}_1\rangle, |\mathbf{u}_2\rangle, \dots, |\mathbf{u}_n\rangle\}$ は線型独立。
- $\{|\mathbf{u}_1\rangle, |\mathbf{u}_2\rangle, \dots, |\mathbf{u}_n\rangle\}$ はベクトル空間 V を生成する。

要は、“くまなく、無駄なく”種となるベクトルを集めてくれば、それらの線型結合で任意のベクトルを表すことができるというイメージだ。必要十分と言ってもいいだろう。基底ベクトルによってベクトル空間という“家”が成り立っている、という意味がベース（基底）という用語にピッタリであろう。

ベクトル空間の生成

- 二次元列基本ベクトル $|\mathbf{e}_1\rangle, |\mathbf{e}_2\rangle$ は線型独立であり複素数体上の二次元ベクトル空間 \mathcal{C}^2 を生成するため基底である。
- $|\psi_{z+}\rangle, |\psi_{z-}\rangle$ は線型独立であり複素数体上の二次元ベクトル空間 \mathcal{C}^2 を生成するため基底である。
- $|\mathbf{e}_1\rangle, |\mathbf{e}_2\rangle, \dots, |\mathbf{e}_n\rangle$ は n 次元ベクトル空間の基底になる。
 $|\mathbf{e}_1\rangle, |\mathbf{e}_2\rangle, \dots, |\mathbf{e}_n\rangle$ を特に標準基底という。

標準基底はある意味“当たり前”の基底であるが、後述する線型写像（変換）と行列を結びつける際に重要な役割を果たす。例から明らかであるが、一つのベクトル空間

において基底の取り方は無数にある．しかし一度基底を決めて任意のベクトルを線型結合で表したとき，線型結合の係数（これを成分という）は基底に対し一意に決まる．

成分の一意性

- ベクトル空間 V の元 $|\mathbf{v}\rangle$ が V の基底 $\{|\mathbf{u}_1\rangle, |\mathbf{u}_2\rangle, \dots, |\mathbf{u}_n\rangle\}$ により以下の線型結合で表されているとする．

$$|\mathbf{v}\rangle = c_1 |\mathbf{u}_1\rangle + c_2 |\mathbf{u}_2\rangle + \dots + c_n |\mathbf{u}_n\rangle \quad (2.36)$$

この時， c_1, c_2, \dots, c_n は一意に定まる．

証明はコメントを残し省略する．コメントは以下の通り：成分が異なるとして $\{|\mathbf{u}_1\rangle, |\mathbf{u}_2\rangle, \dots, |\mathbf{u}_n\rangle\}$ の線型結合を二つ書いてみる． $\{|\mathbf{u}_1\rangle, |\mathbf{u}_2\rangle, \dots, |\mathbf{u}_n\rangle\}$ は基底だから線型独立なので，自明な線型結合しかありえないので二つの置き方は同値になる．

問題

- 上の定理を示せ．

また，基底に関して次の定理が成り立つ．

基底の個数

- ベクトル空間 V の基底に含まれるベクトルの数は基底の取り方によらず一定である．

証明は以下の通り：

$|\mathbf{u}_1\rangle, |\mathbf{u}_2\rangle, \dots, |\mathbf{u}_n\rangle$ と $|\mathbf{w}_1\rangle, |\mathbf{w}_2\rangle, \dots, |\mathbf{w}_m\rangle$ が共にベクトル空間 V の基底であるとする．

$|\mathbf{u}_1\rangle, |\mathbf{u}_2\rangle, \dots, |\mathbf{u}_n\rangle$ は V の元より $|\mathbf{w}_1\rangle, |\mathbf{w}_2\rangle, \dots, |\mathbf{w}_m\rangle$ の線型結合で表せる．この時 $n > m$ ならば定理 (2.3.2) より $|\mathbf{w}_1\rangle, |\mathbf{w}_2\rangle, \dots, |\mathbf{w}_m\rangle$ は線型従属になるため基底であるという仮定に反する．すなわち $n \leq m$ ．まったく同様に $|\mathbf{w}_1\rangle, |\mathbf{w}_2\rangle, \dots, |\mathbf{w}_m\rangle$ は $|\mathbf{u}_1\rangle, |\mathbf{u}_2\rangle, \dots, |\mathbf{u}_n\rangle$ の線型結合で表されることから $m \leq n$ 以上より $n = m$ でありベクトル空間 V の基底に含まれるベクトルの数は基底の取り方によらず一定であることが示された．

ベクトル空間の次元は例を通して直感的に明らかだろうが，ここで正確な定義を与えておく：

基底と次元

- ベクトル空間 V の基底を構成するベクトルの個数を V の \mathbb{C} 上の次元といい、 $\dim V$ などと表す.
- 有限個のベクトルを基底に持つベクトル空間を有限次元ベクトル空間という.

ベクトル空間が有限次元である時、基底が存在することが示される：

有限次元ベクトル空間と基底の存在

- ベクトル空間 V が有限次元ベクトル空間であるならば基底が存在する.

証明はコメントを残し省略する. コメントは以下の通り：証明は 2.3.2：線型結合で表現できる条件の証明と同様に行えば良い.

問題

- 上の定理を示せ.

ベクトル空間の次元がわかっている時、ベクトルの集合がベクトル空間 V の基底になるかは線型独立であるか V を生成するかどちらか一方が成り立てば良い. つまり有限次元では次の定理が成り立つ.

有限次元ベクトル空間の基底定理

- ベクトル空間 V が n 次元ベクトル空間であるとする. V に属するベクトル $|\mathbf{u}_1\rangle, |\mathbf{u}_2\rangle, \dots, |\mathbf{u}_n\rangle$ に対し、以下の 3 条件は同値.
 - (1) $|\mathbf{u}_1\rangle, |\mathbf{u}_2\rangle, \dots, |\mathbf{u}_n\rangle$ が V の基底.
 - (2) $|\mathbf{u}_1\rangle, |\mathbf{u}_2\rangle, \dots, |\mathbf{u}_n\rangle$ が線型独立.
 - (3) $|\mathbf{u}_1\rangle, |\mathbf{u}_2\rangle, \dots, |\mathbf{u}_n\rangle$ が V を生成する.

証明はコメントを残し省略する. コメントは以下の通り：(1) は (2) と (3) を合わせたものだから、(2) と (3) が同値であることを示せば良い. (2) \Rightarrow (3) は V の任意の元として $|\mathbf{u}\rangle$ を取ってくると $|\mathbf{u}_1\rangle, |\mathbf{u}_2\rangle, \dots, |\mathbf{u}_n\rangle, |\mathbf{u}\rangle$ は線型従属だから $|\mathbf{u}\rangle$ は $|\mathbf{u}_1\rangle, |\mathbf{u}_2\rangle, \dots, |\mathbf{u}_n\rangle$ の線型結合で書ける. つまり V を生成する. (3) \Rightarrow (2) は $|\mathbf{u}_1\rangle, |\mathbf{u}_2\rangle, \dots, |\mathbf{u}_n\rangle, |\mathbf{u}\rangle$ が V を生成するので線型独立なベクトルの最大個数は n になる. 線型独立なベクトルの最大個数がベクトルの組の数と一致するため、線型独立であることが言える (つまり余分なものが存在していないということだ).

問題

- 上の定理を示せ.

2.5 線型写像

2.5.1 線型写像の定義

線型写像は比例式 $y = ax$ を他変数に拡張したものである. 量子力学では物理量を線型演算子, つまり線型写像に対応させるため, 線型写像の概念を理解しておくことは重要である. まず例として次の事実を確認しておこう.

線型写像の例

- 実数 R 上で定義された関数 $f(x) = ax$ は実数 x を実数 ax に変換する (写す).

たとえば $a = 2$ の時 $x = 1$ に対し $f(1) = 2$, $x = \frac{1}{2}$ に対し $f(\frac{1}{2}) = 1$, $x = \sqrt{2}$ に対し $f(\sqrt{2}) = 2\sqrt{2}$ など.

値がどうこうというより, 元々実数であった $x = 1, \frac{1}{2}, \sqrt{2}$ がやはり実数の $f(x) = 2, 1, 2\sqrt{2}$ に写っている (変換されている) 対応が重要.

- $m \times n$ 行列 A は, n 次元列ベクトルを m 次元列ベクトルに変換する (写す).

たとえば 2×2 行列として次の行列 σ_x を考えよう.

$$\sigma_x = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix} \quad (2.37)$$

この σ_x をベクトル $|x\rangle = [a, b]^t$ に作用させる (かける) と

$$\sigma_x |x\rangle = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a \\ b \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} b \\ a \end{bmatrix} \quad (2.38)$$

になる. これは σ_x がベクトル $[a, b]^t$ をベクトル $[b, a]^t$ に変換した (写した) ことを意味する. ベクトルが行列によって違うベクトルに変換された (写された) という移動をイメージしよう (図 2.2).

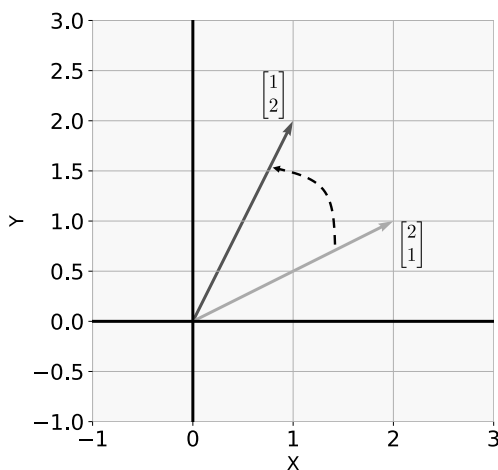


図 2.2 行列 σ_x によってベクトル $[2, 1]^t$ が $[1, 2]^t$ 変換される様子.

計算例を見たところで，線型写像に関する用語を定義していく．

写像

- 集合 X の元 x に対し集合 Y の元 y を一つ対応させる規則のことを X から Y への写像という．この写像を f として

$$y = f(x) \quad (2.39)$$

と表す． $f(x)$ を元 x の像と呼ぶ．また，集合 X から集合 X への写像を一般に変換という．

これが一般の写像の定義である．この中からさらに以下の条件を満たす写像を線型写像という．

線型写像

- \mathbf{C} 上のベクトル空間 U と V を考える．この時 U から V への写像 A が次の条件を満たすとき，写像 A のことを線型写像という．
 - $A(|\mathbf{u}_1\rangle + |\mathbf{u}_2\rangle) = A|\mathbf{u}_1\rangle + A|\mathbf{u}_2\rangle$
 - $A(\alpha|\mathbf{u}_1\rangle) = \alpha A|\mathbf{u}_1\rangle$

$A|\mathbf{u}_i\rangle \in V$ であることに注意．ベクトル空間 U と V が一致している時，線型変換という．物理では主に線型変換を対象にする．以上の定義を見た後で，もういくつか例を挙げよう．今度は線型写像でない例も含む．

線型写像の例（2）

- $|\mathbf{x}\rangle \in \mathbf{R}^5$ を実数を成分とする 5 行の縦ベクトルとする．ここで

$$A = \begin{bmatrix} 0 & 1 & 2 & -1 & 0 \\ 3 & \sqrt{2} & 0 & -1 & -\frac{1}{2} \\ 0 & 0 & 5 & 1 & 3 \end{bmatrix} \quad (2.40)$$

となる行列 A を考えると， A は $\mathbf{R}^5 \Rightarrow \mathbf{R}^3$ の線型変換である．

- 複素数を成分とする n 次元縦ベクトル全体のベクトル空間 \mathbf{C}^n から m 次元縦ベクトル全体のベクトル空間 \mathbf{C}^m への線型写像 F を考える．この線型写像 F は適当な $m \times n$ 行列 A を用いて

$$F(|\mathbf{x}\rangle) = A|\mathbf{x}\rangle \quad (2.41)$$

と表せる．これを \mathbf{C}^n の標準基底を $\{|\mathbf{e}_1\rangle, |\mathbf{e}_2\rangle, \dots, |\mathbf{e}_n\rangle\}$ ， \mathbf{C}^m の標準基底を $\{|\mathbf{e}'_1\rangle, |\mathbf{e}'_2\rangle, \dots, |\mathbf{e}'_m\rangle\}$ として， $|\mathbf{e}_j\rangle$ の像 $F(|\mathbf{e}_j\rangle)$ を

$$F(|\mathbf{e}_j\rangle) = \sum_i a_{ij} |\mathbf{e}'_i\rangle \quad (2.42)$$

という線型結合で表現しよう．ここで $m \times n$ 行列 A を (i, j) 成分が a_{ij} となる行列として定義する． \mathbf{C}^n の任意の元は $\{|\mathbf{e}_1\rangle, |\mathbf{e}_2\rangle, \dots, |\mathbf{e}_n\rangle\}$ ， \mathbf{C}^m の線型結合， \mathbf{C}^m の任意の元は $\{|\mathbf{e}'_1\rangle, |\mathbf{e}'_2\rangle, \dots, |\mathbf{e}'_m\rangle\}$ の線型結合で表されるから， n 次元縦ベクトル全体のベクトル空間 \mathbf{C}^n から m 次元縦ベクトル全体のベクトル空間 \mathbf{C}^m への線型写像 F は適当な $m \times n$ 行列 A を用いて表現できる．

- $y = f(x) = ax^2$ は線型写像ではない．実際 $x_1 + x_2$ に対し $f(x_1 + x_2) = a(x_1^2 + 2x_1x_2 + x_2^2) \neq ax_1^2 + ax_2^2$ であり，線型写像の条件を満たさない．

この例のうち二番目の例は重要である．標語的にこの例の主張を述べると，有限次元の縦ベクトルを縦ベクトルに移す線型写像は行列を用いて表現できるということだ．

問題

- ベクトル空間 U から V への線型写像 F は， U のゼロベクトル $\mathbf{0}_U$ を V のゼロベクトル $\mathbf{0}_V$ に変換することを示せ．
- 高々 n 次の多項式全体 $\mathbf{R}[x]_n$ はベクトル空間をなす．このベクトル空間において微分 D を考えると D は線型写像になることを示せ．

この事実をもとに，線型写像の表現行列を考えよう．

2.5.2 表現行列

F をベクトル空間 U から V への線型写像とする．今，次の例を考えよう．

表現行列の例 (1)

- U として \mathbf{R}^2 ， V として \mathbf{R}^3 を考えよう．基底は U と V とともに標準基底を取る．ここで U から V への線型写像 F を次の行列で定義する．

$$F(|\mathbf{u}\rangle) = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 2 \\ -1 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix}. \quad (2.43)$$

ここで

$$F(|e_1\rangle) = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 2 \\ -1 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ -1 \end{bmatrix} = 1|e'_1\rangle + 0|e'_2\rangle + (-1)|e'_3\rangle. \quad (2.44)$$

また

$$F(|e_2\rangle) = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 2 \\ -1 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 2 \\ 1 \end{bmatrix} = 0|e'_1\rangle + 2|e'_2\rangle + 1|e'_3\rangle. \quad (2.45)$$

したがって線型結合記法で表せば

$$[F(|e_1\rangle), F(|e_2\rangle)] = [|e'_1\rangle, |e'_2\rangle, |e'_3\rangle] \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 2 \\ -1 & 1 \end{bmatrix}. \quad (2.46)$$

となる.

像を並べたものを線型結合記法で表した形がポイントである. ここで次のように表現行列を定義しよう:

表現行列

- U, V をベクトル空間とする. U の基底を $\{|u_1\rangle, |u_2\rangle, \dots, |u_n\rangle\}$, V の基底を $\{|v_1\rangle, |v_2\rangle, \dots, |v_m\rangle\}$ とする.
- この時 $F(|u_i\rangle)$ は V に属するベクトルより, $\{|v_1\rangle, |v_2\rangle, \dots, |v_m\rangle\}$ の線型結合で表現できる.
- この線型結合を

$$[F(|u_1\rangle), F(|u_2\rangle), \dots, F(|u_n\rangle)] = [|v_1\rangle, |v_2\rangle, \dots, |v_m\rangle] A \quad (2.47)$$

と表現した時, 行列 A を U の基底 $\{|u_1\rangle, |u_2\rangle, \dots, |u_n\rangle\}$ と V の基底 $\{|v_1\rangle, |v_2\rangle, \dots, |v_m\rangle\}$ に関する F の表現行列という.

先に挙げた例は, 基底として標準基底をとれば, 表現行列は線型写像を表す行列と一致することを意味する. そうすると, 標準基底でない基底を選んだ時に表現行列はどのようなのが次に生まれる疑問だ. ここで基底変換行列という重要な概念を導入する.

基底変換行列

- F をベクトル空間 U から V への線型写像とする. U のある基底を $\{|u_1\rangle, |u_2\rangle, \dots, |u_n\rangle\}$, 違う基底を $\{|u'_1\rangle, |u'_2\rangle, \dots, |u'_n\rangle\}$ とする. また, 同様に V のある基底を $\{|v_1\rangle, |v_2\rangle, \dots, |v_m\rangle\}$, 違う基底を $\{|v'_1\rangle, |v'_2\rangle, \dots, |v'_m\rangle\}$ とする. それぞれの基底間の関係を

$$\begin{aligned} [|u'_1\rangle, |u'_2\rangle, \dots, |u'_n\rangle] &= [|u_1\rangle, |u_2\rangle, \dots, |u_n\rangle] P, \\ [|v'_1\rangle, |v'_2\rangle, \dots, |v'_m\rangle] &= [|v_1\rangle, |v_2\rangle, \dots, |v_m\rangle] Q \end{aligned} \quad (2.48)$$

とする. ここで P は $n \times n$ の正則行列^a, Q は $m \times m$ の正則行列である. 行列 P , Q を基底の変換行列という.

^a 逆行列を持つ行列のこと. これは $\{|u'_1\rangle, |u'_2\rangle, \dots, |u'_n\rangle\}$ や $\{|v'_1\rangle, |v'_2\rangle, \dots, |v'_m\rangle\}$ が線型独立であることから直ちに示される.

基底変換行列を用いて表現行列に関して次の定理が成り立つ.

基底変換

- F をベクトル空間 U から V への線型写像とする. F の $\{|u_1\rangle, |u_2\rangle, \dots, |u_n\rangle\}$ と $\{|v_1\rangle, |v_2\rangle, \dots, |v_m\rangle\}$ に関する表現行列を A , $\{|u'_1\rangle, |u'_2\rangle, \dots, |u'_n\rangle\}$ と $\{|v'_1\rangle, |v'_2\rangle, \dots, |v'_m\rangle\}$ の間の表現行列を B とした時,

$$B = Q^{-1}AP \quad (2.49)$$

である.

- G をベクトル空間 U の線型変換とする. U の異なる基底 $\{|u_1\rangle, |u_2\rangle, \dots, |u_n\rangle\}$ と $\{|u'_1\rangle, |u'_2\rangle, \dots, |u'_n\rangle\}$ の間に

$$[|u'_1\rangle, |u'_2\rangle, \dots, |u'_n\rangle] = [|u_1\rangle, |u_2\rangle, \dots, |u_n\rangle] P \quad (2.50)$$

が成り立っているとする. ここで G の $\{|u_1\rangle, |u_2\rangle, \dots, |u_n\rangle\}$ に関する表現行列を A , $\{|u'_1\rangle, |u'_2\rangle, \dots, |u'_n\rangle\}$ に関する表現行列を B とする時,

$$B = P^{-1}AP \quad (2.51)$$

である．このような正則行列 P が存在する時， B と A は同値であるという．

基底変換は視点の変更であり，同じ問題でも適切な視点を導入することで描像が掴みやすくなることが多い．適切な視点を導入する技術こそが問題を解くうまさと言ってもいいだろう．さて，基底変換の例を見てから定理の証明を示す．

表現行列の例 (2)

- 線型変換の例として \mathbf{R}^2 の線型変換

$$F(|\mathbf{x}\rangle) = \begin{bmatrix} 7 & -6 \\ 3 & -2 \end{bmatrix} \quad (2.52)$$

を考え，次の基底

$$|\mathbf{u}_1\rangle = \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \end{bmatrix}, \quad |\mathbf{u}_2\rangle = \begin{bmatrix} 2 \\ 1 \end{bmatrix} \quad (2.53)$$

に関する表現行列 B を求めよう．

まず線型変換 F の標準基底に関する表現行列 A は

$$A = \begin{bmatrix} 7 & -6 \\ 3 & -2 \end{bmatrix} \quad (2.54)$$

である．

今，表現行列の定義を書き下すと

$$\begin{aligned} [F(|\mathbf{e}_1\rangle), F(|\mathbf{e}_2\rangle)] &= [|\mathbf{e}_1\rangle, |\mathbf{e}_2\rangle] A, \\ [F(|\mathbf{u}_1\rangle), F(|\mathbf{u}_2\rangle)] &= [|\mathbf{u}_1\rangle, |\mathbf{u}_2\rangle] B \end{aligned} \quad (2.55)$$

である．

基底変換行列 P は

$$[|\mathbf{u}_1\rangle, |\mathbf{u}_2\rangle] = [|\mathbf{e}_1\rangle, |\mathbf{e}_2\rangle] P \quad (2.56)$$

であるから

$$P = [|\mathbf{u}_1\rangle, |\mathbf{u}_2\rangle] = \begin{bmatrix} 1 & 2 \\ 1 & 1 \end{bmatrix} \quad (2.57)$$

である．基底変換行列 P の (i, j) 成分を p_{ij} と表すと

$$\begin{aligned} |\mathbf{u}_1\rangle &= p_{11} |\mathbf{e}_1\rangle + p_{21} |\mathbf{e}_2\rangle, \\ |\mathbf{u}_2\rangle &= p_{12} |\mathbf{e}_1\rangle + p_{22} |\mathbf{e}_2\rangle \end{aligned} \quad (2.58)$$

である．線型写像の性質より

$$\begin{aligned} F(|\mathbf{u}_1\rangle) &= p_{11} F(|\mathbf{e}_1\rangle) + p_{21} F(|\mathbf{e}_2\rangle), \\ F(|\mathbf{u}_2\rangle) &= p_{12} F(|\mathbf{e}_1\rangle) + p_{22} F(|\mathbf{e}_2\rangle) \end{aligned} \quad (2.59)$$

である．すると

$$[F(|\mathbf{u}_1\rangle), F(|\mathbf{u}_2\rangle)] = [F(|\mathbf{e}_1\rangle), F(|\mathbf{e}_2\rangle)] P = [|\mathbf{e}_1\rangle, |\mathbf{e}_2\rangle] AP \quad (2.60)$$

かつ

$$[F(|\mathbf{u}_1\rangle), F(|\mathbf{u}_2\rangle)] = [|\mathbf{u}_1\rangle, |\mathbf{u}_2\rangle] B = [|\mathbf{e}_1\rangle, |\mathbf{e}_2\rangle] PB \quad (2.61)$$

である． $|\mathbf{e}_1\rangle, |\mathbf{e}_2\rangle$ は線型独立であるから式 (2.27) より

$$\begin{aligned} PB &= AP, \\ B &= P^{-1}AP = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 4 \end{bmatrix}. \end{aligned} \quad (2.62)$$

この例は示すべき定理の証明を具体的に表現したものになっている．それでは，式 (2.49) の証明を行おう．証明は以下の通り：

$n \times n$ 行列として $P = [p_{ij}]$ と置く．線型写像 F の線形性と表現行列 A の定義から

$$\begin{aligned}
 & \left[F(|\mathbf{u}'_1\rangle), \dots, F(|\mathbf{u}'_n\rangle) \right] \\
 &= [F(p_{11}|\mathbf{u}_1\rangle + \dots + p_{n1}|\mathbf{u}_n\rangle), \dots, F(p_{1n}|\mathbf{u}_1\rangle + \dots + p_{nn}|\mathbf{u}_n\rangle)], \\
 &= [p_{11}F(|\mathbf{u}_1\rangle) + \dots + p_{n1}F(|\mathbf{u}_n\rangle), \dots, p_{1n}F(|\mathbf{u}_1\rangle) + \dots + p_{nn}F(|\mathbf{u}_n\rangle)], \\
 &= [F(|\mathbf{u}_1\rangle), \dots, F(|\mathbf{u}_n\rangle)] P, \\
 &= [|\mathbf{v}_1\rangle, \dots, |\mathbf{v}_n\rangle] AP
 \end{aligned} \tag{2.63}$$

一方表現行列 B の定義から

$$\begin{aligned}
 & \left[F(|\mathbf{u}'_1\rangle), \dots, F(|\mathbf{u}'_n\rangle) \right] \\
 &= [|\mathbf{v}'_1\rangle, \dots, |\mathbf{v}'_n\rangle] B \\
 &= [|\mathbf{v}_1\rangle, \dots, |\mathbf{v}_n\rangle] QB
 \end{aligned} \tag{2.64}$$

以上より

$$[|\mathbf{v}_1\rangle, \dots, |\mathbf{v}_n\rangle] AP = [|\mathbf{v}_1\rangle, \dots, |\mathbf{v}_n\rangle] QB. \tag{2.65}$$

$|\mathbf{v}_1\rangle, \dots, |\mathbf{v}_n\rangle$ は線型独立であるから式 (2.27) より

$$\begin{aligned}
 QB &= AP, \\
 B &= Q^{-1}AP.
 \end{aligned} \tag{2.66}$$

以上の証明は線型写像の場合に対してのものであるが³，線型変換の証明も含んでいる．もし別途線型変換の証明をする場合も全く繰り返して良い．

2.6 固有値問題

2.6.1 概念

線型写像 A をベクトル $|x\rangle$ に作用させた時の振る舞いをいくつか見てみよう.

行列によるベクトルの変換 (1)

- $\sigma_x = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}$ をベクトル $|\psi_{z+}\rangle = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix}$ に作用させると

$$\sigma_x |\psi_{z+}\rangle = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix} = |\psi_{z-}\rangle. \quad (2.67)$$

- $\sigma_z = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix}$ をベクトル $|\psi_{z+}\rangle = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix}$ に作用させると

$$\sigma_z |\psi_{z+}\rangle = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix} = |\psi_{z+}\rangle. \quad (2.68)$$

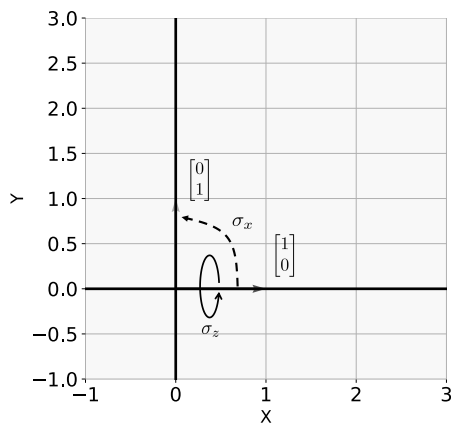


図 2.3 行列 σ_x によってベクトル $[1, 0]^t$ が $[0, 1]^t$ 変換される一方, σ_z を作用させても $[1, 0]^t$ の方向は変わらない.

例から明らかなようにベクトル $|\mathbf{x}\rangle$ に線型写像を作用させると一般には $|\mathbf{x}\rangle$ と異なるベクトル $|\mathbf{y}\rangle$ になる．しかし中には線型写像を作用させてもベクトルが変わらないものも存在する．ここでもう一つ例を見ておく．

行列によるベクトルの変換 (2)

- 次の行列 A を考えよう．

$$A = \begin{bmatrix} 7 & -6 \\ 3 & -2 \end{bmatrix}. \quad (2.69)$$

これは基底変換の例で扱った行列である．

この行列を $|\mathbf{u}_1\rangle = \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \end{bmatrix}$, $|\mathbf{u}_2\rangle = \begin{bmatrix} 2 \\ 1 \end{bmatrix}$ に作用させると

$$\begin{aligned} A|\mathbf{u}_1\rangle &= \begin{bmatrix} 7 & -6 \\ 3 & -2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \end{bmatrix}, \\ A|\mathbf{u}_2\rangle &= \begin{bmatrix} 7 & -6 \\ 3 & -2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 2 \\ 1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 8 \\ 4 \end{bmatrix} = 4 \begin{bmatrix} 2 \\ 1 \end{bmatrix}. \end{aligned} \quad (2.70)$$

この例では二つのベクトル $|\mathbf{u}_1\rangle, |\mathbf{u}_2\rangle$ に対して行列 A を作用させた時、変換後のベクトルが元のベクトルの定数倍になっている．容易にわかるように、 σ_z を $|\mathbf{u}_1\rangle, |\mathbf{u}_2\rangle$ に作用させても元のベクトルの定数倍にならない．つまり“線型変換を行っても方向が変わらないベクトル”は一般に線型変換を表現する行列ごとに異なることがわかる．また、この“定数”に注目すると、 $|\mathbf{u}_1\rangle$ は 1 倍（変わらない）、 $|\mathbf{u}_2\rangle$ は 4 倍になっている．基底変換行列の例で扱った結果を思い出すと、このベクトルの大きさを変換する倍率は、基底変換を行い対角行列になった行列の対角成分に一致している．

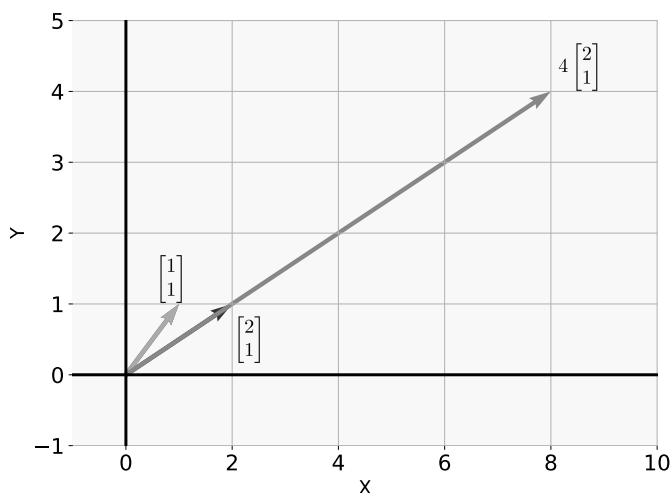


図 2.4 $|\mathbf{u}_1\rangle = [1, 1]^t, |\mathbf{u}_2\rangle = [2, 1]^t$ は上の行列 A で表現される線型変換を行っても方向が変わらず、大きさだけが変わる。大きさはそれぞれ 1 倍 (変わらない), 4 倍である。

線型変換をベクトルの移動という観点で見ると、一般にはベクトルの向きも大きさも変わるように変換する。しかし以上の例は行列を作用させても元のベクトルと方向が変わらず、大きさだけ定数倍になるという“隠された”ベクトルが行列ごとに存在することを示唆する。この特別なベクトルについて、以下のように定義しよう。

固有値・固有ベクトル

- n 次正方行列 A に対して

$$A|\mathbf{a}\rangle = a|\mathbf{a}\rangle \quad |\mathbf{a}\rangle \neq \mathbf{0} \quad (2.71)$$

を満たすスカラー a を固有値, $|\mathbf{a}\rangle$ を固有ベクトルと呼ぶ。また、式 (2.71) を固有方程式と呼ぶ。

式 (2.71) は

$$(A - aI_n)|\mathbf{a}\rangle = \mathbf{0} \quad (2.72)$$

と書き直せば $|\mathbf{a}\rangle$ についての連立一次方程式である。 I_n は n 次単位行列である。こ

の連立一次方程式が $\mathbf{0}$ でない解を持つためには^{*8},

$$\det(A - aI_n) = 0 \quad (2.73)$$

であればよい．式 (2.73) を固有方程式と呼ぶ．固有方程式は複素数の範囲で重解を含めて n 個の解を持つ．固有方程式の解が固有値になり，それぞれの固有値に対して式 (2.71) から固有ベクトルが定まる．固有ベクトルの取り方は一通りではないが，本書では固有ベクトルが規格化したものを考えることにする．固有値と固有ベクトルを求めることを固有値問題を解く，という

2.6.2 固有値問題と対角化：物理とのつながり

本書では紙幅の関係上まとまった解説ができないのでここで行列の対角化について述べておく．行列 A を対角化するとは，適当な行列 P に対し $P^{-1}AP$ という変換をして $P^{-1}AP$ の非対角成分が 0 になるような行列 P を見つけること，また $P^{-1}AP$ の対角成分を求めることである．すべての行列が対角化できるわけではないが，物理で登場する素性の良い行列（自己共役性を持つ）は一般に対角化が可能である．以下は行列が対角化できるものとして議論する．この時対角化をした際の対角成分は行列 A の固有値になっている．また，変換行列 P には行列 A の固有ベクトルを（任意の順番で）並べたものを選べば良い．

行列の対角化を線型変換という立場で見れば，線型変換をしても方向が変わらないベクトルを見つけたこと，及びそのベクトルの大きさがどれだけ変わるかを見つけたことになるだろう．直感的に言えばこの“方向”は線型変換自体に潜んでいる．対角化が可能な場合，任意のベクトルは行列の固有ベクトルの線型結合で表現できる．そして線型変換を行えば固有ベクトル自身は変わらず，ただその大きさのみが変化する．すると線型変換によるベクトルの変換は，任意のベクトルを固有ベクトルに射影したのち，その線型結合係数を固有値倍するという作業になる．つまり線型変換は固有値問題を解くことで操作の意味がヴィジュアルに表現できるのである．以下の例題と図 2.5，図 2.6 を見よ．

^{*8} 式 (2.71) で固有ベクトルに自明な解を含めていないことに注意せよ．

行列によるベクトルの変換 (3)

- 次の行列 A を考えよう.

$$A = \begin{bmatrix} 7 & -6 \\ 3 & -2 \end{bmatrix}. \quad (2.74)$$

これは先ほどから扱っている行列である.

この行列を $\begin{bmatrix} 3 \\ 4 \end{bmatrix}$ に作用させると、通常の行列積の計算より

$$\begin{bmatrix} 7 & -6 \\ 3 & -2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 3 \\ 4 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -3 \\ 1 \end{bmatrix} \quad (2.75)$$

になる.

- ところで

$$\begin{bmatrix} 3 \\ 4 \end{bmatrix} = 5 \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} 2 \\ 1 \end{bmatrix} = 5|\mathbf{u}_1\rangle - |\mathbf{u}_2\rangle \quad (2.76)$$

である. ここで

$$\begin{aligned} A|\mathbf{u}_1\rangle &= |\mathbf{u}_1\rangle, \\ A|\mathbf{u}_2\rangle &= 4|\mathbf{u}_2\rangle \end{aligned} \quad (2.77)$$

であるから

$$\begin{aligned} A \begin{bmatrix} 3 \\ 4 \end{bmatrix} &= A(5|\mathbf{u}_1\rangle - |\mathbf{u}_2\rangle), \\ &= 5A|\mathbf{u}_1\rangle - A|\mathbf{u}_2\rangle, \\ &= 5(|\mathbf{u}_1\rangle) - (4|\mathbf{u}_2\rangle), \\ &= \begin{bmatrix} -3 \\ 1 \end{bmatrix} \end{aligned} \quad (2.78)$$

とも表せる. この計算は、線型変換を表現する行列の固有値ベクトルを固有値倍して足し合わせるという操作を意味する.

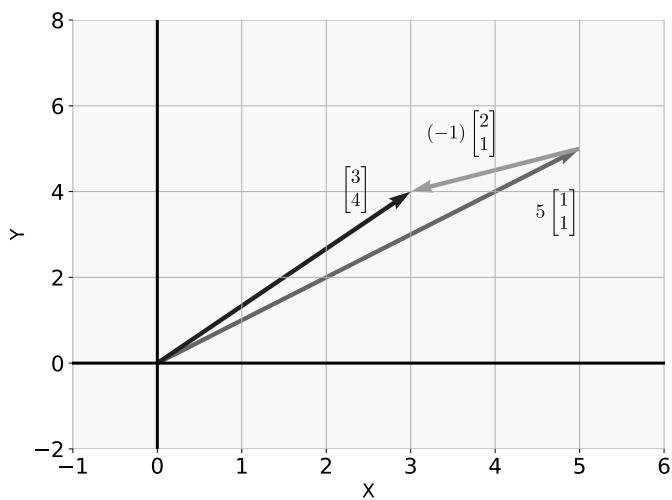


図 2.5 $[3, 4]^t$ は $[1, 1]^t$ の 5 倍と $[2, -1]^t$ の -1 倍で表現できる。

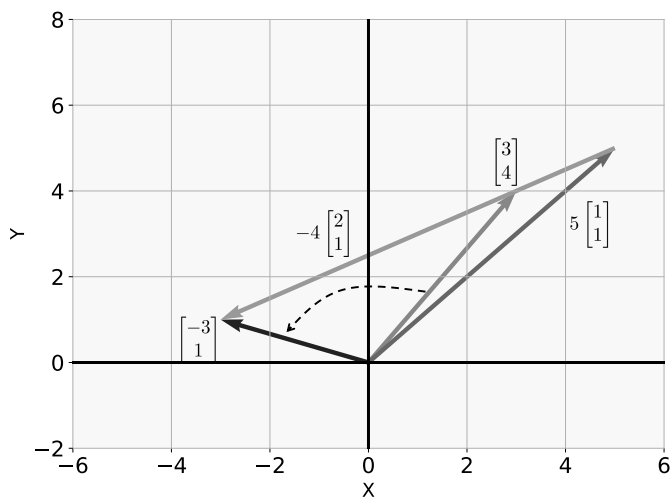


図 2.6 $[3, 4]^t$ を行列 A で変換した結果. 行列とベクトルの積を計算した結果は, 固有ベクトルの固有値倍を線型結合した結果と解釈できる。

さらに固有値問題を考えるモチベーションを物理への応用という観点から整理しておきたい。量子力学への応用を考えるにあたっては固有値問題の理解が最重要であると言って良い。なぜそう言えるかは後半の量子力学のセクションで説明するが短くここで概要を述べておく。量子力学では物理量を線型写像 (線型演算子ということが多い) に対応させる。つまり物理量は行列の形で表現されるのである。ここで物理量を表現する行列の固有値は (物理量が対応する演算子に数学的制約をつけるため) 実数になることが示される。実はこの固有値が測定を行った時に得られる物理量の値の候補になっている。すなわち固有値問題を解くことは実測値を求めることと同値なのだ。また固有ベクトルをその演算子の固有状態という。系の状態が固有状態にある時は確率1で、対応する固有値が測定時に得られる。また、任意の状態は固有状態の重ね合わせで表現されるため、一般には線型結合係数の絶対値自乗が測定値が得られる (相対的な) 確率に対応する。

ざっと説明したがこれらの内容は後ほど体系立てて詳しく説明するため、この段階で内容を理解する必要はない。しかし、“固有値問題を解くことは物理では重要なんだ、物理を考察する上でなくてはならない手法なんだ”と少しでもその香りを感じ取ってくれば良い。このような理由から、以下に示すような基本的な固有値問題を解くことに不安があっては量子力学を理解する上でたいへんな困難を伴うため、よく習熟していただきたい。

2.6.3 固有値問題の例

固有値問題は通り一遍の理屈を並べるより実際に手を動かして“習うより慣れろ”という面もあるので、以下に例をたくさん用意した。目で追って納得することはもちろん重要であるが、より学習効果を高めたい場合は自ら鉛筆を持って計算を追っていただきたいと思う。また、固有値問題の一般論については本書では扱わないので、必要に応じて巻末に示した数学の教科書で自習してほしい。しかし物理への応用を考えるにあたっては固有値問題の計算を行うことができればひとまず理解できる。

固有値問題 (1)

- 行列 σ_y の固有値と固有ベクトルを求めよう.

$$\begin{aligned}\sigma_y |a\rangle &= a |a\rangle, \\ \begin{bmatrix} -a & -i \\ i & -a \end{bmatrix} |a\rangle &= 0.\end{aligned}\tag{2.79}$$

固有方程式は

$$\begin{aligned}\det \begin{bmatrix} -a & -i \\ i & -a \end{bmatrix} &= 0, \\ a^2 - 1 &= 0, \\ a &= \pm 1.\end{aligned}\tag{2.80}$$

よって固有値は ± 1 . それぞれに対し固有ベクトルを求めよう. $a = \pm 1$ に対する固有ベクトルを $|\psi_{y\pm}\rangle$ と表す. まず $|\psi_{y+}\rangle$ であるが, これは固有値 $+1$ に対応する固有ベクトルより元の固有方程式に戻れば

$$\begin{bmatrix} -1 & -i \\ i & -1 \end{bmatrix} |+\rangle = 0\tag{2.81}$$

を満たす. $|\psi_{y+}\rangle = [x, y]^t$ と置けば

$$\begin{cases} -x - iy = 0 \\ ix - y = 0 \end{cases}\tag{2.82}$$

例えば $x = 1$ と置いてみると $y = i$ になる. これよりベクトル $[1, i]^t$ は行列 σ_y の固有値 1 に属する固有ベクトルの一つである. 規格化したものを改めて $|\psi_{y+}\rangle$ とすると

$$|\psi_{y+}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} 1 \\ i \end{bmatrix}.\tag{2.83}$$

$|\psi_{y-}\rangle$ も同様にして求められる. 以上をまとめると σ_y の固有ベクトルと固有値は

$$|\psi_{y\pm}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} 1 \\ \pm i \end{bmatrix} \quad a = \pm 1\tag{2.84}$$

である.

固有値問題 (2)

- 次の行列 H の固有値と固有ベクトルを求めよう．ここで $H = H_0 + V$ であり基底ベクトルとして $|1\rangle$ と $|2\rangle$ をとり

$$\begin{aligned} H_0 &= \varepsilon_0 (|1\rangle\langle 1| + |2\rangle\langle 2|), \\ V &= -V_0 (|2\rangle\langle 1| + |2\rangle\langle 2|) \end{aligned} \quad (2.85)$$

であるとする． ε と V_0 は実数である． H を行列表示であらわに書くと

$$H = \begin{bmatrix} \varepsilon_0 & -V_0 \\ -V_0 & \varepsilon_0 \end{bmatrix} \quad (2.86)$$

になる．固有ベクトルを $|\psi\rangle$ ，固有値を E と書くと固有方程式は

$$H|\psi\rangle = E|\psi\rangle \quad (2.87)$$

である．ここで $|\psi\rangle = [x, y]^t \neq [0, 0]^t$ とすると

$$(H - E)|\psi\rangle = \begin{bmatrix} \varepsilon_0 - E & -V_0 \\ -V_0 & \varepsilon_0 - E \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x \\ y \end{bmatrix} = \mathbf{0}. \quad (2.88)$$

固有方程式は

$$(\varepsilon_0 - E)^2 - V_0^2 = 0 \quad (2.89)$$

を満たす．これより固有値は

$$E = \varepsilon_0 \pm V_0 \quad (2.90)$$

固有値 $E = \varepsilon_0 - V_0$ に属する固有ベクトルは

$$(H - E)|\psi\rangle = \begin{bmatrix} V_0 & -V_0 \\ -V_0 & V_0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x \\ y \end{bmatrix} = \mathbf{0} \quad (2.91)$$

を満たすので例えば $x = 1$ と置いてみると $y = 1$ になる．規格化したものを改めて $|S\rangle$ とすると^a

$$|S\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \end{bmatrix}. \quad (2.92)$$

固有値 $E = \varepsilon_0 + V_0$ に属する固有ベクトルも同様に求められる．この時の固有ベクトルを $|AS\rangle$ と表すと

$$|AS\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} 1 \\ -1 \end{bmatrix}. \quad (2.93)$$

^a symmetry の意味である．続く AS は anti symmetry の意味．

固有値問題 (3)

- 次の行列 H の固有値と固有ベクトルを求めよう．ここで

$$H = -J \begin{bmatrix} \frac{1}{4} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -\frac{1}{4} & \frac{1}{2} & 0 \\ 0 & \frac{1}{2} & -\frac{1}{4} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \frac{1}{4} \end{bmatrix} \quad (2.94)$$

である．この行列は物理的には意味があって，二つのスピン $\frac{1}{2}$ に対するハイゼンベルクモデルの一部分を表している．ハイゼンベルクモデルは磁性を議論する際に有用である．

このまま解いても良いが少し工夫すると見通しが良くなる．その工夫を述べよう．行列 A が単位行列 I の定数 k 倍と適当な行列 B の和で書けたとする．

$$A = kI + B \quad (2.95)$$

A の固有値を a ，固有ベクトルを $|\alpha\rangle$ とすると $A|\alpha\rangle = a|\alpha\rangle$ であるから

$$(kI + B)|\alpha\rangle = a|\alpha\rangle \quad (2.96)$$

である．ここで $kI|\alpha\rangle = k|\alpha\rangle$ であるから

$$B|\alpha\rangle = (a - k)|\alpha\rangle. \quad (2.97)$$

つまり A と B は同じ固有ベクトルを持ち，固有値は単位行列の係数分の差で表せる．逆に $A = kI + B$ と表せる A の固有値は B に $B|\beta\rangle = b|\beta\rangle$ なる関係があるとき $k+b$ であり，固有ベクトルは $|\beta\rangle$ である．以上の事実を元に

$$H = \frac{J}{4}I_{4 \times 4} + \left(\frac{-J}{2}\right) \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} = \frac{J}{4}I_{4 \times 4} + \left(\frac{-J}{2}\right) \tilde{H} \quad (2.98)$$

と分割しよう． $I_{4 \times 4}$ は 4 行 4 列の単位行列である． H の固有値問題は実質的に \tilde{H} の固有値問題と同等であり， \tilde{H} の固有値問題の方がずっと

解きやすい. \tilde{H} の固有ベクトルを $|\psi\rangle = [x_1, x_2, x_3, x_4]^t$, 固有値を λ とすると

$$\begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ x_4 \end{bmatrix} = \lambda \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ x_4 \end{bmatrix}. \quad (2.99)$$

固有方程式は

$$\begin{aligned} \det \begin{bmatrix} 1-\lambda & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -\lambda & 1 & 0 \\ 0 & 1 & -\lambda & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1-\lambda \end{bmatrix} &= 0, \\ (1-\lambda) \det \begin{bmatrix} -\lambda & 1 & 0 \\ 1 & -\lambda & 0 \\ 0 & 0 & 1-\lambda \end{bmatrix} &= 0, \\ (1-\lambda)^2 \det \begin{bmatrix} -\lambda & 1 \\ 1 & -\lambda \end{bmatrix} &= 0, \\ (1-\lambda)^3 (1+\lambda) &= 0. \end{aligned} \quad (2.100)$$

一行目から二行目の計算は1行目に間する余因子展開を行い, 二行目から三行目の計算は3行目に関する余因子展開を行った. もちろん計算方法は自由で良い. 以上より固有値は $\lambda = -1, 1$ であり, 1 は3重解. $\lambda = 1$ (3重解) の時, 元々の行列 H の固有値は

$$\frac{J}{4} + \frac{-J}{2} = -\frac{J}{4} \quad (2.101)$$

となる. 固有ベクトルは

$$\det \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ x_4 \end{bmatrix} = \mathbf{0} \quad (2.102)$$

を満たす. なるべく簡単になるよう固有ベクトルを求めると

$$|1, 1\rangle = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}, \quad |1, -1\rangle = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \end{bmatrix}, \quad |1, 0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\begin{bmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \end{bmatrix} \right). \quad (2.103)$$

と求まる．固有ベクトルの左辺の表現は不思議に思うかもしれないが，そのような記号をつけているとみなして一旦見過ごしてほしい．

また，同様にして $\lambda = -1$ (3 重解) の時，元々の行列 H の固有値は

$$\frac{J}{4} + \frac{J}{2} = \frac{3}{4}J \quad (2.104)$$

となる．固有ベクトルは

$$\det \begin{bmatrix} -2 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ x_4 \end{bmatrix} = \mathbf{0} \quad (2.105)$$

を満たす．なるべく簡単になるよう固有ベクトルを求めると

$$|0, 0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\begin{bmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \end{bmatrix} \right). \quad (2.106)$$

と求まる．

最後の例のように固有値が重解になっても固有ベクトルを求めることができる．線型独立な固有ベクトルが何本取れるかという話題は数学的にとても重要であるが本書では深入りしない．今回見たような“素性の良い”行列であれば，縮重度の分だけ固有ベクトルを取ることができる．この“素性”とは何を表すのかというのが後半のテーマである．

問題

- 以下の行列の固有値・固有ベクトルを求めよ．

$$H = \begin{bmatrix} \varepsilon_1 & -V_0 \\ -V_0 & \varepsilon_2 \end{bmatrix}. \quad (2.107)$$

ただし $\varepsilon_1 \neq \varepsilon_2$ ．

- 以下の行列の固有値・固有ベクトルを求めよ．

$$H = \begin{bmatrix} 2 & 1 \\ 1 & 2 \end{bmatrix}. \quad (2.108)$$

- 以下の行列の固有値・固有ベクトルを求めよ.

$$H = \begin{bmatrix} 2 & 1 \\ 0 & 2 \end{bmatrix}. \quad (2.109)$$

以上の例と問題により固有方程式の例や固有値・固有ベクトルの求め方には慣れていただいたものと思う．再三繰り返すが，物理への応用を考えた時固有値問題は“解けてナンボ”というところもあるので，より深く内容を理解したい場合は，ここで紹介した例に留まらずさらに練習問題をいくつか解いてもらいたい．

2.7 内積

2.7.1 内積の公理

内積を定義することでベクトル空間に長さや角度の関係を導入する．一般のベクトル空間には内積が定義されているとは限らない．内積が定義されたベクトル空間を内積空間とか線型計量空間などと呼ぶことがある．まず内積の概念を一言で述べると，二つのベクトルベクトル $|v\rangle, |u\rangle$ に対し数 $\langle v|u\rangle$ を対応させる規則のことである． $\langle v|u\rangle$ をベクトル $|v\rangle, |u\rangle$ の内積という．内積は以下の公理を満たす演算として定義する．

内積の公理

ベクトル $|u\rangle, |v\rangle$ とスカラー $c \in \mathcal{C}$ に対し，

- $\langle u + v'|v\rangle = \langle u|v\rangle + \langle v'|v\rangle$
- $\langle u|cv\rangle = c \langle u|v\rangle$
- $\langle u|v\rangle = (\langle v|u\rangle)^*$
- $|u\rangle \neq 0$ の時 $\langle u|u\rangle \geq 0$

二つ目と三つ目の性質からゼロベクトルとの内積は 0 である．また，この内積の公理は物理流の内積に対応させたものであり，数学では二つ目の性質に対して $\langle u|cv\rangle = c^* \langle u|v\rangle$ となるように公理を要請することも多い．

標準内積

- C^n のベクトル $|\mathbf{a}\rangle = [a_1, a_2, \dots, a_n]^t$ と $|\mathbf{b}\rangle = [b_1, b_2, \dots, b_n]^t$ の内積 $\langle \mathbf{a} | \mathbf{b} \rangle$ を

$$\langle \mathbf{a} | \mathbf{b} \rangle \equiv a_1^* b_1 + a_2^* b_2 + \dots + a_n^* b_n \quad (2.110)$$

と定義すると、これは内積の公理を満たす。この内積を C^n の標準内積とか標準エルミート内積などと呼ぶ。

- 高々 n 次の複素係数多項式全体がなすベクトル空間を $C[x]_n$ とする。
 $f, g \in C[x]_n$ として

$$\langle f | g \rangle \equiv \int_{-\infty}^{\infty} f g dx \quad (2.111)$$

と定義すると、これは内積の公理を満たす。これを多項式関数の内積として定義する。

問題

- 標準エルミート内積が内積の公理を満たしていることを確かめよ。
- 多項式関数の内積が内積の公理を満たしていることを確かめよ。

以下、特に指定がなければ興味があるベクトル空間には標準エルミート内積が定義されているものとする。標準エルミート内積を物理流に述べれば、ブラベクトルをケットベクトルに作用させる操作と表現できる。つまりブラベクトルはケットベクトルに作用させて実数を返す演算子とみなすこともできるのだ。このような性質を持つ基底を $|\mathbf{a}\rangle$ に対する双対基底と呼ぶ。双対基底がなす空間もまたベクトル空間になることは良い演習問題なので確かめてみると良い。

また、内積空間 V の元 $|\mathbf{v}\rangle$ に対し $\langle \mathbf{v} | \mathbf{v} \rangle \geq 0$ である。ここでベクトルのノルムを次のように定義する。

ベクトルのノルム

内積空間 V の元 $|\mathbf{v}\rangle$ のノルムを以下のように定義する。

$$||\mathbf{v}\rangle| \equiv \sqrt{\langle \mathbf{v} | \mathbf{v} \rangle} \quad (2.112)$$

ベクトルのノルム

- C^2 のベクトル $|\mathbf{a}\rangle = [3, 4i]^t$ のノルムを求めよう。まず

$$\langle \mathbf{a} | \mathbf{a} \rangle = [3, -4i] \begin{bmatrix} 3 \\ 4i \end{bmatrix} = 9 + 16 = 25 \quad (2.113)$$

であるから

$$||\mathbf{a}\rangle| = \sqrt{\langle \mathbf{a} | \mathbf{a} \rangle} = \sqrt{25} = 5. \quad (2.114)$$

ベクトルのノルムはベクトル自身が複素数を含んでいようと必ず正の実数になる。そうならなければ計算ミスである。また、これから常にノルムが1のベクトルを用意できることがわかる。具体的には、任意のベクトル $|\mathbf{v}\rangle$ に対し $\frac{1}{\sqrt{\langle \mathbf{v} | \mathbf{v} \rangle}} |\mathbf{v}\rangle$ とすればよい。

内積とノルムに関して、一般に以下の3つの不等式が成り立つ。

内積に関する基本等式・不等式

内積空間 V のノルムと内積に関して次の等式、もしくは不等式が成立する。

- $|c|\mathbf{v}\rangle| = |c| |\mathbf{v}\rangle|$
- $|\langle \mathbf{v} | \mathbf{u} \rangle| \leq ||\mathbf{u}\rangle| |\mathbf{v}\rangle|$
- $||\mathbf{v}\rangle| + |\mathbf{u}\rangle| \leq ||\mathbf{u}\rangle| + ||\mathbf{v}\rangle|$

証明はコメントを残し省略する。コメントは以下の通り：最初の等式は $|c|\mathbf{v}\rangle|^2$ を計算すれば良い。二つ目の不等式は $|\mathbf{u}\rangle = \mathbf{0}$ の時の成立は自明であるからゼロベクトルでないとし、 $f(t) = |t|\mathbf{v}\rangle| + |\mathbf{u}\rangle|^2 > 0$ を考える。 $f(t) > 0$ となるパラメータ t の条件を考えれば直ちに不等式が従う。三つ目の不等式は $||\mathbf{v}\rangle| + |\mathbf{u}\rangle|^2$ を計算する。計算の途中で二つ目の不等式 $|\langle \mathbf{v} | \mathbf{u} \rangle| \leq ||\mathbf{u}\rangle| |\mathbf{v}\rangle|$ を用いて、 $||\mathbf{v}\rangle| + |\mathbf{u}\rangle| > 0$ であることに注意すれば導くことができる。

問題

- 上の等式・不等式を証明せよ。

2.7.2 ベクトルの直交

内積が定義された二つのベクトルのなす角度を次のように定義する。

ベクトルなす角度

- 内積空間 V の二つのベクトル $|\mathbf{u}\rangle$ と $|\mathbf{v}\rangle$ のなす角度を θ とする. θ は以下の式で定義する:

$$\cos \theta \equiv \frac{\langle \mathbf{u} | \mathbf{v} \rangle}{\sqrt{\langle \mathbf{u} | \mathbf{u} \rangle} \sqrt{\langle \mathbf{v} | \mathbf{v} \rangle}} \quad (2.115)$$

二つのベクトルの間の角度が定義できると, 直交や平行などの定義が直感的にわかりやすい. 例えば平行は $\cos \theta = \pm 1$ になる場合である. また, より重要なのは直交の概念である. 内積空間 V の二つのベクトル $|\mathbf{u}\rangle$ と $|\mathbf{v}\rangle$ の間に直交の概念を導入する.

ベクトルの直交

- 内積空間 V の二つのベクトル $|\mathbf{u}\rangle$ と $|\mathbf{v}\rangle$ が直交するとは $\langle \mathbf{u} | \mathbf{v} \rangle = 0$ を満たすことである. このとき $|\mathbf{u}\rangle \perp |\mathbf{v}\rangle$ と書く.

直交するベクトル

- C^2 のベクトル $|\mathbf{a}\rangle = [3, 4i]^t$ と $|\mathbf{b}\rangle = [4i, 3]^t$ を考えると

$$\langle \mathbf{a} | \mathbf{b} \rangle = [3, -4i] \begin{bmatrix} 4i \\ 3 \end{bmatrix} = 0 \quad (2.116)$$

であるから $|\mathbf{a}\rangle \perp |\mathbf{b}\rangle$ である.

直交するベクトルの組に対し, 以下の定理が成り立つ.

直交するベクトルと線型独立性

- 次元 N の内積空間 V を考え, 自然数 $i (1 \leq i \leq N)$ に対し $|\mathbf{v}_i\rangle (\neq 0) \in V$ とする. $|\mathbf{v}_1\rangle, |\mathbf{v}_2\rangle, \dots, |\mathbf{v}_r\rangle$ が互いに直交する時, これらは線型独立である.

証明はコメントを残し省略する. コメントは以下の通り: まず $|\mathbf{v}_i\rangle \neq 0$ より $\langle \mathbf{v}_i | \mathbf{v}_i \rangle > 0$ である. ここで $\sum_{j=1}^r c_j |\mathbf{v}_j\rangle = 0$ と線型関係を表し, $\langle \mathbf{v}_i |$ との内積を取る. すると直交性から同じインデックス以外の内積は 0 になり, $c_i \langle \mathbf{v}_i | \mathbf{v}_i \rangle = 0$ を得る. $\langle \mathbf{v}_i | \mathbf{v}_i \rangle > 0$ であるから $c_i = 0$ になる. 以上を繰り返せば $\sum_{i=1}^r c_i |\mathbf{v}_i\rangle = 0$ の線型関係を表す c_i は自明な線型関係しかないことがわかる.

問題

- 上の定理を証明せよ.

内積の概念を用いて、少し変わり種の固有値問題を解いてみよう. 固有状態をパラメータを含む形で与えたときに、固有値がそのパラメータに関してどんな関数形を満たさねばならないかを調べる問題である.

一次元原子鎖の固有値問題

- 次のような行列の固有値問題を考えよう.

$$H = \varepsilon_0 \sum_{j=1}^N |j\rangle \langle j| - V_0 \sum_{j=1}^N (|j+1\rangle \langle j| + |j\rangle \langle j+1|). \quad (2.117)$$

ここで ε_0, V_0 は実数, N を自然数として $j = 1, 2, \dots, N$ である. 今は $N \gg 1$ とする. $|j\rangle$ は大きさが 1 で互いに直交する基底ベクトルである. つまり

$$\langle i|j\rangle = \delta_{ij} \quad (2.118)$$

を満たす. ここで δ_{ij} はクロネッカーデルタであり, $i = j$ の時 1, $i \neq j$ の時 0 になる.

さて, 実際に問題を解く前にこの行列 H がどのような物理を表しているか簡単に解説しよう (量子力学の初心者は以下の解説はわからないはずなので一見して飛ばして良い).

まず H はハミルトニアンと呼ばれる行列であり, その固有値は系のエネルギーを表す. ハミルトニアンは系のモデルそのものであり, どのような物理的実態を考えているかを直接反映する. ここでは一次元上に原子が並んでいる様子を記述している. $|j\rangle$ は j 番目の原子の原子核に強く束縛された電子の状態を表す. ε_0 はオンサイトエネルギーと言い, 今の場合は原子が孤立して存在する時のエネルギー準位を表す. 今は原子が一次元上に並んでおり, 一つ隣の原子へ飛び移ることができると仮定している. 電子が飛び移るとエネルギーが下がりが安定化すると仮定しているのが $V_0 > 0$ の場合である. これは s 軌道の原子核を考える場合は良い近似になっている. このハミルトニアン——モデル——は電子が一次元に並んだ原子の上をホッピングしながら移動して

いく様子を表現している．このモデルは“強く束縛された近似 (Tight Binding model)”と呼ばれ，物質中の電子状態を計算する時によく用いられるモデルである．詳しくは固体物理学や物性物理学の教科書を参照してほしい．

ここから実際に固有値問題を解いてみよう．天下りではあるが筆者は次のようなベクトル $|k\rangle$ を考えると便利であることを知っているので， $|k\rangle$ を次のように定義して導入する．この辺りは慣れの問題なので自力で思い浮かぶかどうかは問題にしないで良い．

$$|k\rangle = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{j=1}^N e^{ikaj} |j\rangle. \quad (2.119)$$

ここで ka はパラメータであり， i は虚数単位である．ベクトル $|k\rangle$ は重み e^{ikaj} をつけたベクトル $|j\rangle$ の線型結合である． $\frac{1}{\sqrt{N}}$ は $|k\rangle$ が規格化されるように選んだ．

この $|k\rangle$ が行列 H の固有状態になる時，パラメータ ka が満たす条件を考えよう．固有方程式を

$$H |k\rangle = E |k\rangle \quad (2.120)$$

とする．

左辺を計算すると

$$\begin{aligned} H |k\rangle &= \left[\varepsilon_0 \sum_{i=1}^N |i\rangle \langle i| - V_0 \sum_{i=1}^N (|i+1\rangle \langle i| + |i\rangle \langle i+1|) \right] \left(\frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{j=1}^N e^{ikaj} |j\rangle \right), \\ &= \frac{1}{\sqrt{N}} \left[\varepsilon_0 \sum_{i,j}^N e^{ikaj} \langle i|j\rangle - V_0 \sum_{i,j}^N e^{ikaj} (|i+1\rangle \langle i|j\rangle + |i\rangle \langle i+1|j\rangle) \right], \\ &= [\varepsilon_0 - V_0 (e^{ikaj} + e^{-ikaj})] \left(\frac{1}{\sqrt{N}} \sum_j^N e^{ikaj} |j\rangle \right), \\ &= [\varepsilon_0 - 2V_0 \cos ka] |k\rangle \end{aligned} \quad (2.121)$$

である．したがって $E = \varepsilon_0 - 2V_0 \cos ka$ とすると $|k\rangle$ が H の固有状態となる．ただし固有値はパラメータ ka が $E = \varepsilon_0 - 2V_0 \cos ka$ を満たすもののみに限られる．

問題

- 上の例における $|k\rangle$ が規格化されていることを確かめよ．すなわち $\langle k|k\rangle = 1$ であることを示せ．

一般に基底を取った時に、これらが直交していたり大きさが1になっている保証はない．この例で見たように、基底の大きさが1、かつ互いに直交していると計算が著しく簡単になる．このような基底を作れるのか、また作れるとしたら具体的にどのような操作を行えば良いかが次のモチベーションになる．

2.8 正規直交基底

2.8.1 グラム・シュミットの直交化法

基底の数はベクトル空間ごとに決まっているが、基底ベクトルの大きさや角度 θ に特に制限はない．例えば次のようなベクトルも基底になりうる：

直交しない基底

- 次のような \mathbf{R}^3 のベクトルを考えよう：

$$|\mathbf{a}\rangle = \begin{bmatrix} 1 \\ 2 \\ 0 \end{bmatrix}, \quad |\mathbf{b}\rangle = \begin{bmatrix} 1 \\ -2 \\ 0 \end{bmatrix}, \quad |\mathbf{c}\rangle = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{bmatrix}. \quad (2.122)$$

$|\mathbf{a}\rangle, |\mathbf{b}\rangle, |\mathbf{c}\rangle$ は互いに線型独立であるから \mathbf{R}^3 の基底になる．しかし $\langle \mathbf{a}|\mathbf{b}\rangle = -3 \neq 0$ より $|\mathbf{a}\rangle$ と $|\mathbf{b}\rangle$ は直交していない．また、これらの大きさはともに $\sqrt{5}$ で大きさが1でもない．

しかし議論を進めていくにあたりこのような基底の取り方は便利でない．便利な基底として例えばノルムが1で互いに直交する基底を選ぶと便利である．このような基底を正規直交基底という．正規というのは大きさ（ノルム）が1であるということだ．

正規直交基底

- $\langle \mathbf{a}_i|\mathbf{b}_j\rangle = \delta_{ij}$ を満たすベクトル空間 V の基底を正規直交基底という．

具体的には例えば次のようなベクトルの組が正規直交基底である．

直交するノルムが 1 の基底

- 標準基底 $|e_1\rangle, |e_2\rangle, \dots, |e_n\rangle$ を考えると, これらは互いに直交しておりノルムも 1 である.
- 次のような \mathbf{R}^3 のベクトルを考えよう:

$$|u\rangle = \frac{1}{\sqrt{5}} \begin{bmatrix} 1 \\ 2 \\ 0 \end{bmatrix}, \quad |v\rangle = \frac{1}{\sqrt{5}} \begin{bmatrix} -2 \\ 1 \\ 0 \end{bmatrix}, \quad |w\rangle = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{bmatrix}. \quad (2.123)$$

$|u\rangle, |v\rangle, |w\rangle$ は互いに線型独立であるから \mathbf{R}^3 の基底になる.

また $\langle u|v\rangle = \langle v|w\rangle = \langle w|u\rangle = 0$ よりこれらは互いに直交している.
さらにこれらのノルムは全て 1 である.

例からわかるように同じベクトル空間 (上の例では \mathbf{R}^3) でも正規直交基底の取り方は一意的でない. しかし以下に述べるように, 有限次元の内積空間は必ず正規直交基底を持つ. その具体的な構成方法をグラムシュミットの直交法と呼ぶ. この定理の証明はそのまま正規直交基底の取り方を示しているため, 証明まで含めて記す.

グラム・シュミットの直交化法

- C 上の有限次元ベクトル空間 V の一組の基底を $\{|v_1\rangle, |v_2\rangle, \dots, |v_n\rangle\}$ とする. この時正規直交基底 $\{|u_1\rangle, |u_2\rangle, \dots, |u_n\rangle\}$ で,

$$\langle |u_1\rangle, |u_2\rangle, \dots, |u_m\rangle \rangle_C = \langle |v_1\rangle, |v_2\rangle, \dots, |v_m\rangle \rangle_C \quad (2.124)$$

となる $\langle |u_1\rangle, |u_2\rangle, \dots, |u_m\rangle \rangle_C$ が存在する. ここで $\langle |u_1\rangle, |u_2\rangle, \dots, |u_m\rangle \rangle_C$ は $\{|u_1\rangle, |u_2\rangle, \dots, |u_m\rangle\}$ で生成される部分空間である.

証明は以下の通り: 実際にそのようなベクトルを構成してみせる.

まず勝手に $|v_1\rangle$ をとる. この時

$$|u_1\rangle = \frac{1}{\|v_1\|} |v_1\rangle \quad (2.125)$$

とすると $\|u_1\| = 1$ である.

次にやはり勝手な $|v_2\rangle$ に対し

$$|v'_2\rangle = |v_2\rangle - \langle v_2|u_1\rangle |u_1\rangle \quad (2.126)$$

とする. この $|\mathbf{v}'_2\rangle$ に対し

$$|\mathbf{u}_2\rangle = \frac{1}{\|\mathbf{v}'_2\|} |\mathbf{v}'_2\rangle \quad (2.127)$$

とすると明らかに $\langle \mathbf{u}_2 | \mathbf{u}_2 \rangle = 1$ である. また

$$\begin{aligned} \langle \mathbf{u}_1 | \mathbf{u}_2 \rangle &= \frac{1}{\|\mathbf{v}_1\| \|\mathbf{v}_2\|} (\langle \mathbf{v}_1 | \mathbf{v}_2 \rangle - \langle \mathbf{v}_2 | \mathbf{u}_1 \rangle \langle \mathbf{v}_1 | \mathbf{u}_1 \rangle), \\ &= \frac{1}{\|\mathbf{v}_1\| \|\mathbf{v}_2\|} \left(\langle \mathbf{v}_1 | \mathbf{v}_2 \rangle - \frac{1}{\|\mathbf{v}_1\| \|\mathbf{v}_1\|} \langle \mathbf{v}_2 | \mathbf{v}_1 \rangle \langle \mathbf{v}_1 | \mathbf{v}_1 \rangle \right), \\ &= 0 \end{aligned} \quad (2.128)$$

以下これを繰り返せば良い. すなわち $|\mathbf{u}_1\rangle, |\mathbf{u}_2\rangle, \dots, |\mathbf{u}_r\rangle$ が求まった時,

$$\begin{aligned} |\mathbf{v}'_{r+1}\rangle &= |\mathbf{v}_{r+1}\rangle - \sum_{i=1}^r \langle \mathbf{v}_{r+1} | \mathbf{u}_i \rangle |\mathbf{u}_i\rangle, \\ |\mathbf{u}_{r+1}\rangle &= \frac{1}{\|\mathbf{v}'_{r+1}\|} |\mathbf{v}'_{r+1}\rangle \end{aligned} \quad (2.129)$$

とすると

$$\langle \mathbf{u}_i | \mathbf{u}_j \rangle = \delta_{ij} \quad (2.130)$$

を満たす. これを必要な数だけ続けて求める正規直交基底を得る.

グラム・シュミットの直交化法

- 次のような \mathbf{R}^3 のベクトルを考えよう :

$$|\mathbf{v}_1\rangle = \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \end{bmatrix}, \quad |\mathbf{v}_2\rangle = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ 1 \end{bmatrix}, \quad |\mathbf{v}_3\rangle = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}. \quad (2.131)$$

ここから正規直交基底を作る. まず

$$|\mathbf{u}_1\rangle = |\mathbf{v}_3\rangle = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} \quad (2.132)$$

とする．次に

$$\begin{aligned}
 |v'_2\rangle &= |v_2\rangle - \langle v_2|u_1\rangle |u_1\rangle, \\
 &= \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ 1 \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}, \\
 &= \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{bmatrix}.
 \end{aligned} \tag{2.133}$$

とし，ここから所望の $|u_2\rangle$ を正規化し

$$|u_2\rangle = \frac{1}{||v'_2\rangle} |v'_2\rangle \tag{2.134}$$

とする．ここでは既に正規化がなされていたので特別な計算をする必要がなかった．最後に

$$\begin{aligned}
 |v'_3\rangle &= |v_3\rangle - \langle v_3|u_1\rangle |u_1\rangle - \langle v_3|u_2\rangle |u_2\rangle, \\
 &= \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{bmatrix}, \\
 &= \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{bmatrix}.
 \end{aligned} \tag{2.135}$$

とし，これから所望の $|u_3\rangle$ を正規化し

$$|u_3\rangle = \frac{1}{||v'_3\rangle} |v'_3\rangle \tag{2.136}$$

とする．ここでは既に正規化がなされていたので特別な計算をする必要がなかった．

以上により正規直交基底 $\{|u_1\rangle, |u_2\rangle, |u_3\rangle\}$ が得られた．

問題

- 上の例において $|u_1\rangle = |v_1\rangle$ と選びグラムシュミットの直交化法を実行せよ．上の例とは違う正規直交基底が得られる．

上の例と問題からわかるように、グラム・シュミットの直交化法は最初のベクトル ($|\mathbf{u}_1\rangle$ のこと) の選び方によって得られる正規直交基底の成分が異なる。なるべく簡単になるように最初のベクトルを選ぶと良い。

2.8.2 直和と直交補空間

これまでベクトル同士の直交を考えたが、ここではベクトルの集合同士の直交を考える。つまりあるベクトル空間 V があったときに部分空間 W と、 W に属するベクトルに直交するベクトル全てを集めた部分空間 W^\perp を考えたい。このような部分空間はあるベクトルに注目した時の正規直交基底の“相方”が属するベクトル空間になる。この“相方”を考えると、 V の任意のベクトルが W と W^\perp のベクトルの和で一意的に表せる。直感的には V のベクトルをなるべく W に似たベクトルで表し、 W ではどうしても表せない成分を W^\perp のベクトルで表そうということだ。この“なるべく W に似たベクトル”というのは、つまり V のベクトルが W のベクトルの成分をどれだけ持っているかということであって、図形的には W 上に映る影の長さということになる。このようなアイデアをより数学的に表現しよう。まず準備として、ベクトル空間 V があったときに、 V を部分空間 W_i の和で書き尽くすことができるという概念について定式化しよう。

和空間と直和

- V をベクトル空間、 W_i をその部分空間としその元を $|\mathbf{w}_i\rangle$ とした時、

$$\sum_i W_i = \{|\mathbf{x}\rangle \mid |\mathbf{x}\rangle = \sum_i |\mathbf{w}_i\rangle\} \quad (2.137)$$

を W_i の和空間という。

- W_1, W_2 を部分空間としその和空間を $W = W_1 + W_2 + \dots + W_n$ とする。

W の任意の元 $|\mathbf{w}\rangle$ を $|\mathbf{w}\rangle = \sum_i |\mathbf{w}_i\rangle$ と表した時、この表し方が一意的であれば W は W_i の直和であるといい、

$$W = W_1 \oplus W_2 \oplus \dots \oplus W_n \quad (2.138)$$

と表す。また、この分解を直和分解という。

- 上の主張は次の主張と同値である；

$$W_i \cap W_1 + W_2 + \dots + W_{i-1} + W_{i+1} + \dots + W_n = \{\mathbf{0}\} \quad (2.139)$$

直和の例

- \mathbf{R}^3 のベクトル空間 V を考えよう.

$$V = \left\{ \begin{bmatrix} x \\ y \\ z \end{bmatrix} \mid x, y, z \in \mathbf{R} \right\} \quad (2.140)$$

さらに次のような \mathbf{R}^3 のベクトル空間 W_1, W_2 を考えよう.

$$W_1 = \left\{ \begin{bmatrix} x \\ y \\ 0 \end{bmatrix} \mid x, y \in \mathbf{R} \right\}, \quad W_2 = \left\{ \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ z \end{bmatrix} \mid z \in \mathbf{R} \right\}. \quad (2.141)$$

この時

$$V = W_1 \oplus W_2 \quad (2.142)$$

である.

問題

- $W = W_1 \oplus W_2 \oplus \dots \oplus W_n$ と $W_i \cap W_1 + W_2 + \dots + W_{i-1} + W_{i+1} + \dots + W_n = \{\mathbf{0}\}$ が同値であることを確かめよ.

次に直交補空間を考える. この直交補空間とそこから導かれる射影演算子の概念は本書の線型代数学の最終目的であるスペクトル分解を理解する上で重要になる. この節の最初に述べた“相方”の部分空間の定義である.

直交補空間

- V を内積空間, W をその部分空間とした時,

$$W^\perp = \{|\mathbf{u}\rangle \mid \langle \mathbf{u} | \mathbf{v} \rangle = 0, \text{ for all } |\mathbf{v}\rangle \in W\} \quad (2.143)$$

を W の直交補空間であるという.

- W^\perp は V の部分空間である.

問題

- W^\perp が V の部分空間であることを確かめよ．部分空間の定義を満たすことを一つずつ確認すれば良い．

そして以下の定理は重要．

直交補空間と直和

- V を内積空間， W をその部分空間， W^\perp を W の直交補空間とするとき

$$V = W \oplus W^\perp. \quad (2.144)$$

証明はコメントを残し省略する： $\{|w_1\rangle, |w_2\rangle, \dots, |w_n\rangle\}$ を W の正規直交基底とする．ここで V の元 $|v\rangle$ を勝手に取ってきて

$$|w\rangle = \sum_{i=1}^n \langle v|w_i\rangle |w_i\rangle, \quad (2.145)$$

$$|w^\perp\rangle = |v\rangle - |w\rangle$$

とすると任意の i について $\langle w^\perp|w_i\rangle = 0$ である． $\{|w_1\rangle, |w_2\rangle, \dots, |w_n\rangle\}$ は W の正規直交基底だから $|w^\perp\rangle \in W^\perp$ がわかる．すなわち $V = W + W^\perp$ である．また $|v\rangle \in W \cap W^\perp$ とすると， $\langle v|v\rangle = 0$ であるから $V = W \oplus W^\perp$ である．

問題

- 上の定理を証明せよ．

この定理の主張は，任意のベクトルはある部分空間のベクトルとその直交補空間のベクトルの和で一意的に表せるということである（一意性は直和の定義から直ちに言える）．上のコメントのノーテーション（記法）を使えば

$$|v\rangle = |w\rangle + |w^\perp\rangle \quad (2.146)$$

と表した時 $|w\rangle$ に対し $|w^\perp\rangle$ は一対一で決まる．ここである写像 P_W を

$$P_W |v\rangle = P_W (|w\rangle + |w^\perp\rangle) \rightarrow |w\rangle \quad (2.147)$$

とすると， P_W は線型写像である．この P_W は任意のベクトルを部分空間 W 内に落とし込む写像であり，射影演算子という．射影演算子は任意のベクトルの“特定の方

向”への成分を抜き出すものである。では、その“特定の方向”を全て集めてきたら元々のベクトルの戻るのでないか、というアイディアが自己共役演算子とスペクトル分解へつながっていく。

2.9 自己共役演算子とスペクトル分解

2.9.1 演算子のベクトルへの作用

本節では行列のことを演算子と呼ぶ。この二つは同じものだと思って良い。今、適当な演算子 A をベクトル $|u\rangle$ に作用させたベクトルを

$$A|u\rangle \quad (2.148)$$

と書く。このベクトルに $\langle v|$ を作用させた量を

$$\langle v|A|u\rangle \quad (2.149)$$

と表すことにしよう。しかし以上の説明を忘れてしまいただ単に上式を眺めた時、演算子 A が $|u\rangle$ に作用しているのか $\langle v|$ に作用しているのか判断がつかない。そこで演算子が作用するベクトルを明示するために

$$A|u\rangle = |Au\rangle \quad (2.150)$$

とも書くことにする。

次に $|Au\rangle$ のブラベクトルを考えてみよう。表記の上ではブラベクトルはケットベクトルの複素共役を取り転置したベクトルであるから

$$|Au\rangle \rightarrow \langle Au| \quad (2.151)$$

と表記する。この時演算子 A を括弧の外に出す表記ではどうなるかという、演算子自身も複素共役を取って転置したものになっているので

$$\langle Au| = \langle u|(A^*)^t = \langle u|A^\dagger \quad (2.152)$$

と表す。ここで

$$A^\dagger \equiv (A^*)^t \quad (2.153)$$

を A の随伴という。物理の文献ではこれをエルミート共役ともいう。

随伴の例

- 次のような行列 A, B を考える.

$$A = \begin{bmatrix} -i & 2 \\ 3-i & 4 \end{bmatrix}, \quad B = \begin{bmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{bmatrix}. \quad (2.154)$$

この時

$$A^\dagger = \begin{bmatrix} i & 3+i \\ 2 & 4 \end{bmatrix}, \quad B^\dagger = \begin{bmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{bmatrix} \quad (2.155)$$

である. この例からわかるように, 一般に $A^\dagger \neq A$ であるが, 中には $A^\dagger = A$ となる演算子も存在する. また B は

$$B^\dagger B = \begin{bmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}. \quad (2.156)$$

であるから, $B^\dagger = B^{-1}$ である. このような行列も特殊だが重要な例になる.

問題

- n 次複素正方行列 A_1, A_2 に対し,

$$(A_1 A_2)^\dagger = A_2^\dagger A_1^\dagger \quad (2.157)$$

であることを示せ.

- n 次複素正方行列 A_1, A_2 に対し,

$$\langle A_1 \mathbf{a} | A_2 \mathbf{b} \rangle = \langle \mathbf{a} | A_1^\dagger A_2 | \mathbf{b} \rangle = \langle A_2^\dagger A_1 \mathbf{a} | \mathbf{b} \rangle \quad (2.158)$$

であることを示せ.

数学では $A^\dagger A = A A^\dagger$ を満たす演算子を正規演算子という. 量子力学では正規演算子が重要な役割を果たすが, その一般論を紙幅に制限がある本書中で十分に説明することは難しい*9. そこでこの中でもさらに量子力学へ向けて重要なユニタリ演算子と自己共役演算子について解説する.

*9 この点, 講義などであれば柔軟にカリキュラムを変更できるが成書になるとそうはいかない. 今後改訂版を書く機会があれば, 行列の対角化と合わせこの部分を重点的に加筆する予定である.

2.9.2 ユニタリ演算子

まずユニタリ演算子について述べる.

ユニタリ演算子

- n 次複素正方行列 U が

$$U^\dagger U = I_n \quad (2.159)$$

を満たすとき, U をユニタリ行列とかユニタリ演算子と呼ぶ.

- 複素内積空間上の線型変換 U がベクトル $|\mathbf{u}\rangle, |\mathbf{v}\rangle$ に対し

$$\langle U\mathbf{u}|U\mathbf{v}\rangle = \langle \mathbf{u}|\mathbf{v}\rangle \quad (2.160)$$

を満たすとき, U をユニタリ変換と呼ぶ. ユニタリ変換は内積の値を一定に保つ変換である.

n 次複素正方行列 U に対応する線型変換を F_U とすると, F_U がユニタリ変換ならば U はユニタリ行列である. ユニタリ行列についても簡単な例を見てみた後, ユニタリ変換で内積を保存することを確認しよう.

ユニタリ演算子の例

- 二次元複素正方行列

$$U = \begin{bmatrix} \cos \theta & i \sin \theta \\ i \sin \theta & \cos \theta \end{bmatrix} \quad (2.161)$$

を考えると

$$U^\dagger = \begin{bmatrix} \cos \theta & -i \sin \theta \\ -i \sin \theta & \cos \theta \end{bmatrix} \quad (2.162)$$

であり,

$$U^\dagger U = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} \quad (2.163)$$

を満たすから U はユニタリ行列である.

ユニタリ演算子による内積の保存

- 先の例題で扱った二次元複素正方行列で $\theta = \frac{\pi}{2}$ の時である

$$U_{\frac{\pi}{2}} = \begin{bmatrix} 0 & i \\ i & 0 \end{bmatrix} \quad (2.164)$$

を考える．ここで

$$|\mathbf{a}\rangle = \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \end{bmatrix}, \quad |\mathbf{b}\rangle = \begin{bmatrix} 2 \\ -1 \end{bmatrix} \quad (2.165)$$

を考えよう．まず

$$\langle \mathbf{a} | \mathbf{b} \rangle = 1 \quad (2.166)$$

である．また，

$$U_{\frac{\pi}{2}} |\mathbf{a}\rangle = \begin{bmatrix} i \\ i \end{bmatrix}, \quad U_{\frac{\pi}{2}} |\mathbf{b}\rangle = \begin{bmatrix} -i \\ 2i \end{bmatrix} \quad (2.167)$$

であるから

$$\langle U_{\frac{\pi}{2}} \mathbf{a} | U_{\frac{\pi}{2}} \mathbf{b} \rangle = [-i, -i] \begin{bmatrix} -i \\ 2i \end{bmatrix} = 1 = \langle \mathbf{a} | \mathbf{b} \rangle. \quad (2.168)$$

ユニタリ変換による内積の保存は定義であるが，一般に

$$\langle U \mathbf{a} | U \mathbf{b} \rangle = \langle \mathbf{a} | U^\dagger U | \mathbf{b} \rangle = \langle \mathbf{a} | \mathbf{b} \rangle. \quad (2.169)$$

としても確認できる．ユニタリ変換は内積を保存する変換ということを強調した．内積が扱いやすい基底といえば正規直交基底である．実はユニタリ演算子は正規直交基底と深い関係がある．

ユニタリ演算子と正規直交基底

- ユニタリ行列の各列ベクトル（転置すれば直ちに行ベクトルについても成り立つ）は正規直交基底である．逆に正規直交基底を並べた行列はユニタリ行列になる．

証明は以下の通り：

ユニタリ行列 U を, 列ベクトル $|\mathbf{u}_1\rangle, \dots, |\mathbf{u}_n\rangle$ を並べた形

$$U = [|\mathbf{u}_1\rangle, \dots, |\mathbf{u}_n\rangle] \quad (2.170)$$

で表示する. この随伴は

$$U^\dagger = \begin{bmatrix} \langle \mathbf{u}_1 | \\ \vdots \\ \langle \mathbf{u}_n | \end{bmatrix} \quad (2.171)$$

である. ここで

$$U^\dagger U = \begin{bmatrix} \langle \mathbf{u}_1 | \mathbf{u}_1 \rangle & \dots & \langle \mathbf{u}_1 | \mathbf{u}_n \rangle \\ \langle \mathbf{u}_2 | \mathbf{u}_1 \rangle & \dots & \langle \mathbf{u}_2 | \mathbf{u}_n \rangle \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \langle \mathbf{u}_n | \mathbf{u}_1 \rangle & \dots & \langle \mathbf{u}_n | \mathbf{u}_n \rangle \end{bmatrix} = I \quad (2.172)$$

である. 最後の等式は U がユニタリ行列であるという仮定から成り立つ. ここから

$$\langle \mathbf{u}_i | \mathbf{u}_j \rangle = \delta_{ij} \quad (2.173)$$

である必要がある. 逆に $\langle \mathbf{u}_i | \mathbf{u}_j \rangle = \delta_{ij}$ ならば $U^\dagger U = I$ が導かれるので U はユニタリ行列である.

2.9.3 自己共役演算子

次に自己共役演算子について述べる.

自己共役演算子

- n 次複素正方行列 H が

$$H^\dagger = H \quad (2.174)$$

を満たすとき, H を自己共役行列とか自己共役演算子と呼ぶ. 物理の文献では自己共役演算子をエルミート演算子と呼ぶこともある.

- 複素内積空間上の線型変換 H が

$$\langle \phi | H | \psi \rangle = \langle \phi | H \psi \rangle = \langle H \phi | \psi \rangle \quad (2.175)$$

を満たす時, この変換を自己共役変換とか自己随伴変換と呼ぶ.

n 次複素正方行列 H に対応する線型変換を F_H とすると, F_U が自己共役変換ならば H は自己共役演算子である. 物理の文献では自己共役演算子をエルミート演算子と呼ぶこともあると述べたが, これについて少し補足をしておく. 自己共役演算子とエルミート演算子は厳密に言えば同じものではない. 例えば非有界演算子^{*10}に関するエルミート演算子と自己共役演算子は厳密には異なり, 固有ベクトル (固有関数) の完全性などに違いが出る. ただし本書では非有界演算子の理論は扱わないので, 自己共役演算子とエルミート演算子の違いはない^{*11}. 本書では量子力学の章でも一貫して自己共役演算子と表記するが, 強いこだわりがあるわけではない.

自己共役演算子の例

- 二次元複素正方行列

$$H = \begin{bmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{bmatrix} \quad (2.176)$$

を考えると

$$H^\dagger = \begin{bmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{bmatrix} \quad (2.177)$$

であるから H は自己共役行列である.

- γ, k_x, k_y を実数のパラメータとして二次元複素正方行列

$$H = \gamma \begin{bmatrix} 0 & k_x - ik_y \\ k_x + ik_y & 0 \end{bmatrix} \quad (2.178)$$

は自己共役.

^{*10} たいへん荒っぽくいうと無限次元行列をイメージしてほしい. ただし本書では非有界演算子に関する微妙な議論は一切行わない.

^{*11} この点について雑談を一つ入れておく. つまらなそうなら無視してよい: 物理ではこれらの違いにこだわり厳密な定式化を学ぶより, これらの微妙な違いがあることはあまり気にしないで計算を進めることが多い. このような立場は数学に詳しい人から難色を示されることがしばしばある. しかし物理屋の立場としては数学的な厳密さよりもまず実験事実を説明できる理論を構築することを優先する. 確かに厳密に数学的な議論を展開できる能力は重要であり, その能力は近年ますます重要になってきているとも言える. しかし物理は自然科学である以上, 物理理論の正しさは理論が数学的に厳密であるかではなく, 実験結果を説明できるというただその一点によってのみその正しさが担保されることを忘れてはならない. したがって物理理論を志すものはまず物理現象を計算してみて実験結果と比較することを第一に考えるべきである. その修練を十分に積んだ後, 各々の興味に従い数学的に厳密な理論を展開すれば良い. 歴史的に大多数の物理学者は上記のような考え方を持っているようであり, 本書でもその立場をとる.

自己共役演算子については以下の定理が重要である。

自己共役演算子の固有値は実数

- 自己共役演算子の固有値は全て実数である。

証明は以下の通り：

自己共役演算子 H の固有方程式を

$$H|\psi\rangle = E|\psi\rangle \quad (2.179)$$

とする。両辺左側から $\langle\psi|$ を作用させると

$$\langle\psi|H|\psi\rangle = E\langle\psi|\psi\rangle \quad (2.180)$$

一方 $H|\psi\rangle = E|\psi\rangle$ の随伴をとると

$$\langle\psi|H^\dagger = E^*\langle\psi|. \quad (2.181)$$

両辺右側から $|\psi\rangle$ を作用させ

$$\langle\psi|H^\dagger|\psi\rangle = E^*\langle\psi|\psi\rangle. \quad (2.182)$$

一方 H は自己共役演算子なので $H = H^\dagger$ だから

$$\begin{aligned} E\langle\psi|\psi\rangle &= E^*\langle\psi|\psi\rangle, \\ (E - E^*)\langle\psi|\psi\rangle &= 0. \end{aligned} \quad (2.183)$$

ここで $|\psi\rangle$ は固有ベクトルだから定義より $|\langle\psi|\psi\rangle| \neq 0$ 。以上より $E = E^*$ だから E は実数である。

また、自己共役演算子の固有状態について次の定理が成り立つ。

自己共役演算子の固有ベクトル

- 自己共役演算子の相異なる固有値に属する固有ベクトルは直交する。

証明は以下の通り：

自己共役演算子 H の固有方程式を

$$\begin{aligned} H|\psi_1\rangle &= E_1|\psi_1\rangle, \\ H|\psi_2\rangle &= E_2|\psi_2\rangle \end{aligned} \quad (2.184)$$

とする。ただし $E_1 \neq E_2$ とする。上式に左側から $\langle \psi_2 |$ を作用させると

$$\langle \psi_2 | H | \psi_1 \rangle = E_1 \langle \psi_2 | \psi_1 \rangle \quad (2.185)$$

一方 H は自己共役演算子なので $\langle \psi_2 | H | \psi_1 \rangle = \langle H^\dagger \psi_2 | \psi_1 \rangle = \langle H \psi_2 | \psi_1 \rangle$ と変形しよう。さて、

$$\begin{aligned} \langle H \psi_2 | &= (H | \psi_2 \rangle)^\dagger, \\ &= (E_2 | \psi_2 \rangle)^\dagger, \\ &= E_2^* \langle \psi_2 |, \\ &= E_2 \langle \psi_2 |. \end{aligned} \quad (2.186)$$

である。自己共役演算子の固有値が実数になることを用いた。整理すると

$$\langle H \psi_2 | \psi_1 \rangle = E_2 \langle \psi_2 | \psi_1 \rangle. \quad (2.187)$$

これより

$$(E_1 - E_2) \langle \psi_2 | \psi_1 \rangle = 0 \quad (2.188)$$

である。最初の仮定 $E_1 \neq E_2$ から $\langle \psi_2 | \psi_1 \rangle = 0$ が導かれる。なお相異なる固有値に属する固有ベクトルは直交するが、同じ固有値に属する固有ベクトル——すなわち縮退している状態に関しては以上の議論が成り立たない。しかしこの場合もグラム・シュミットの直交化法を用いることで固有ベクトルを直交した形に選ぶことが可能である。

自己共役演算子の固有値問題

- 行列 σ_y の固有値と固有ベクトルは前に求めた。行列 σ_y は

$$\sigma_y = \begin{bmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{bmatrix} \quad (2.189)$$

であるから、 σ_y の固有ベクトルと固有値は

$$|\psi_{y\pm}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} 1 \\ \pm i \end{bmatrix} \quad a = \pm 1 \quad (2.190)$$

である。固有値は実数であり、固有ベクトルは直交している。

以上の定理の示す内容をまとめると、 n 次元正方行列で表現される自己共役演算子の固有ベクトル $|\psi\rangle$ を固有値が縮退している分まで含めて“漏れなく”集めてくれ

ば、それらは線型独立で n 次元複素内積空間を生成するから基底になるということを言っている．すなわちこのベクトル空間に属する任意のベクトル $|\Psi\rangle$ は次のように一意に展開が可能である．

$$|\Psi\rangle = \sum_{i,s} c_i^s |\psi_i^s\rangle \quad (2.191)$$

ここで i は相異なる固有値に属する固有ベクトルについて走り、 s は縮退があればその縮退したベクトルの分だけ走る．これを自己共役演算子の固有ベクトルは正規直交完全系をなす、という．ここで簡単のため縮退がないとしよう．この時係数 c_i は両辺左側から $\langle\psi_i|$ をかけて $\langle\psi_i|\psi_j\rangle = \delta_{ij}$ を用いると

$$c_i = \langle\psi_i|\Psi\rangle \quad (2.192)$$

で表される．これを元の式に代入し直して

$$\begin{aligned} |\Psi\rangle &= \sum_i \langle\psi_i|\Psi\rangle |\psi_i\rangle, \\ &= \sum_i |\psi_i\rangle \langle\psi_i|\Psi\rangle, \\ &= \left(\sum_i |\psi_i\rangle \langle\psi_i| \right) |\Psi\rangle. \end{aligned} \quad (2.193)$$

ここで $|\Psi\rangle$ は任意だから

$$\sum_i |\psi_i\rangle \langle\psi_i| = I. \quad (2.194)$$

を得る．この式は量子力学に関する数理論で最も重要な式であると言ってもよい．単に完全性といった場合は自己共役演算子の固有ベクトルに関して $\sum_i |\psi_i\rangle \langle\psi_i| = I$ が成り立つことを指す．縮退がある場合もちろん成り立ち、一般には次のような形で表される．

自己共役演算子の完全性関係式

- 自己共役演算子の固有ベクトルに対し

$$\sum_{i,s} |\psi_i^s\rangle \langle\psi_i^s| = I. \quad (2.195)$$

が成り立つ．

2.9.4 自己共役演算子のスペクトル分解

以下簡単のため縮退がない場合を考える．縮退がある場合への拡張は容易である．さて，完全性関係式の議論で

$$|\Psi\rangle = \sum_i c_i |\psi_i\rangle \quad (2.196)$$

から係数 c_i

$$c_i = \langle \psi_i | \Psi \rangle \quad (2.197)$$

を求めた議論について見直してみよう． c_i は一般のベクトル $|\Psi\rangle$ の中に $|\psi_i\rangle$ の成分がどれほど混合しているかを表していると考えれば， c_i を得る操作は， $|\Psi\rangle$ から $|\psi_i\rangle$ への射影成分を求める操作であると考えて良いだろう．この時何をしたかというところ，両辺左側から $\langle \psi_i |$ をかけたのだった．ここから

$$|\Psi\rangle = \sum_i |\psi_i\rangle \langle \psi_i | \Psi \rangle \quad (2.198)$$

を得たわけだが，右辺はベクトル $|\psi_i\rangle$ の定数 $\langle \psi_i | \Psi \rangle$ 倍と見ることができる．これを $|\psi_i\rangle \langle \psi_i |$ という演算子を作用させた結果であるとみなすと，この演算子は任意の状態から $|\psi_i\rangle$ 方向の成分を抜き出し，ベクトル $|\psi_i\rangle$ と並行な方向にベクトルを変換する演算子である．以上より，

射影演算子の表現

- ベクトル $|\varphi\rangle$ に対し

$$P_\varphi \equiv |\varphi\rangle \langle \varphi| \quad (2.199)$$

をベクトル $|\varphi\rangle$ 方向の射影演算子と呼ぶ．

- 射影演算子は以下の性質を満たす．

$$\begin{aligned} P_\varphi^2 &= P_\varphi, \\ \sum_\varphi P_\varphi &= 1. \end{aligned} \quad (2.200)$$

射影演算子を構成するベクトルは任意のベクトルで良いが，ここで自己共役演算子

の固有ベクトルを用いて射影演算子を構成しよう．自己共役演算子の固有方程式を

$$H |\psi_i\rangle = E_i |\psi_i\rangle \quad (2.201)$$

としよう．さらに射影演算子を

$$P_{\psi_i} = |\psi_i\rangle \langle \psi_i| \quad (2.202)$$

とする．自己共役演算子の固有方程式に右から $\langle \psi_i|$ をかけて i で和をとれば

$$\begin{aligned} H \left(\sum_i |\psi_i\rangle \langle \psi_i| \right) &= \sum_i E_i |\psi_i\rangle \langle \psi_i|, \\ H &= \sum_i E_i |\psi_i\rangle \langle \psi_i| \end{aligned} \quad (2.203)$$

を得る．ここで完全性関係式 $\sum_i |\psi_i\rangle \langle \psi_i| = I$ を用いた．このように左辺を自己共役演算子の固有値と固有ベクトルを用いた射影演算子で表現できた．これを自己共役演算子のスペクトル分解と呼ぶ^{*12}．また，スペクトル分解は射影演算子と直交補空間に感うる議論を援用すれば一意に決まることに注意しよう．

これで量子力学の初歩を学ぶための数学の整理は終えた．次回から量子力学の解説に移る．

^{*12} 自己共役演算子の固有ベクトルは完全性を持つので，自己共役演算子が作用する空間の全方向に対し射影を取ることができる．全ての方向と，その方向に対する影（正射影）を集めて復元したら元に戻るというイメージが湧く．もちろん数式に対するイメージなど各自で好きなように抱けば良いのでここでの説明はあくまで一例である．

第3章

量子力学

3.1 概論

この章からは本題である量子力学について述べる。量子力学に関して求める予備知識は前半で解説した線型代数学の知識である。

この節ではまず量子力学の性質が非常によく現れるシュテルン・ゲルラッハ実験と二重スリットの干渉実験について説明する。この二つの実験では古典論では説明が困難な結果が現れる。これらを合理的に説明できる理論として量子力学を導入するモチベーションとする。

その後、量子力学の原理について述べる。この説明は天下りのように感じる読者もいるかもしれないが、歴史的な順を追って混乱を迫体験するよりも一本筋が通った説明の方が量子力学を理解しやすいと考えている。量子力学には経路積分形式や代数形式など様々な形式があるが、本書では筆者が標準的で理解しやすいと考える演算子形式の量子力学を述べる^{*1}。

このような状況設定で、まず状態ベクトルと物理量演算子について説明する。この部分は線型代数学で解説した知識とほぼパラレルで理解できるはずである。より一般的・厳密に説明できる箇所は多々あるが、あえてそうせず、例を挙げて要請の示す内容を具体的に理解する方法を徹底した。ただし取り上げる具体例として多くの系を引き合いに出すことはせず、スピン $\frac{1}{2}$ （電子スピン）を繰り返し用いて説明する。量子力学の考え方を理解する上では格好の例題だが、この例題の内容ばかりが量子力学ではない。特に本書には標準的な量子力学の教科書では必ず解説されている波動力学

^{*1} 筆者の一番の好みは経路積分量子化である。非平衡系の場の理論と合わせこの形式を基礎から議論する解説を書きたいが、実現には無限時間が必要ないように感じられる。

(シュレーディンガーの微分方程式に基づく量子力学)の一切を割愛している。興味ある読者は巻末に掲載した参考文献リストを参考に進んだ量子力学の教科書で多くの具体例を学んでもものにしてほしい。

また、量子力学の法則としてはボルンの確率則，射影仮説，時間発展方程式を取り上げる*2。射影仮説はボルンの確率則に含まれるとする立場(より数学的な立場)もあるが本書ではその指し示す内容をはっきりと理解できるように別の法則として説明した。この辺りは量子力学の研究が進むにつれ書き変わっていくであろう。

3.2 シュテルン・ゲルラッハ実験

3.2.1 磁気モーメントの離散化

図 3.1 のような実験装置を用意する。

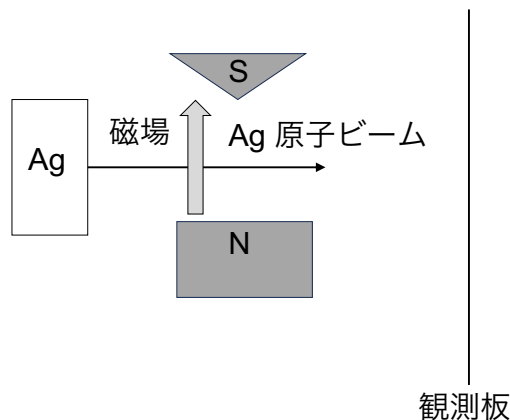


図 3.1 シュテルン・ゲルラッハの実験装置の概略図。加熱路から放出された銀原子のビームが磁場を印加した装置を通り抜けて観測板に衝突する。

加熱炉の中には銀原子が入っている。加熱された銀原子は加熱炉に開いた小さな穴

*2 解説の分量で言えば本書は時間発展の議論に重点を置いている。これは筆者の恩師と「通常の量子力学は時間に依存する場合の議論が少ないよね」とよく会話していたことに起因する。しかしそれでも記せた内容はかなり限定的かつ標準的であり、あくまで本書中の相対的な意気込みにすぎない。

から外にビームとして飛び出す。このビームの進路の途中に不均一な磁場を印加する装置があり、ビームとなった銀原子は装置が作る磁場を感じながら運動する。

加熱された銀原子は磁石の性質の源とも言える磁気モーメントという量を持つ。これを $\boldsymbol{\mu} = [\mu_x, \mu_y, \mu_z]$ で表す。また、実験装置中の磁場を $\boldsymbol{B} = [0, 0, B_z]$ とする。電磁気学の実験事実により磁気モーメントと磁場は相互作用し、銀原子は

$$F_z \simeq \mu_z \cdot \frac{\partial B_z}{\partial z} \quad (3.1)$$

という z 方向の力を感じて運動する。加熱炉内の銀原子はランダムな磁気モーメントの値を持つだろうから、銀原子一個一個が感じる磁場からの力はやはりランダムになる。そこで磁場装置の先に観測板を用意し、銀原子が観測板に衝突した位置を観測すれば、連続的な幅を持つ分布になると考えられる (図 3.2)。図では z 方向に垂直な面内の分布を誇張して幅広に描いたが、ビームを絞り注意深く実験を行うことでこの方向の分布はさらに細くすることができる。

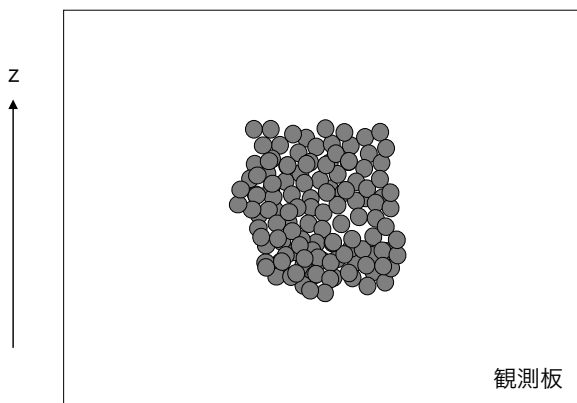


図 3.2 シュテルン・ゲルラッハ実験結果の予想。図中の丸の部分が銀原子ビームが観測板につけた跡である。古典論に従うと磁気モーメントも磁場の大きさも連続的なので、観測される銀原子の衝突位置も連続的に分布すると予想できる。

しかし観測された実験事実とは異なり、明確に“上下”に分かれた分布を示した (図 3.3)。

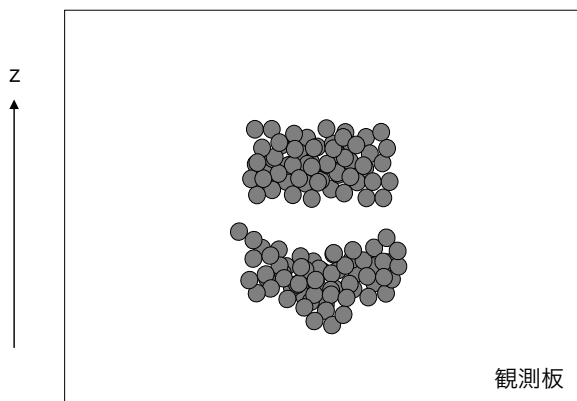


図 3.3 シュテルン・ゲルラッハ実験結果の概略図．銀原子が衝突した位置は明確に上下に分かれている．他の様々な実験結果から磁場は連続的な量であるとみなすことができるので，これは銀原子の持つ磁気モーメントの大きさが離散的であることを示唆する結果である．

これはランダムな大きさを持つと予想された磁気モーメントが二つにはっきり区別された大きさを持つと解釈できる．この結果は古典論では予想できない．連続的に分布していると思っていた物理量が実は離散的になっていたのである．このように連続的と思われていた物理量が離散的に区分されることを量子化と呼ぶ．また，それぞれに分かれた銀原子ビームの磁気モーメントを測定すると， $+z$ 方向に分かれたビームの磁気モーメントは $+\mu_z$ の値を持ち， $-z$ 向に分かれたビームの磁気モーメントは $-\mu_z$ の値を持つ．これは何度測定を行っても同じ結果が得られる．

3.2.2 観測による状態の変化

シュテルンゲルラッハ実験の結果は古典論にはそぐわないものであったが，一つの実験結果を解釈するには古典論の範囲で適当な変更をすれば説明ができてしまう可能性もある．

そこでさらに量子力学らしさを浮き立たせる実験を紹介しよう．シュテルン・ゲルラッハ実験装置による磁気モーメントの連続観測である．図 3.4 のような実験装置を考えよう．

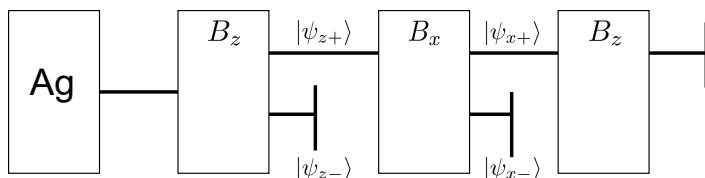


図 3.4 連続したシュテルン・ゲルラッハ実験結果の概略図. 最初に z 方向の磁場中を運動した銀原子ビームを分割し, その一方を今度は x 方向の磁場を印加した装置に通す. さらにそのビームの一部をもう一度 z 方向の磁場を印加した装置に通す.

前半は先ほどの実験と同じである. 加熱炉から飛び出した銀原子ビームが z 方向の磁場 B_z 中を運動する. 実験事実によれば, 銀原子はその磁気モーメントの向きにより上下に分かれる. これを $\pm z$ 方向に分かれたとしよう. 次に, $+z$ 方向に分かれた銀原子のみ (これを $|\psi_{z+}\rangle$ と表そう. $-z$ 方向に分かれた銀原子は $|\psi_{z-}\rangle$ である. 以下同様.) を, 今度は x 方向に磁場を印加した装置へと誘導する. すると観測結果はどうなるだろうか? 予想される通り, 今度は $\pm x$ 方向に分かれるのである. 先ほどの実験結果を受け入れればこの結論は予想されるであろう.

そしてさらに今度は $+x$ 方向に分かれた銀原子のみを, 再び z 方向に磁場を印加した装置へと誘導する. すると観測結果はどうなるであろうか? ヒントとしては, この銀原子は元々最初の磁場装置で $+z$ 方向に分かれた原子のみの集団である.

問題

- この後の文章を読み進める前に一旦立ち止まり, 実験結果を予測せよ. 予測が正しい必要は全くない.

当然もう一度 B_z 方向の磁場を印加すれば, その全ての銀原子は $+z$ 方向に分かれるに違いない. しかし結果はそうならなかったのである. 最初に $+z$ 方向に分かれた銀原子のみ考えているにもかかわらず, 再度 B_z を印加すると, 再び $\pm z$ 方向のビームに分かれたのである (図 3.5). この結果を古典力学の範囲で説明しようとするとう不合理な仮定や設定を導入しなければならない. 以上の結果を合理的に解釈するには, 古典的な考え方を捨て, 次のように解釈すれば良い: x 方向に印加した磁場によって

ビームを分けた時点で、それまでに持っていた $+z$ 方向に分かれたという銀原子の情報は失われる。しかし磁気モーメントの値が単にわからなくなったわけではない。この段階では磁気モーメントの値は $+x$ 方向か $-x$ 方向かは確定しているのである。それに関わらず、再び B_z の磁場を印加すると $+z$ 方向を向くか $-z$ 方向を向くかは元々の $+z$ 方向を向いていたという履歴によらないのである。

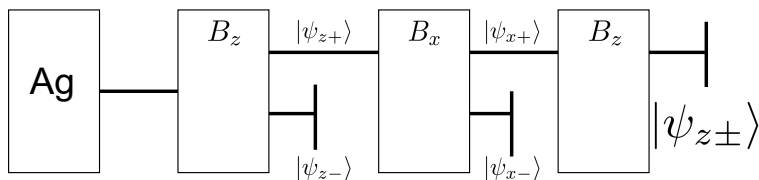


図 3.5 連続したシュテルン・ゲルラッハ実験結果。最初に $+z$ 方向に分かれたビームのみを対象にしているにも関わらず（これは最初の実験で $-z$ 方向に分かれたビームがあるから明確に $+z$ であったことがわかるのである）、 B_x を印加すると元々の $+z$ 方向に分かれていたという情報は失われ、最終的には再び $\pm z$ 方向にビームが分かれる。

この特徴を以下のように列挙しよう。

シュテルン・ゲルラッハ実験の結果

- 古典論では連続量だと思われていた物理量が飛び飛びの値（離散的）になっている。
- 磁場を印加した方向に分かれたビームは磁気モーメントの値が確定している。
- 最初は磁気モーメントの値が確定していたはずだが、それと異なる方向に磁場を印加すると元の確定していた磁気モーメントの値が失われてしまう。
- しかしこの状態は磁気モーメントの値が不明なのではない。何度測定を行なっても、磁気モーメントの値は印加した磁場の方向に量子化していることが確定している。

以上の考え方は古典論からするとなかなか受け入れ難いものである。しかしこの考

え方に基づいて導入された量子力学は、この実験について合理的な説明を与えるだけでなく、黒体輻射や水素原子が安定に存在できる理由など、様々な実験事実を説明した。

ここで強調するが、量子力学は数学的に厳密に整備されているから正しい理論なのでは決してない。量子力学は物理学の一分野であり、物理学は自然科学の一分野である。そして自然科学の正しさは実験によってのみ成否の判断がなされる。量子力学はこれまでに提示されたミクロなスケールの全ての実験結果をすべて矛盾なく説明できるから正しいと考えられているのだ。理論がいくら数学的に整備されていようがなかろうが^{*3}、理論の対象スケールの範囲内で実験結果を定性的・定量的に説明できる理論だけが正しいし、そうでないものは間違っている^{*4}。繰り返すが、物理理論の正しさは実験事実を説明できるかどうかで決まる。

3.3 二重スリットの干渉実験

もう一つ、量子力学の代表的な実験である二重スリットの実験を説明しよう。図 3.6 のように、電子銃で電子を $+x$ 方向に飛ばす。

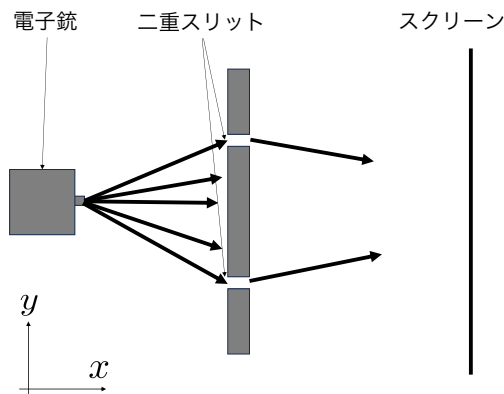


図 3.6 二重スリットの実験概略図。電子中から電子を打ち出し、細い二本のスリットを通り抜けた電子のみがその先にあるスクリーンに衝突し、跡を残す。

^{*3} しかし経験的に、正しい理論は数学的に美しく記述される。

^{*4} 対象スケールという前提が重要だ。例えば古典力学はミクロな世界の物理をうまく表現しないが、日常生活スケールの現象は十分正確に記述できる。このスケールでは“正しい”理論である。

電子の運動エネルギーは十分揃っているものとする。また、電子を打ち出す時間感覚は十分長くして、同時に二つ以上の電子が打ち出される状況は存在しないものとする。さて、電子が飛んだ先には細いスリットが2本空いたマスクがある。電子はスリット以外のところに飛ばなければマスクに当たって跳ね返されるが、運よくスリットの部分に飛んだ電子はマスクを通り抜けることができる。マスクの先には高感度のスクリーンがあり、スクリーンに電子が衝突すると輝点となり電子の位置がわかる。

電子銃を調整し、電子が確実に一個一個区別できるようにして電子を飛ばすことにしよう。さらに一個の電子を飛ばしてから次の電子を飛ばすのに十分な時間間隔を開け、電子が連続的にやってくることはないものとする。

このような設定のもと、スクリーンに映った輝点の様子を観測していこう。まず古典論で考えれば、電子銃から発射された電子は等速直線運動をすることに注意しよう。すると、スリットを通り抜ける時に多少衝突で方向が変わったとしても、図3.7のように電子銃とスリットを繋いだ位置に電子の輝点分布の重心がやってくると予想できる。

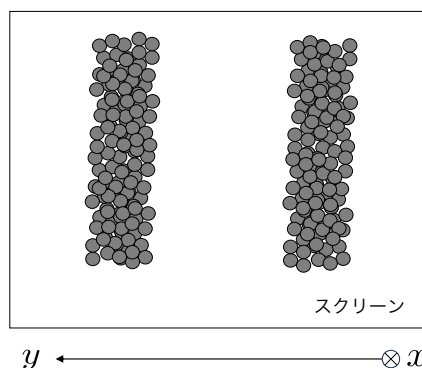


図 3.7 二重スリットの実験結果予想図。スリットを通り抜けた電子はその後何の力も受けなければ等速直線運動をするので、スクリーンに映る輝点は電子銃とスリットを結んだ直線上に重心を置いて分布すると考えられる。

しかし結果はそうならなかったのである。まず一瞬だけ輝点の分布を確認すると、図3.8のようにポツポツとした点が観測される。これは電子が粒子であることを表す結果である。ここまでは不思議なところはない。

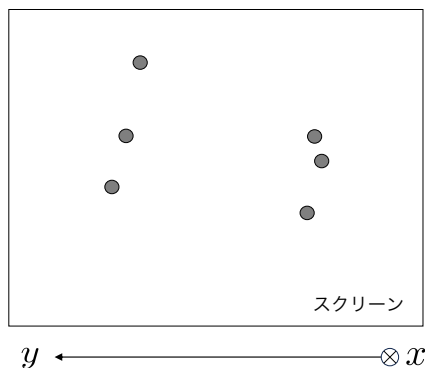


図 3.8 二重スリットの実験結果．実験時間が短い場合，電子の跡は一個一個明確に識別できる．これは電子が粒子であることの証左である．

しかし十分な時間電子を撃ち続けると，図 3.9 のように干渉縞が現れる．

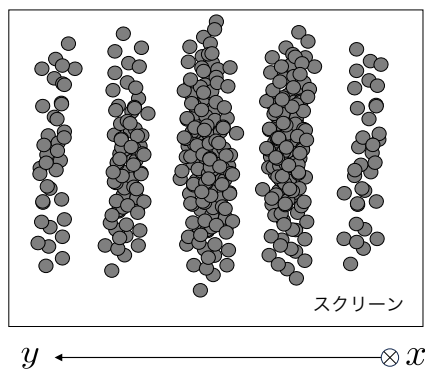


図 3.9 二重スリットの実験結果．実験時間が十分長い場合，スクリーンに残る電子の跡は干渉縞を見せる．この干渉縞は古典的にはヤングの実験で観測できるものとほぼ同じである．干渉は波の重ね合わせが原因なので，電子に波動性があると考えべきである．しかも二つの電子が同時に打ち出されることはないと設定しているので，この干渉は異なる電子との間で干渉が起こったのではない．すなわち電子一個一個が干渉性を持つと考えられる．

干渉縞が生じるということは、電子は波動性を持つことを意味する。また電子は一個一個が時間的にも空間的にも十分離れており、異なる電子間で干渉を起こしたとは考えられない。すると電子は、粒子であるという実験結果を（短時間の実験結果で）直接示しながらも、一個一個が波動性を持つと考えられる。さらに面白いことに、二個あったスリットの一個を塞いでしまうと、スクリーンに観測される電子分布は古典的な分布と同様に、電子銃と開いているスリットを繋いだ直線上に電子分布の重心がくる（図 3.7 の左右のどちらかの分布だけが生き残る）。これはシュテルン・ゲルラッハの実験と同様に、“途中でどのスリットを通ったかを確定させた”ため、元々持っていた干渉性が失われてしまったことを意味する。これは古典力学では考えられない結論であるが、しかし注意深く行われた再現性のある実験結果が得られている。古典論では説明できない現象であっても、量子力学ではこの実験結果を説明できるのである。いかにその説明の特徴を列挙しよう。

二重スリット実験の結果

- 量子力学では電子がスクリーンのどの位置に来るかという確率分布が予言できる。
- 一個一個の電子が次にどこにやってくるかを決定することはできない。
- 途中で通るスリットを確定させてしまった場合、干渉性は失われる。

電子一個一個が粒子性と波動性を併せ持つ性質は二重性（Duality）と呼ばれる。粒子性と波動性はそれぞれ実験によって確かめられており、現在は実際の半導体デバイスへも応用がされている。例えば図 3.10 のようにフラッシュメモリと呼ばれる半導体デバイスでは、コントロールゲート（CG）に電圧を印加させ高電場状況を作り出す。

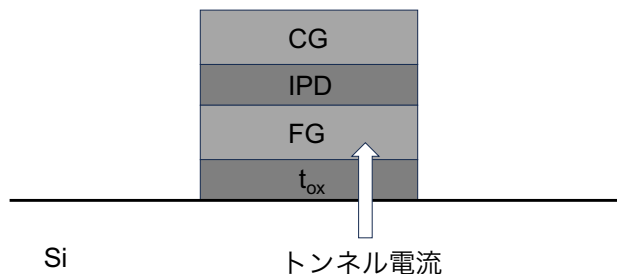


図 3.10 フラッシュメモリの概念図. P 型 Si 基盤の上にトンネル酸化膜 t_{ox} , フローティングゲート (FG), 酸化膜 (Inter-Poly-Dielectric : IPD), コントロールゲート (CG) を積層する. CG に電極をつけ電圧を印加すると Si 界面近傍に電子が蓄積し, ある電場の大きさを超えると電子がトンネル酸化膜をトンネルし FG に入り込む. FG に電子が入り込むと CG が Si に伝えられる電位の大きさが悪くなるから, 電子が流れにくい状態を作ることができる.

古典論ではゲート酸化膜が作るエネルギー障壁を電子が通り抜けることができないが, 電子が波動性を持っていることに起因し, 電子がゲート酸化膜 (t_{ox}) をトンネルして通り抜けることができる. この現象をトンネル効果と呼ぶ. トンネル効果により酸化膜を通り抜けた電子がフローティングゲート (FG) に蓄積することで閾値電圧を変動させることが基礎的な動作原理である. このように量子力学は今や物理学科のみが学ぶ難しい学問ということにはなっておらず, 工学の分野においても直接その知識が必要になっている.

以上のように, 量子力学は古典論では説明ができない, または極めて不合理にしか説明できない実験結果を合理的に説明できる. さらにその知識は今や工学においても積極的に利用されている. この状況を踏まえ, 以下では量子力学の原理的な部分を簡潔に説明する.

3.4 量子力学の基本的構成

この節からは量子力学の基礎原理を説明する。概論にも書いたが、本書では演算子形式の量子力学を説明する。その際、量子力学に限らず物理理論に要求されることは、先にも強調して述べた通り実験結果を説明できることである。こう述べると当たり前のようなのだが、次に述べるように、かなりエキゾチックなことを仮定する。

量子力学を構成するために

- 実験結果を説明できる理論を構築するということは、実験で測定される量を予言できるという意味である。
- すなわち測定できない部分にどんな仮定が入り込んでいても構わない。

要は実験で白黒つかない部分は問うても仕方がないということだ。しかし、実験で測定できる値は定性的にも定量的にも、今までのすべて・そしてこれから現れる実験事実を説明できなくてはならない。この強い制限の元、量子力学は以下のような法則を要請する。

量子力学の基本法則

- “測定”とは、実験的な手段で注目する系の物理量を取得すること。
- 量子力学で測定できるものは物理量を測定したときの期待値である。
- 測定値は一般にばらつくが何度測定しても同じ値になることもある。
- それぞれの値が得られる確率はミクロな状態によって決まっている。
- 期待値は時間的に変動することがある。

これらの要請は数学的には公理に対応するものであり、どこから導かれるものではない。以上の原則——物理的には法則というが——を前提として認めつつ、意味のある理論を構築していく。

まず量子力学の予言対象は古典論のように一回の測定でどんな物理量の値が得られるかではない。量子力学では、シュテルン・ゲルラッハの実験で言えばある銀原子の磁気モーメントの大きさを予言するのではなく、銀原子が飛んでくる実験を多数繰り返した時に、磁気モーメントの大きさがどんな分布を持つか（ビームが上下に $\frac{1}{2}$ ずつ分かるとか）が予言の対象である。二重スリットの例で言えば、ある電子がスクリーンのどこに衝突するかは予言対象ではなく、たくさんの電子を打ち出した時、スクリーン上に衝突する位置の分布が予言対象である。

ただし実験的に注意深く同じ状態を用意し同じ物理量を繰り返し測定したとき、何回測定しても同じ値が得られる場合もある。例えば最初に $+z$ 方向に確定したビームの銀原子は何度測定しても $+z$ 方向に確定した磁気モーメントの値が測定される。これは古典論でも同様であり不思議なことではない。しかし量子論では違う物理量を測定すれば値がばらつくのが普通である。例えばシュテルン・ゲルラッハの磁気モーメント連続測定で、最初に $+z$ 方向に確定した磁気モーメントを持つ銀原子ビームを次に x 方向の磁場 B_x が印加された装置に誘導すると、 $\pm x$ に分かれる確率は $\frac{1}{2}$ ずつになる。また、一個一個の銀原子の x 方向の磁気モーメントは測定するたびにばらつく。この結果から、物理量の値は確率的に得られると考えられる。つまり一個一個の銀原子や電子がどこに衝突するかはわからない。量子力学ではその値は確率的にばらつく。しかしその確率を用いて物理量の期待値を求めることができる。これが量子力学の予言の対象だ。これらの事実は古典論の範囲で合理的に説明することが難しい。

量子力学では、物理量や物理状態の考え方を古典論的考え方から変えることでこれらの問題を合理的に説明した。古典論では速度 60 km/h のように興味ある物理量の値をすべて決めたものが物理状態と呼ばれるものであった。しかし物理量の分布のみが定まる以上、物理量“そのもの”や“物理状態”が何であるかは古典論の意味では不明になる。そこでこれらに何らかの数学的装置を当てはめても構わない。演算子形式の量子力学では物理量を演算子という数学的装置に対応させる。また、それぞれの値が観測される確率を知るために、物理状態をヒルベルト空間上のベクトルという数学的装置に対応させる。

強調しておくが、別にそうしなくてもよい。しかし経験的に、そのような数学的装置を導入すると非常にうまく物理理論が構築できることが知られているので、ここでは先人の知恵に従うことにしよう。実験で測定される物理量の期待値は正しい手法ならばどの方法を取っても一致する。同じ答えを与える複数の理論形式は等価であり、どれを選ぶかは趣味の問題を超えない。なので経路積分量子化や最近喧しく議論されている代数的定式化など、興味があればさまざまな定式化法を調べてみると良い。本書では以上のような数学的装置を仮定する演算子形式の量子力学を解説する。大事なことは、等価とはいえどの理論形式も身につけるにはそれなりに時間がかかるので、何かひとつ腰を据えて学ぶ方が良いということである。

また、時間がたった後同じ測定を行ったとき、得られる物理量の期待値は変化することがある。これは物理量が時間経過とともに変化したとしても物理状態が時間とともに変化したとしてもどう考えても良い。実験結果を説明できる理論は等価なので、

量子力学は時間発展形式についてもいくつかの形式があることがわかる*5。

以上をまとめると、本書ではとにかく今現在とてもうまくいっている量子力学を、その基本的な考え方の一つである演算子形式を通して理解することを目的にする。

以上、駆け足気味に量子論の構成とそれに関するコメントを述べた。ここで説明した事実は、その昔は量子力学に十分に精通した人物が時間をかけてゆっくりと理解するものであると言われていた。しかし昨今の優れた教科書や解説が発表されるにつれて、この少数の事実を公理的に要請することにより、より数学的に整理された形で量子力学の基礎を導入することが可能になった*6。本書ももちろんそれらの優れた多くの教科書の影響を多分に受けている。詳しくは参考文献にある素晴らしい教科書群にあたってみると良い。

3.5 状態ベクトル

量子力学では物理状態という実際に測定できない量を数学的な装置として導入する。まず物理量の測定と述べたとき、この言葉は実験で物理量の値の一つ得る行為であると定義する。次に物理状態の定義は次のようになる。

物理状態

- 物理量を測定したときその期待値の確率分布を与えるものであり、注意深く実験により用意するものである。
- 理論的にはヒルベルト空間上の規格化された斜線であり、 $|\psi\rangle$ などと表記する。ここで斜線とは元のベクトルに長さが等しく平行なベクトルの集合である。
- ヒルベルト空間とはエルミート内積が定義された完備な複素ベクトル空間である。
- 完備性はコーシー列を用いて数学的に定義されるが、状態ベクトルの完備性は適宜満たされていることを仮定し普段はあまり気にしないことが物理屋の感覚である。実験結果を説明できない事態が生じたなど必要に迫られた時に考えれば良い程度に捉えておくことにする。

*5 本書ではハイゼンベルク描像とシュレーディンガー描像を扱うが、その合いの子である相互作用描像というものもある。残念ながら本書では相互作用描像まで踏み込んで解説することはできないが、本書で解説する二つの時間発展形式を理解すれば、自習は容易である。

*6 筆者の記憶では、清水の教科書 [24] が出版された頃から明確に教科書のトレンドが変化したように思う。本書の量子力学の記述はこの文献の影響を強く受けたものになっている部分がある。

量子力学の議論における物理状態を単に物理状態や状態ベクトルなどと呼ぶ。実際の物理状態は実験的に用意するものである。二つの状態が同じか違うかは理論的に区別するものではなく、実際にその状態を用意して測定を行った時に、どの物理量に対しても同じ期待値を与えるものを同じ状態と定義する。そして理論的には物理状態をヒルベルト空間上のベクトルに対応させる。ここでヒルベルト空間とは完備性を持ち、複素内積が定義されたベクトル空間である。なぜこのように対応させるのかと問われれば“そうするのが便利だったから”という言葉が返答になるだろう。

何度も繰り返すが、別にこうしなくても良い。ただしこのように仮定して構築した量子力学が今のところものすごくうまくいっているので、それにわざわざ反することに意味がないだけである。もっとも、量子力学は日常生活を送る我々の常識では理解できない現象まで説明する理論である。そのため理論に我々の日常感覚に馴染まない要素を持っていたとしてもそれは何ら不思議なことではないだろう。一口に言われてもわからないかもしれないので、具体例を挙げる。

シュテルン・ゲルラッハ実験の物理状態

- シュテルン・ゲルラッハ実験において、 $+z$ 方向に磁場を印加すると $\pm z$ 方向にビームが分かれるのであった。そこで $\pm z$ 方向に別れたビームの物理状態を

$$|SG\rangle_{+z}, \quad |SG\rangle_{-z} \quad (3.2)$$

などと表記する。ケットベクトルの成分はヒルベルト空間上の性質を満たすように適当に決めて良い（後の例を見よ）。

- 形式的な物理状態を表したいとき

$$|\psi\rangle, \quad |\varphi\rangle \quad (3.3)$$

などと表記する。

さて、ヒルベルト空間はベクトル空間であるので、線型代数学で説明したベクトルの性質はすべて物理状態に対しても成り立つ。特にコメントしておきたいものは、ベクトルなので和とスカラー倍について閉じているということだ。物理ではこれを重ね合わせの原理と呼ぶ。

重ね合わせの原理

- ある物理状態 $|\psi_1\rangle$ と $|\psi_2\rangle$ があったとき,

$$|\psi\rangle \equiv \alpha |\psi_1\rangle + \beta |\psi_2\rangle \quad (3.4)$$

で定義される $|\psi\rangle$ も物理状態になる.

この重ね合わせの原理は量子力学的な波動性の根幹になっている. また, 物理状態は (例えば) 位置や速度や角運動量といった物理量を指定して作る必要はなく, 最終的に得られる結果が実験結果を説明するならば, 何か適当な手段で作って良い.

シュテルン・ゲルラッハ実験の物理状態

- シュテルン・ゲルラッハ実験において, $\pm z$ 方向に別れたビームの物理状態を

$$|\text{SG}\rangle_{+z} = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix}, \quad |\text{SG}\rangle_{-z} = \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix} \quad (3.5)$$

と表記しても良い.

また内積空間上のベクトルなので, 直交や平行といった概念も線型代数学と同様に定義される.

物理状態の直交と平行

- ある物理状態 $|\psi_1\rangle$ と $|\psi_2\rangle$ があったとき,

$$\langle\psi_1|\psi_2\rangle = 0 \quad (3.6)$$

を満たすとき, 互いに直交するという.

- ある物理状態 $|\psi_1\rangle$ と $|\psi_2\rangle$ に対し, θ を任意の実数として

$$|\psi_1\rangle = e^{i\theta} |\psi_2\rangle \quad (3.7)$$

を満たすとき, $|\psi_1\rangle$ は $|\psi_2\rangle$ の斜線 (ray) であるという.

- 物理状態を表すベクトルは規格化できる. 具体的には $|\psi\rangle$ に対し

$$|\psi'\rangle = \frac{1}{\sqrt{\langle\psi|\psi\rangle}} |\psi\rangle \quad (3.8)$$

と定義すれば良い.

3.6 物理量

3.6.1 物理量と自己共役演算子

量子力学では物理量は単なる数値ではない．演算子形式の量子力学では，物理量を線型演算子に，さらにその中でも自己共役演算子に対応させる．

物理量と自己共役演算子

- 物理量を表す線型演算子 \hat{A} は以下を満たす．

$$\hat{A}(\alpha|\psi_1\rangle + \beta|\psi_2\rangle) = \alpha\hat{A}|\psi_1\rangle + \beta\hat{A}|\psi_2\rangle \quad (3.9)$$

- 物理量 A を表す線型演算子は自己共役演算子である．すなわち

$$\hat{A}^\dagger = \hat{A}. \quad (3.10)$$

- 測定される物理量の値は，自己共役演算子の固有値の一つになる．

例えば古典論における位置は例えば $[x, y, z] = [2, 3, 5]$ などと数値を与えて表す．しかし量子力学では位置演算子 \hat{x} を考える．位置を測定したときに得られる値は \hat{x} の固有値の一つである．例えば位置の固有状態を $|x\rangle$ と表し，

$$\hat{x}|x\rangle = x|x\rangle \quad (3.11)$$

を満たすとする．左辺の \hat{x} は演算子であるが，右辺の x はただの数であり，測定時に得られる物理量の値の候補になっている．一般に物理量を表す演算子は自己共役演算子であるが，この逆は成り立たない．すなわち自己共役演算子であっても観測可能量になっていない場合がある．

物理量を自己共役演算子に対応させる理由としてはいくつか考えられる．例えば自己共役演算子の固有値は全て実数になる．演算子の固有値が測定で得られる値の候補であり，物理量は実数として得られるので，最初から物理量を表す演算子は自己共役演算子に限っておくと都合が良い．以上の議論に対し以下のような疑問を生じるかもしれない：古典論でもやるように，三角関数や指数関数が現象に関わる場合は数学的な解を複素数の範囲に拡張し，最後に実数部分を取ることによって測定と対応する解を得ることもあった．量子力学でも同様の手続きを行えばいいのではないかと．この疑問はまったくそのとおりである．固有値が実数になるという理由だけから物理量

を表す演算子は自己共役演算子に対応させると言っても、そうでない理論の組み方も存在していいだろう（もちろんそれなりに面倒なのでその手間を省くと思えば標準的な議論で十分である）。

しかし自己共役演算子にはこのほかにも著しい特徴がある。それは固有状態が完全系を成すことが保障されていることである。スペクトル分解可能性を保証していると言っても同値である。これは任意の状態ベクトルを物理量の固有状態を用いて一意に展開可能であることを意味する。これは次に示すボルン則を通して確率を理論内に取り込んでも矛盾なく解釈が可能であることを可能にしている。

まとめると、筆者は物理量を表す演算子が自己共役演算子に制限する理由は固有状態が完全系を成すことを保証するためであると考えている。無論、実験によって測定できない理論の解釈は矛盾がない限り趣味の問題なので、どう捉えても良い。

ここでシュテルン・ゲルラッハ実験を元に重要な物理量を導入しよう。それはスピンという物理量である。スピンとはその名の通り“回転”に関する物理量であり、実際スピンは角運動量の成分の一つである。ただしスピンは古典的には対応がない物理量であり、純粋に量子力学的な物理量である。

スピンとパウリ行列

- 古典論の軌道角運動量を量子力学の演算子に対応させた場合、整数の角運動量を持つことが知られている。詳しい実験の結果、電子一個のスピンの絶対値は $\frac{1}{2}$ という値に決まっている。ただし $+\frac{1}{2}$ か $-\frac{1}{2}$ かの自由度をもつ。この自由度はスピンの向きを決める自由度であると考えて良い。
- シュテルン・ゲルラッハ実験の銀原子もスピン $\frac{1}{2}$ を持つ。これは銀原子の最外殻各電子が電子一個のみであり、この電子によって物性が決まっているためである。
- 詳しい理論によると、スピンの絶対値が $s > 0$ であるとき、スピンの向きを決める自由度は $s, s-1, \dots, -s$ の値を持つことが知られている。スピン $\frac{1}{2}$ の場合は $\frac{1}{2}, \frac{1}{2}-1 = -\frac{1}{2}$ で上述の通り $+\frac{1}{2}$ か $-\frac{1}{2}$ かの自由度をもつ。
- 今、スピンの絶対値が s 、スピンの向きを決める自由度が m_s だった場合、その物理状態を

$$|s, m_s\rangle \quad (3.12)$$

と表すことにしよう。スピンの物理状態はスピンの絶対値と向きを指

定する自由度を指定することで（グローバルな位相因子を除いて）一意に決まる．このように，状態を指定する指標を量子数という．

- 磁気モーメントはスピンの比例することが知られている．比例係数を省けばこれらは同一視して良い．したがってスピンは測定可能な物理量であり，この演算子を \hat{S} と表す．磁気モーメントがベクトル量であったことに対応し，スピンもベクトル量である．

$$\hat{S} = [\hat{S}_x, \hat{S}_y, \hat{S}_z] \quad (3.13)$$

- スピンに異方性がない場合， z 方向のスピンの固有状態を考えることが多い．スピン \hat{S}_z の固有状態を次のように表す．

$$\begin{aligned} \hat{S}_z \left| \frac{1}{2}, +\frac{1}{2} \right\rangle &= \frac{\hbar}{2} \left| \frac{1}{2}, +\frac{1}{2} \right\rangle = \frac{\hbar}{2} |\psi_{z+}\rangle, \\ \hat{S}_z \left| \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle &= -\frac{\hbar}{2} \left| \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle = -\frac{\hbar}{2} |\psi_{z-}\rangle \end{aligned} \quad (3.14)$$

- ここで \hbar は角運動量と同じ次元を持つ定数である．量子力学ではこの定数がゼロと見做せないことが極めて重要であり，換算プランク定数とかディラック定数などと呼ばれる．本来のプランク定数は h と表し，SI で

$$h = 6.62607015 \times 10^{-34} [\text{Js}] \quad (3.15)$$

と定義されている．プランク定数とディラック定数の関係は

$$\hbar = \frac{h}{2\pi} \quad (3.16)$$

である．

- スピン \hat{S}_z は物理量を表す演算子なので，自己共役演算子でありその固有状態は完全系を成す．すなわち

$$|\psi_{z+}\rangle \langle \psi_{z+}| + |\psi_{z-}\rangle \langle \psi_{z-}| = I. \quad (3.17)$$

また，自己共役演算子のスペクトル分解より

$$\hat{S}_z = \frac{\hbar}{2} (|\psi_{z+}\rangle \langle \psi_{z+}| - |\psi_{z-}\rangle \langle \psi_{z-}|) \quad (3.18)$$

と表示できる．

- したがって, $|\psi_{z+}\rangle, |\psi_{z-}\rangle$ を基底に取った時,

$$\hat{S}_z = \frac{\hbar}{2} \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix} = \frac{\hbar}{2} \hat{\sigma}_z \quad (3.19)$$

と行列表示できる. 最後の変形のように, 実は \hat{S}_z を固有状態でスペクトル分解した時の表現行列は, 今まで数学で幾度となく例に現れた Pauli 行列 σ_z になっている.

- この関係は他の成分についても同様に成り立つ. すなわちスピン演算子と Pauli 行列の間に

$$\hat{S}_\alpha = \frac{\hbar}{2} \hat{\sigma}_\alpha, \quad (\alpha = x, y, z) \quad (3.20)$$

が成り立つ. ここで

$$\hat{\sigma}_x = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}, \quad \hat{\sigma}_y = \begin{bmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{bmatrix}, \quad \hat{\sigma}_z = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix} \quad (3.21)$$

である.

問題

- 次の関係が成り立つことを計算により示せ.

$$\hat{\sigma}_x \hat{\sigma}_y - \hat{\sigma}_y \hat{\sigma}_x = 2i \hat{\sigma}_z. \quad (3.22)$$

実はこの計算は $(\alpha, \beta, \gamma) = (x, y, z)$ についてサイクリックである.

- 次の関係が成り立つことを計算により示せ.

$$\hat{\sigma}_\alpha^2 = I_{2 \times 2} \quad (3.23)$$

ここで $\alpha = x, y, z$ であり, $I_{2 \times 2}$ は 2 次正方行列である.

3.6.2 交換関係

上の問題でも現れていたように, 量子力学では演算子間の次の関係を考察することが多い.

交換関係と演算子

- 線型演算子 \hat{A} , \hat{B} に対し, 以下のように交換関係を定義する.

$$[\hat{A}, \hat{B}] \equiv \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A} \quad (3.24)$$

量子力学では物理量は演算子になる. 二つの異なる演算子があったとき, 一般にその演算子は交換しない. つまりある物理状態 $|\psi\rangle$ があった時, $\hat{A}\hat{B}|\psi\rangle$ と $\hat{B}\hat{A}|\psi\rangle$ は得られる物理量の値も, 最終的な物理状態も一般には異なる.

スピンの交換関係

- Pauli 行列には

$$\hat{\sigma}_x \hat{\sigma}_y - \hat{\sigma}_y \hat{\sigma}_x = 2i\hat{\sigma}_z \quad (3.25)$$

という関係が成立するのだった. 両辺に $\frac{\hbar^2}{4}$ をかけて整理すると

$$[\hat{S}_x, \hat{S}_y] = i\hbar\hat{S}_z \quad (3.26)$$

という式が成立する. この式は添字についてサイクリックであり, あらわに書けば

$$\begin{aligned} [\hat{S}_y, \hat{S}_z] &= i\hbar\hat{S}_x, \\ [\hat{S}_z, \hat{S}_x] &= i\hbar\hat{S}_y \end{aligned} \quad (3.27)$$

も成立する.

- 一般に量子力学では

$$[\hat{J}_i, \hat{J}_j] = i\hbar\varepsilon_{ijk}\hat{J}_k \quad (3.28)$$

を満たす演算子 $\hat{\mathbf{J}}$ を角運動量演算子として定義する. ここで ε_{ijk} はレヴィ・チビタ記号であり $(i, j, k) = (x, y, z)$ の偶置換ならば 1, 奇置換ならば -1, それ以外 (同じ添字が二つ以上現れるなど) ならば 0 となる記号である. スピンはこの交換関係を満たしているので角運動量の資格を持つ.

量子力学では一般に二つの演算子は交換しないばかりか, 異なる演算子になる場合すらあり得る. これは古典論との大きな違いである.

さて、ここまでは二つの演算子が交換しない場合について述べた。これが一般の場合ではあるが、しかし特別な場合として、交換する場合はどうだろうか？問題は

$$[\hat{A}, \hat{B}] \equiv \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A} = 0 \quad (3.29)$$

となる時、物理的にはどんなことが生じるかを考えたいということだ。ちなみに二つの演算子が交換する場合、二つの演算子は可換であるという。交換しない場合は非可換である。

物理流の考え方でこの問題を考えよう。物理では演算子を物理状態に作用させた時の振る舞いを考え、しかもその固有状態を考えることが重要であった。そこで \hat{A} , \hat{B} をヒルベルト空間 H 上の自己共役演算子とし、特に

$$\hat{A}|a\rangle = a|a\rangle \quad (3.30)$$

である場合を考えよう。このような状態 $|a\rangle$ に関し、 $\hat{A}\hat{B} = \hat{B}\hat{A}$ を満たすとき

$$\hat{A}\hat{B}|a\rangle = \hat{B}\hat{A}|a\rangle = a(\hat{B}|a\rangle) \quad (3.31)$$

であるから、 $\hat{B}|a\rangle$ は \hat{A} の固有状態である。つまり s 重の縮退があったとしても $\hat{B}|a\rangle = |a, 1\rangle, \dots, |a, s\rangle$ のいずれかに平行である。 \hat{A} は自己共役演算子なので $\hat{B}|a, s\rangle$ は \hat{A} が作用するヒルベルト空間 H の中で完全系を成す。ここで \hat{B} も H 上の自己共役演算子であるから、 $\hat{B}|b\rangle = b|b\rangle$ を満たす $|b\rangle$ も $|a, s\rangle$ の線型結合で一意に表すことができる。そのような状態を $|a, b, s\rangle$ と表すことにしよう。これは \hat{B} の固有値 b に属する固有状態 $|b\rangle$ を、 \hat{A} の固有値 a に属する固有状態 $|a, s\rangle$ で展開したものであるから、固有方程式として

$$\begin{aligned} \hat{A}|a, b, s\rangle &= a|a, b, s\rangle, \\ \hat{B}|a, b, s\rangle &= b|a, b, s\rangle \end{aligned} \quad (3.32)$$

が成り立つ。 $|a, b, s\rangle$ は \hat{A} の固有状態でもあるし、 \hat{B} の固有状態でもある。このような固有状態を \hat{A} と \hat{B} の同時固有状態という。

以上の議論を \hat{A} と \hat{B} の全ての固有値に対して行うことにより、次の数学の定理が成立する。

同時固有状態

- 可換な自己共役演算子 \hat{A} , \hat{B} に対し, これらの全ての固有ベクトルを同時固有状態に選ぶことができる.
- この定理の逆も成立する. すなわち自己共役演算子 \hat{A} , \hat{B} に対し, 全ての固有ベクトルを同時固有状態にとることができる場合, \hat{A} , \hat{B} は可換である.

二つ目の定理の証明は次のとおり :

自己共役演算子 \hat{A} , \hat{B} に対し

$$\begin{aligned}\hat{A}|a, b\rangle &= a|a, b\rangle, \\ \hat{B}|a, b\rangle &= b|a, b\rangle\end{aligned}\tag{3.33}$$

となる同時固有状態が存在したとする (縮退がない場合を考える). すると全ての固有値に対し

$$\begin{aligned}\hat{A}\hat{B}|a, b\rangle &= b\hat{A}|a, b\rangle = ab|a, b\rangle, \\ \hat{B}\hat{A}|a, b\rangle &= a\hat{B}|a, b\rangle = ab|a, b\rangle\end{aligned}\tag{3.34}$$

が成り立つから, 直ちに $\hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A} = 0$ である.

つまり対象とする系に交換する物理量が何個存在するかを考えると, それらの間には同時固有状態を仮定し古典論と同様に演算子は自由に交換して良い. しかし一度交換しない物理量が見つかった場合は, それらの非可換性を考慮しなければならない. これが量子力学に特有の現象を与える. 一般に, 系の交換する物理量の組を有限個にできる系を有限自由度の系と呼び, 無限個必要な系を無限自由度の系と呼ぶ.

スピン $\frac{1}{2}$ 系

- スピン $\frac{1}{2}$ 系は

$$[\hat{S}_i, \hat{S}_j] = i\hbar\varepsilon_{ijk}\hat{S}_k\tag{3.35}$$

を満たすので有限自由度系である.

3.7 ボルンの確率則

3.7.1 ボルンの確率則

以上では物理の内容と線型代数学の内容を対比させる形で説明してきた。この節では、量子力学に特有な物理の仮定を要請する。まず、測定で得られる物理量の値について次のように要請する。

ボルンの確率則

- 状態 $|\psi\rangle$ を用意して、物理量 A の測定を行う。その際に得られる値は \hat{A} の固有値のどれか一つである。
- 測定のたびにどの固有値の値が選ばれるかはばらつき、予言不可能である。
- しかし同じ状態を用意し何度も測定を繰り返した場合、固有値が選ばれる確率分布は予言できる。
- $|\psi\rangle$ を自己共役演算子 \hat{A} の固有状態 ($\hat{A}|a_i\rangle = a_i|a_i\rangle$) を満たす $|a_i\rangle$ で展開する。 $|\psi\rangle$ の展開は $|a_i\rangle$ が完全系を成すことから

$$|\psi\rangle = \left(\sum_i |a_i\rangle \langle a_i| \right) |\psi\rangle = \sum_i \langle a_i|\psi\rangle |a_i\rangle \quad (3.36)$$

である。固有値 a_i が測定される確率は $|\langle a_i|\psi\rangle|^2$ である。これをボルンの確率則という。

射影演算子 $\hat{P}_{a_i} = |a_i\rangle \langle a_i|$ を用いると

$$|\psi\rangle = \sum_i \hat{P}_{a_i} |\psi\rangle \quad (3.37)$$

とも表せる。射影演算子は $|a_i\rangle$ が正規直交基底になるので

$$\hat{P}_{a_i}^2 = \hat{P}_{a_i} \quad (3.38)$$

を満たす。物理状態 $|\psi\rangle$ は適当に規格化できるので、固有値 a_i が測定される確率は

$$|\hat{P}_{a_i} |\psi\rangle|^2 = \langle \psi | \hat{P}_{a_i} | \psi \rangle \quad (3.39)$$

とも表せる。この法則は量子力学の要請であり、数多くの実験事実によってこの要請がよく成り立っていることが確認されている。

ここで確率という言葉の意味について確認しておく．ここでは同じ状態を実験的に用意して物理量の測定を行う一連の作業を繰り返した時，その多数繰り返した実験値の比を確率と呼んでいる．つまり N 回実験を繰り返して n 回 a_i の値が得られたとする．この時 $|\langle a_i|\psi\rangle|^2 = \frac{n}{N}$ である，または N を大きくしたときにこの値に近づいていくことを意味する．この定義から明らかに

$$|\langle a_i|\psi\rangle|^2 > 0, \quad \sum_{a_i} |\langle a_i|\psi\rangle|^2 = 1 \quad (3.40)$$

を満たす．

二つ目の式が数学的に保証されるのは， $\langle\psi|\psi\rangle = 1$ として $\sum_i |a_i\rangle\langle a_i| = I$ を満たすときである．これが先にも述べたとおり，物理量を自己共役演算子に対応させる最大の理由である．つまり数学的に整備された測定値の候補が実験と矛盾しないようにするために，物理状態の完全性が必要なのである^{*7}

3.7.2 物理量の期待値

量子力学では測定時にどの固有値が選ばれるかという確率分布が予言の対象である．確率分布が分かればそこから物理量 \hat{A} の期待値 $\langle\hat{A}\rangle$ を計算できる．

物理量の期待値

- 期待値の標準的な定義から

$$\begin{aligned} \langle\hat{A}\rangle &= \sum_{a_i} a_i |\langle a_i|\psi\rangle|^2, \\ &= \sum_{a_i} a_i \langle\psi|\hat{P}_{a_i}|\psi\rangle, \\ &= \langle\psi|\left(\sum_{a_i} a_i \hat{P}_{a_i}\right)|\psi\rangle, \\ &= \langle\psi|\hat{A}|\psi\rangle \end{aligned} \quad (3.41)$$

を得る．最後の式変形は自己共役演算子のスペクトル分解である．

^{*7} 細かい話だが，固有状態の完全性を保証するのはエルミート性ではなく自己共役性である．したがって本書は物理量を表す演算子を自己共役演算子と記述した．普通の物理の文献ではこれらをエルミート共役と書くものが多い．有限自由度系ではこれらの違いが無視できることはすでに述べたとおりであるが，細かい議論が必要ならば必要に応じ参考文献を読んでいただきたい．

最後の式は量子力学で議論する物理量の表式の根底をなすものであり、極めて重要である。量子力学では見た目上ずいぶん異なって見える形式がいくつか存在するが、正しく議論されていれば $\langle \psi | \hat{A} | \psi \rangle$ はどんな形式を用いても等価になる。

スピン $\frac{1}{2}$ の期待値

- スピン演算子は

$$\hat{S}_\alpha = \frac{\hbar}{2} \hat{\sigma}_\alpha, \quad (\alpha = x, y, z) \quad (3.42)$$

を満たす演算子である。ここで \hat{S}_z の固有状態を考えよう。線型代数学の部分で計算したとおり、固有値 $+\frac{\hbar}{2}$ に対応する固有状態を $|\psi_{z+}\rangle$ 、固有値 $-\frac{\hbar}{2}$ に対応する固有状態を $|\psi_{z-}\rangle$ として

$$|\psi_{z+}\rangle = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix}, \quad |\psi_{z-}\rangle = \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix} \quad (3.43)$$

になる。

- スピン \hat{S}_z の状態 $|\psi_{z+}\rangle$ における期待値は、

$$\langle \psi_{z+} | \hat{S}_z | \psi_{z+} \rangle = \begin{bmatrix} 1 & 0 \end{bmatrix} \left(\frac{\hbar}{2} \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix} \right) \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix} = +\frac{\hbar}{2} \quad (3.44)$$

になる。同様にスピン \hat{S}_z の状態 $|\psi_{z-}\rangle$ における期待値は、

$$\langle \psi_{z-} | \hat{S}_z | \psi_{z-} \rangle = \begin{bmatrix} 0 & 1 \end{bmatrix} \left(\frac{\hbar}{2} \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix} \right) \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix} = -\frac{\hbar}{2} \quad (3.45)$$

になる。

- 次にスピン \hat{S}_x の状態 $|\psi_{z+}\rangle$ における期待値は、

$$\langle \psi_{z+} | \hat{S}_x | \psi_{z+} \rangle = \begin{bmatrix} 1 & 0 \end{bmatrix} \left(\frac{\hbar}{2} \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix} \right) \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix} = 0 \quad (3.46)$$

になる。また同様に $\langle \psi_{z-} | \hat{S}_x | \psi_{z-} \rangle = 0$ になる。 z 方向のスピンが確定した状態では x 方向のスピン期待値は 0 になる。

- スピン \hat{S}_x の固有状態を求めてみよう。これは単純に固有値問題を解けば良く、結果は固有値 $+\frac{\hbar}{2}$ に対応する固有状態を $|\psi_{x+}\rangle$ 、固有値 $-\frac{\hbar}{2}$ に対応する固有状態を $|\psi_{x-}\rangle$ として

$$|\psi_{x+}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \end{bmatrix}, \quad |\psi_{x-}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} 1 \\ -1 \end{bmatrix} \quad (3.47)$$

になる。これを $|\psi_{z\pm}\rangle$ で展開すると

$$|\psi_{x+}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\psi_{z+}\rangle + |\psi_{z-}\rangle), \quad |\psi_{x-}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\psi_{z+}\rangle - |\psi_{z-}\rangle) \quad (3.48)$$

になる。この状態に対し同じ計算を行ってみると、結果をまとめて

$$\begin{aligned} \langle\psi_{x\pm}|\hat{S}_x|\psi_{x\pm}\rangle &= \pm\frac{\hbar}{2}, \\ \langle\psi_{x\pm}|\hat{S}_z|\psi_{x\pm}\rangle &= 0 \end{aligned} \quad (3.49)$$

である。この結果はシュテルン・ゲルラッハの実験において強調した事実を表している。すなわち $|\psi_{x\pm}\rangle$ はスピンの向きについては定まっている状態なのである。量子力学では物理量の値が確実にわかっている状態に対しても、その物理量と非可換な物理量を測定すると測定値はばらつくのである。

3.8 時間発展方程式

量子力学に限らず物理では時間発展形式を求めることが重要である。ここで時間発展とは、その理論が予言できる範囲内の測定量が異なる時間 t, t' において異なる値になり得ることを意味する。また、時間発展の支配法則を数学的に記述することを時間発展形式を求めるという。

古典力学では Newton の第二法則が物理量の時間発展方程式を与えていた。この方程式は物理量の時間発展は系に働く力によって引き起こされることを述べていた。

これまでに詳しく述べたように、量子力学の予言対象は固有値が得られる確率分布であり、そこから決まる物理量の期待値である。また、これを求めるには物理量演算子と物理状態の二つを定めねばならない。ここで同じ期待値が得られるならば見た目上違って見える理論であっても等価であることを繰り返し述べた。これは時間発展形式にも同じことが言える。ある時刻 t において物理量 \hat{A} の物理状態 $|\psi\rangle$ の期待値を

$$\langle\hat{A}(t)\rangle \quad (3.50)$$

と表すことにしよう。簡単のために時刻を初期時刻 t_0 とし、

$$\langle\hat{A}(t_0)\rangle = \langle\psi(t_0)|\hat{A}(t_0)|\psi(t_0)\rangle \quad (3.51)$$

とする。

さて、 $t \neq t_0$ である時刻 t の物理量 \hat{A} の期待値 $\langle \hat{A}(t) \rangle$ はどのように表せるだろうか？もちろんこの値も物理量の期待値なのだから、演算子と物理状態を用いて表せるだろう。それでは、この時間依存性は物理量にあると考えればいいのか、物理状態にあると考えればいいのか？いや、それとも両方とも時々刻々変化すると考えることが適切なのか？

答えは、どのように考えても良い。最終的に量子力学で予言が可能なのは $\langle \hat{A}(t) \rangle$ のみであるから、測定できない理論部分にどんな自由度が入り込んでいようと構わない。このような理由で時間発展形式には様々な存在する。上の議論で言えば時間依存性を物理量に持たせるのがハイゼンベルク描像、物理状態に持たせるのがシュレーディンガー描像と呼ばれる時間発展形式である。さらに相互作用描像という、物理量と物理状態両方に時間依存性を持たせる形式も存在する。本書ではまずシュレーディンガー描像について述べ、確率保存則が時間発展形式に要請するものについて述べる。そしてすぐにハイゼンベルク描像を導入し、これらが等価な理論であることを述べる。

3.8.1 シュレーディンガー描像

シュレーディンガー描像では時間依存性を物理状態に持たせ、物理量は時間に依存しないとする。時間に依存する物理状態を $|\psi(t)\rangle$ と表すことにすると、時刻 t における物理量の期待値は

$$\langle \hat{A}(t) \rangle = \langle \psi(t) | \hat{A} | \psi(t) \rangle \quad (3.52)$$

で表せる。

さて、物理状態が時間に依存したとしても物理状態がベクトルである以上重ね合わせの原理を満たさねばならない。つまり状態ベクトルが持つ（重ね合わせに関する）数学的な性質を変えないよう、 $|\psi(t)\rangle$ と $|\psi(t')\rangle$ は線型演算子で結ばれている必要がある。この線型演算子を $\hat{U}(t', t)$ と書くと

$$|\psi(t')\rangle = \hat{U}(t', t) |\psi(t)\rangle \quad (3.53)$$

が成り立つ。この $\hat{U}(t', t)$ を時間発展演算子と呼ぶ。今、 $|\psi(t)\rangle$ が規格化されているとしよう。これは確率解釈を可能にするためにいつでも可能である。当然、この規格

化は時間によらないので時刻 t' でも成り立っていなければならない．すなわち

$$\begin{aligned}\langle\psi(t)|\psi(t)\rangle &= 1 = \langle\psi(t')|\psi(t')\rangle, \\ &= \langle\psi(t)|\hat{U}^\dagger(t',t)\hat{U}(t',t)|\psi(t)\rangle.\end{aligned}\quad (3.54)$$

これから

$$\hat{U}^\dagger(t',t)\hat{U}(t',t) = I \quad (3.55)$$

であることがわかる．すなわち時間発展演算子はユニタリ演算子である．ユニタリ演算子は内積を保存する性質があった．これは物理的には確率保存，すなわち対象とする系のどこかに必ず粒子が見出され，その数は増えも減りもしないことを意味する．

今， t' と t の差 Δt が小さい極限を考え

$$\lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{|\psi(t + \Delta t)\rangle - |\psi(t)\rangle}{\Delta t} \equiv \frac{d}{dt} |\psi(t)\rangle \quad (3.56)$$

と状態ベクトルに対する時間微分を定義しよう．ここで

$$|\psi(t + \Delta t)\rangle = \hat{U}(t + \Delta t, t) |\psi(t)\rangle \quad (3.57)$$

であることに注意すると

$$\begin{aligned}\frac{d}{dt} |\psi(t)\rangle &= \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{\hat{U}(t + \Delta t, t) |\psi(t)\rangle - |\psi(t)\rangle}{\Delta t}, \\ &= \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{\hat{U}(t + \Delta t, t) - 1}{\Delta t} |\psi(t)\rangle.\end{aligned}\quad (3.58)$$

ここで適当な演算子 \mathcal{H} を用いて

$$\hat{U}(t + \Delta t, t) \simeq 1 + \mathcal{H} \Delta t + O((\Delta t)^2). \quad (3.59)$$

となるように $\hat{U}(t + \Delta t, t)$ を Δt の一次までで展開する．時間発展演算子のユニタリ性から

$$\hat{U}^\dagger(t',t)\hat{U}(t',t) = 1 + (\mathcal{H}^\dagger + \mathcal{H})\Delta t + O((\Delta t)^2) = I \quad (3.60)$$

を満たすので

$$\mathcal{H}^\dagger + \mathcal{H} = 0 \quad (3.61)$$

である．このとき

$$\mathcal{H} = \frac{1}{i\hbar} \hat{H} \quad (3.62)$$

などとすればよく、こう選ぶと \hat{H} は自己共役演算子になる。 \hbar は通常使われる単位系と整合するようにつけた定数であり、スピン演算子の議論で現れたディラック定数である。こうすると時間発展方程式として

$$\begin{aligned}\frac{d}{dt} |\psi(t)\rangle &= \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{\hat{U}(t + \Delta t, t) |\psi(t)\rangle - |\psi(t)\rangle}{\Delta t}, \\ &= \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{\hat{U}(t + \Delta t, t) - 1}{\Delta t} |\psi(t)\rangle, \\ &= \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{1}{i\hbar} \frac{\hat{H}}{\Delta t} |\psi(t)\rangle, \\ &= \frac{1}{i\hbar} \hat{H} |\psi(t)\rangle\end{aligned}\tag{3.63}$$

が得られる。これを整理した

$$i\hbar \frac{d}{dt} |\psi(t)\rangle = \hat{H} |\psi(t)\rangle\tag{3.64}$$

を時間に依存するシュレーディンガー方程式という。また、時間発展演算子は

$$\hat{U}(t', t) = \exp\left(-i \frac{\hat{H}}{\hbar} (t' - t)\right)\tag{3.65}$$

で表される。演算子 \hat{H} はハミルトニアンと呼ばれる演算子であり、全エネルギーに対応する演算子である。なぜハミルトニアンが全エネルギーに対応するかを述べる紙幅はないが、標準的な量子力学の教科書には必ず掲載されているので各自で確認して欲しい。

以下ではハミルトニアンが全エネルギーに対応する演算子であることを認め、その固有状態を考える。

エネルギー固有状態に関する時間発展

- \hat{H} の固有方程式を次のように表そう^a.

$$\hat{H} |\psi_n\rangle = E_n |\psi_n\rangle \quad (3.66)$$

ハミルトニアン^aの固有値を固有エネルギーとかエネルギー固有値などと呼ぶ。また固有状態はエネルギー固有状態と呼ばれる。エネルギー固有状態は時間発展を記述する上で重要である。というのも、もし固有エネルギー E_n がわかっている時

$$|\psi(t)\rangle = \exp\left(-i\frac{E_n}{\hbar}t\right) |\psi_n\rangle \quad (3.67)$$

という状態 $|\psi(t)\rangle$ は時間に依存するシュレーディンガー方程式の解になっているからである（各自代入により確かめられよ）。この状態に対し物理量の期待値 $\langle \hat{A}(t) \rangle = \langle \psi(t) | \hat{A} | \psi(t) \rangle$ を計算すると

$$\begin{aligned} \langle \hat{A}(t) \rangle &= \langle \psi(t) | \hat{A} | \psi(t) \rangle, \\ &= \langle \psi_n | \exp\left(i\frac{E_n}{\hbar}t\right) \hat{A} \exp\left(-i\frac{E_n}{\hbar}t\right) | \psi_n \rangle, \\ &= \exp\left(i\frac{E_n}{\hbar}t\right) \exp\left(-i\frac{E_n}{\hbar}t\right) \langle \psi_n | \hat{A} | \psi_n \rangle, \\ &= \langle \psi_n | \hat{A} | \psi_n \rangle \end{aligned} \quad (3.68)$$

となり、期待値は時間によらないことがわかる。このように物理量の期待値が時間に依存しない状態を定常状態という。

^a この固有方程式を座標表示したものが、いわゆる時間によらないシュレーディンガー方程式である。

問題

- $|\psi(t)\rangle = \exp(-i\frac{E_n}{\hbar}t)|\psi_n\rangle$ が

$$i\hbar\frac{d}{dt}|\psi(t)\rangle = \hat{H}|\psi(t)\rangle \quad (3.69)$$

を満たすことを実際に代入して計算することにより示せ。ただし $|\psi_n\rangle$ は時間によらないとする。

エネルギー固有状態でない場合は式 (3.68) の二行目の計算が成り立たないため、物理量の期待値は時間に依存する。ハミルトニアンは系のエネルギーを記述することで非常に重要であるが、時間発展の立場からすると定常状態という特別な状態を表現するために重要な演算子である。

3.8.2 ハイゼンベルク描像

以上の時間発展形式は状態ベクトルに時間依存性をすべて押し付けた形式になっている。最初にも述べたとおり、最終的に実験で測定される物理量の期待値が同じものを与えるならその途中の理論形式は好きなように選んで良い。ここでシュレーディンガー描像による時刻 t' の期待値の表現を時刻 t の状態を用いて表すと

$$\begin{aligned} \langle \hat{A}(t') \rangle &= \langle \psi(t') | \hat{A} | \psi(t') \rangle, \\ &= \langle \psi(t) | \hat{U}^\dagger(t', t) \hat{A} \hat{U}(t', t) | \psi(t) \rangle \end{aligned} \quad (3.70)$$

ここで今 $t = t_0$, $t' = t$ と記号を置き換えて

$$\begin{aligned} \langle \hat{A}(t) \rangle &= \langle \psi(t_0) | \hat{U}^\dagger(t, t_0) \hat{A} \hat{U}(t, t_0) | \psi(t_0) \rangle, \\ &= \langle \psi(t_0) | \hat{A}_H(t) | \psi(t_0) \rangle \end{aligned} \quad (3.71)$$

と表そう。ここで

$$\hat{A}_H(t) \equiv \hat{U}^\dagger(t, t_0) \hat{A} \hat{U}(t, t_0) \quad (3.72)$$

である。 t_0 を初期時刻であると考え、状態ベクトルは初期時刻のまま変動せず、物理量を表す演算子が時間と共に変化することで物理量の期待値の時間依存性が現れると考えることができる。このように、状態ベクトルは時間依存せず、物理量が時間発展するとした時間発展形式をハイゼンベルク描像という。ハイゼンベルク描像とシュレーディンガー描像が等価なことは以上の説明により明らかであろう。

さて、ハイゼンベルク描像における時間発展の支配方程式はどうなるだろうか？今は物理量が時間に依存しているので、この時間微分を考えよう。ただし $t_0 = 0$ とし、現わに書かないことにする。また、簡単のためシュレーディンガー描像で考えた演算子 \hat{A} や \hat{H} そのものは明らかに時間 t を含んでいないとする。この時

$$\begin{aligned}
 \frac{d}{dt} \hat{A}_H(t) &= \frac{d}{dt} \left(\hat{U}^\dagger(t) \hat{A} \hat{U}(t) \right), \\
 &= \left(\frac{d}{dt} \hat{U}^\dagger(t) \right) \hat{A} \hat{U}(t) + \hat{U}^\dagger(t) \hat{A} \left(\frac{d}{dt} \hat{U}(t) \right), \\
 &= \left(\frac{d}{dt} \exp \left(i \frac{\hat{H}}{\hbar} t \right) \right) \hat{A} \hat{U}(t) + \hat{U}^\dagger(t) \hat{A} \left(\frac{d}{dt} \exp \left(-i \frac{\hat{H}}{\hbar} t \right) \right), \quad (3.73) \\
 &= - \left(\frac{\hat{H}}{i\hbar} \right) \hat{U}^\dagger(t) \hat{A} \hat{U}(t) + \hat{U}^\dagger(t) \hat{A} \left(\frac{\hat{H}}{i\hbar} t \right) \hat{U}(t), \\
 &= \frac{1}{i\hbar} [\hat{A}_H(t), \hat{H}].
 \end{aligned}$$

この時間発展方程式をハイゼンベルク方程式という。ハイゼンベルク描像は物理量が時間発展するという古典論との対応が見やすい形の方程式である。また進んだ話題として正準量子化を考える場合もこの形の方程式が議論の対象となることをコメントしておく。

問題

- 時間発展演算子とハミルトニアンが交換することを示せ。ここで演算子が指数関数の肩に載っている場合も、通常の数関数のように級数展開できるとして良い。また、同じ演算子は交換可能であることを用いて良い。
- シュレーディンガー描像で考えた演算子 \hat{A} が陽に時間に依存している場合、ハイゼンベルク方程式は

$$\frac{d}{dt} \hat{A}_H(t) = \frac{1}{i\hbar} [\hat{A}_H(t), \hat{H}] + \hat{U}^\dagger(t) \left(\frac{\partial \hat{A}(t)}{\partial t} \right) \hat{U}(t) \quad (3.74)$$

となることを示せ。

3.9 射影仮説

時間発展形式の議論のように、注目している系の状態ベクトルや物理量そのものの時間発展はユニタリである。また時間発展を考える微小時間はいくらでも小さくできるから、時間発展は連続でもある。このようにユニタリかつ連続に時間発展する形式をユニタリ発展という。

そして量子力学では時間発展形式として、注目する系のみに着目し続けた時に非ユニタリ発展をする場合が存在する。それは今注目している系を“測定”にかけた時の時間発展である。今までの議論は注目している系が測定器とは関係なく独立に存在している場合の内部で起きる時間発展であった。しかしここから考えるのは、そのように時間発展した系を“測定”して物理量の値を一つ取得する際に何が起きるかという議論である。時間発展として対象としている現象が異なることに注意しよう。

本書では“測定”という用語を『注目する系の物理量を実験的な手段で取得すること』と定義していた。しかし“測定”に関して状態ベクトルや物理量にどんな変化が起こるのか、また測定とは数学的にどのような操作を指すのかは定義していなかった。本来、これらは量子測定理論を適用し測定器（環境）と着目する系を同時に扱って議論すべき問題であるが、これらを短い紙面で解説することは不可能である。そこで量子測定理論を詳しく議論することはせず、その理論を展開した結果、何が起きるかという結果について簡単に記載するにとどめる。

前提として、物理量の値を取得する際に、これを誤差なく実験的に得る手段が存在したとする。

射影測定

- 状態 $|\psi\rangle$ を用意して、物理量 A の測定を行う。今、物理量 \hat{A} の固有値を a_i 、固有状態を $|a_i\rangle$ として、

$$\hat{A} = \sum_i a_i |a_i\rangle \langle a_i| = \sum_i a_i \hat{P}_{a_i} \quad (3.75)$$

とスペクトル分解する。 $\hat{P}_{a_i} \equiv |a_i\rangle \langle a_i|$ は固有値 a_i に属する固有状態への射影演算子であり、

$$\hat{P}_{a_i}^2 = \hat{P}_{a_i}, \quad \sum_{a_i} \hat{P}_{a_i} = 1 \quad (3.76)$$

を満たす。

- 状態 $|\psi\rangle$ に対し測定を行うと \hat{A} の固有値の一つが選ばれ物理量の値として取得できる。また、測定直後の状態は

$$|\psi_{\text{after}}\rangle = \frac{1}{\sqrt{\langle\psi|a_i\rangle}} |a_i\rangle \quad (3.77)$$

に瞬時に転移する。これは、

$$|\psi_{\text{after}}\rangle = \frac{1}{\sqrt{|\langle\psi|a_i\rangle|^2}} \hat{P}_{a_i} |\psi\rangle \quad (3.78)$$

と表せる。つまり、測定値を得た直後の物理状態は、得られた物理量の値（固有値）に属する固有状態になっている。

- この状態の転移は規格化されている。したがって量子力学ではそのすべての時間発展形式において確率保存が要請されている。

以上のような測定を射影測定、そして射影測定が行えることを射影仮説と呼ぶ。量子力学では物理量の値を一つ得た瞬間に必然的に量子状態が対応する固有状態へ瞬間的に転移してしまう。この転移が起きることを測定の反作用と呼ぶことがある。測定をしなければ物理量の値を知ることはできないので、測定の反作用を避けることは原理的に不可能である。唯一例外的に元から物理量の固有状態が用意されていた場合は測定後も状態が変わらないが、それは特別な場合であり一般の場合に成立するものではない。

また、量子論では測定の際にどの固有値が得られるかを事前に予言することはできず、ただその固有値が選ばれる確率分布がわかるのみである。つまり測定直後に“どの”固有状態にあるかも事前にはわからず、確率的にきまる。測定した瞬間に今までの状態とは全く無関係にいずれかの固有状態に転移してしまうので、この状態転移は不連続に生じる。

また、射影仮説はボルンの確率則に含まれるとする立場があるが詳しくは述べない。

3.10 例題：スピン $\frac{1}{2}$

以上で量子力学の基本的な法則は全て出揃った．しかし通り一遍の理屈を並べただけでは量子力学を理解した気分にはなれないだろう．そこで量子力学に従う現象と代表的な計算方法を見てみることにする*8．

3.10.1 例題 1: スピン $\frac{1}{2}$ 行列

スピン $\frac{1}{2}$ の行列

- スピン演算子は

$$\hat{S}_\alpha = \frac{\hbar}{2} \hat{\sigma}_\alpha, \quad (\alpha = x, y, z) \quad (3.79)$$

を満たす演算子である．ここで

$$\hat{\sigma}_x = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}, \quad \hat{\sigma}_y = \begin{bmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{bmatrix}, \quad \hat{\sigma}_z = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix} \quad (3.80)$$

である．

- $\hat{S}^2 = \hat{S}_x^2 + \hat{S}_y^2 + \hat{S}_z^2$ とする． \hat{S}^2 の行列表示を求めよう．ここで直接の計算から

$$\hat{\sigma}_x^2 = \hat{\sigma}_y^2 = \hat{\sigma}_z^2 = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} \quad (3.81)$$

*8 こう書くとき当然シュレーディンガー（の微分）方程式を解くということが代表的な作業として考えられるのだが、実は代表的な波動力学はこれまで説明していた（有限次元の）数学的定式化とはそぐわない部分もある．この部分を物理的な議論に終始し紹介することは可能だし、筆者含め多くの物理系の学科ではそのように教育が行われてきた、もしくは行ってきた．そのような教科書や講義は優れたものがたくさん存在するので、そちらを参照していただけたら良い．また、それではその数学を解説すればいいではないかという声も上がるだろうが、何度か言及した通り、このあたりの数学的定式化を厳密に行っても物理的な直感が養われるわけではなく、また現象の多様性を味わえるわけでもない．初学者の段階では『労多くして功少なし』という分野である．もちろん興味を持ったなら進んだ数理物理系の教科書で深く学ぶことは推奨される．以上長々と言い訳を述べたが、本書では今まで数学でも物理でもすでに例として取り上げたスピン $\frac{1}{2}$ 系の問題をいくつか解いてみることにする．すでに解いた問題もあるがそれは意識したものであり、今まで学んだことの復習だと思って取り組んでもらいたい．

である。これより

$$\hat{S}^2 = \left(\frac{\hbar}{2}\hat{\sigma}_x\right)^2 + \left(\frac{\hbar}{2}\hat{\sigma}_y\right)^2 + \left(\frac{\hbar}{2}\hat{\sigma}_z\right)^2 = \frac{3\hbar^2}{4} \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} \quad (3.82)$$

が得られる。

- \hat{S}^2 は単位行列の定数倍であるから $\hat{S}_x, \hat{S}_y, \hat{S}_z$ のいずれか一つと交換する。しかしスピン演算子同士は

$$\begin{aligned} [\hat{S}_x, \hat{S}_y] &= i\hbar\hat{S}_z, \\ [\hat{S}_y, \hat{S}_z] &= i\hbar\hat{S}_x, \\ [\hat{S}_z, \hat{S}_x] &= i\hbar\hat{S}_y \end{aligned} \quad (3.83)$$

であるから、どの二つも交換しない。慣例として \hat{S}^2 と交換する演算子として \hat{S}_z を選ぶ。 \hat{S}_z の固有状態を考えると、固有値 $+\frac{\hbar}{2}$ に対応する固有状態を $|\psi_{z+}\rangle$ 、固有値 $-\frac{\hbar}{2}$ に対応する固有状態を $|\psi_{z-}\rangle$ として

$$|\psi_{z+}\rangle = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix}, \quad |\psi_{z-}\rangle = \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix} \quad (3.84)$$

になる。 \hat{S}_z の固有状態は \hat{S}^2 の同時固有状態にとることができる。

一般には、 \hat{S}^2 と \hat{S}_z の同時固有状態を $|s, m_s\rangle$ として

$$\begin{aligned} \hat{S}^2 |s, m_s\rangle &= \hbar^2 s(s+1) |s, m_s\rangle, \\ \hat{S}_z |s, m_s\rangle &= \hbar m_s |s, m_s\rangle \end{aligned} \quad (3.85)$$

が成り立つ。一般に s の値を持ってスピン s という。今の場合は $s = \frac{1}{2}$ とすると \hat{S}^2 の固有値が再現できるため、スピン $\frac{1}{2}$ である。

- \hat{S}_x の固有状態を考えよう。これは単純に固有値問題を解けば良く、結果は固有値 $+\frac{\hbar}{2}$ に対応する固有状態を $(|\psi_{x+}\rangle)$ 、固有値 $-\frac{\hbar}{2}$ に対応する固有状態を $(|\psi_{x-}\rangle)$ として

$$|\psi_{x+}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \end{bmatrix}, \quad |\psi_{x-}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} 1 \\ -1 \end{bmatrix} \quad (3.86)$$

になる。

- \hat{S}_y の固有状態を考えよう．固有値 $+\frac{\hbar}{2}$ に対応する固有状態を $|\psi_{y+}\rangle$ ，固有値 $-\frac{\hbar}{2}$ に対応する固有状態を $|\psi_{y-}\rangle$ として

$$|\psi_{y+}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} 1 \\ i \end{bmatrix}, \quad |\psi_{y-}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} 1 \\ -i \end{bmatrix} \quad (3.87)$$

である．

- 今，

$$\begin{aligned} \hat{S}_+ &\equiv \hat{S}_x + i\hat{S}_y, \\ \hat{S}_- &\equiv \hat{S}_x - i\hat{S}_y \end{aligned} \quad (3.88)$$

として演算子 \hat{S}_+ , \hat{S}_- を定義しよう．行列表示すると

$$\begin{aligned} \hat{S}_+ &= \hbar \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{bmatrix}, \\ \hat{S}_- &= \hbar \begin{bmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{bmatrix} \end{aligned} \quad (3.89)$$

である． \hat{S}_+ , \hat{S}_- はそれぞれ昇降演算子という．

- 演算子 \hat{S}_+ , \hat{S}_- を $|\psi_{z\pm}\rangle$ に作用させると，それぞれ

$$\begin{aligned} \hat{S}_+ |\psi_{z+}\rangle &= \hbar \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix} = \mathbf{0}, \\ \hat{S}_+ |\psi_{z-}\rangle &= \hbar \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix} = \hbar \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix} = \hbar |\psi_{z+}\rangle, \\ \hat{S}_- |\psi_{z+}\rangle &= \hbar \begin{bmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix} = \hbar \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix} = \hbar |\psi_{z-}\rangle, \\ \hat{S}_- |\psi_{z-}\rangle &= \hbar \begin{bmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix} = \mathbf{0} \end{aligned} \quad (3.90)$$

である．すでに上を向いている ($|\psi_{z+}\rangle$) 状態に昇降演算子を作用させると，もうこれ以上登れないのでゼロになる，もしくは一段下がって下向きの状態 ($|\psi_{z-}\rangle$) になるということが起きる．逆も然りである． $|\psi_{z\pm}\rangle$ はそれぞれ m_s が $\pm\frac{1}{2}$ の状態であるが，一般に m_s の値には上限と下限がある．実はその上限の値が s ，下限の値が $-s$ になっている．

- より一般的には，スピン演算子は（反）交換関係が本質的であり，パウリ行列で表せる事実は交換関係と固有値問題から導かれる．さらにこ

の演算子が物理状態に対しどんな作用を引き起こすかで、この物理量が角運動量の一種だと結論づけられるのである。詳しくは参考文献を駆使して物理量と対称性について学んでほしい。

以上の例題は角運動量の一般論を学ぶ際に参考になるだろう。また、交換しない物理量が存在することや、交換する物理量の間で同時固有状態が取れることも確認しておこう。

3.10.2 例題 2: スピン $\frac{1}{2}$ の時間発展

次に、簡単な時間発展の例題を見てみよう。

スピン $\frac{1}{2}$ の時間発展

- スピン $\frac{1}{2}$ 系を考える。今、ハミルトニアン H を

$$H = \varepsilon_0 (|\psi_{z+}\rangle \langle\psi_{z+}| + |\psi_{z-}\rangle \langle\psi_{z-}|) - V_0 (|\psi_{z+}\rangle \langle\psi_{z-}| + |\psi_{z-}\rangle \langle\psi_{z+}|) \quad (3.91)$$

とする。 $\varepsilon_0 \geq 0$ と $V_0 \geq 0$ は実数である。 H を行列表示であらわに書くと

$$H = \begin{bmatrix} \varepsilon_0 & -V_0 \\ -V_0 & \varepsilon_0 \end{bmatrix} \quad (3.92)$$

になる。固有ベクトルを $|\psi\rangle$ 、固有値を E と書くと固有方程式は

$$H |\psi\rangle = E |\psi\rangle \quad (3.93)$$

である。固有値 $E = \varepsilon_0 + V_0$ に属する固有状態を $|S\rangle$ とすると

$$|S\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \end{bmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}} (|\psi_{z+}\rangle + |\psi_{z-}\rangle) \quad (3.94)$$

である。また、固有値 $E = \varepsilon_0 - V_0$ に属する固有状態を $|AS\rangle$ とすると

$$|AS\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} 1 \\ -1 \end{bmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}} (|\psi_{z+}\rangle - |\psi_{z-}\rangle) \quad (3.95)$$

である。これらは実は $|\psi_{x\pm}\rangle$ と同じ形になっている。

- スピン \hat{S}_z の固有状態を $|S\rangle, |AS\rangle$ を用いて表すと

$$\begin{aligned} |\psi_{z+}\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} (|S\rangle + |AS\rangle), \\ |\psi_{z-}\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} (|S\rangle - |AS\rangle) \end{aligned} \quad (3.96)$$

になる.

- 今, 初期状態として $t = 0$ で $|\psi(0)\rangle = |\psi_{z+}\rangle$ にあったとしよう. この時, 時刻 t における状態 $|\psi(t)\rangle$ は

$$|\psi(t)\rangle = U(t) |\psi_{z+}\rangle = \exp\left(-i\frac{H}{\hbar}t\right) |\psi_{z+}\rangle \quad (3.97)$$

である. ここで $|\psi_{z+}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|S\rangle + |AS\rangle)$ より

$$\begin{aligned} |\psi(t)\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} \exp\left(-i\frac{H}{\hbar}t\right) (|S\rangle + |AS\rangle), \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\exp\left(-i\frac{\varepsilon_0 - V_0}{\hbar}t\right) |S\rangle + \exp\left(-i\frac{\varepsilon_0 + V_0}{\hbar}t\right) |AS\rangle \right), \\ &= \exp\left(-i\frac{\varepsilon_0}{\hbar}t\right) \left(\cos\frac{V_0 t}{\hbar} |\psi_{z+}\rangle + i \sin\frac{V_0 t}{\hbar} |\psi_{z-}\rangle \right), \\ &= \exp\left(-i\frac{\varepsilon_0}{\hbar}t\right) (\cos\omega t |\psi_{z+}\rangle + i \sin\omega t |\psi_{z-}\rangle) \end{aligned} \quad (3.98)$$

が得られる. ここで $\omega \equiv \frac{V_0}{\hbar}$ である. $t = 0$ では $|\psi_{z+}\rangle$ だったが, これは相互作用 V_0 がゼロでない時ハミルトニアン固有状態にならない. つまり相互作用の影響で時間経過とともに $|\psi_{z-}\rangle$ の成分が混じってきて状態が変化するのである. この時間発展は複素平面上の単位円を円運動する形で変化する.

- 以上の設定で \hat{S}_z の時刻 t における期待値を求めると

$$\begin{aligned} \langle\psi(t)|\hat{S}_z|\psi(t)\rangle &= [\cos\omega t \quad -i\sin\omega t] \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \cos\omega t \\ i\sin\omega t \end{bmatrix}, \\ &= \cos^2\omega t - \sin^2\omega t, \\ &= \cos 2\omega t \end{aligned} \quad (3.99)$$

となる．周期 $T = \frac{\pi}{\omega}$ で期待値が振動する様子がわかる．また，この周期を観測できればその振動パターンから相互作用 V_0 の大きさを見積もることができる．

スピン $\frac{1}{2}$ 系は固有値 $\pm \frac{\hbar}{2}$ であり，二つの飛び飛びの値（離散化している値）を持つ．この二つの値を区別するには m_s の違いを見れば良いが，それも $m_s = \pm \frac{1}{2}$ であり，今の系には状態が二つしかない．このような系を二準位系と呼ぶ．二準位系は理論的なオモチャではない．現実の現象も適切に本質を見抜いて近似を行うことで二準位系に帰着させることができる問題は多い．電子スピン $\frac{1}{2}$ は典型的なものだがさまざまな物理的状況をこの形式で表現することができる．

筆者の専門で言えば，炭素の原子層であるグラフェンの低エネルギー物性は二準位系をもとに表現することができる．専門用語を断りなく使えば*9，グラフェンの単位胞は六角格子（ハニカム格子）であり，逆空間であるブリュアンゾーンも六角格子である．低エネルギーではワリユアンゾーンの格子端である K 点近傍の物性が支配的になる．ブリュアンゾーン内に K 点は6つ存在するが（六角格子の頂点が6つ存在するため），そのうち隣接する頂点には逆格子ベクトルの整数倍で移り変わることができない．この点を K' 点という． K 点，及び K' 点はそれぞれ3つずつ存在し，互いに逆格子ベクトルで映ることができる格子点は等価な格子点である．つまりグラフェンの低エネルギー物性では K 点近傍の運動量を持つ電子と K' 点近傍の運動量を持つ電子の二つの状態を考えれば良い．このように二つの独立な状態を基底に注目する現象のヒルベルト空間を生成できるため，グラフェンは二準位系としての扱いが可能になる．

話が高度になり，また専門用語を何の解説もなく用いているので，ここでの説明がわからなくても構わない．ただし生じている現象の本質を見抜き適切にモデル化すると，さまざまな現象が実は共通の数理構造をしていることがよくあるという事実を認識してほしい．バラバラに見えるこれらの系も，数学的な表現が同じなので生じる現象も同じである．このような普遍的な構造が見出せることも物理の魅力の一つではないだろうか．

*9 固体物理学や物性物理学を学んでほしい．

参考文献

- [1] 三宅敏恒, “入門線形代数”, 培風館.
- [2] 三宅敏恒, “線形代数概論”, 培風館.
- [3] 木田雅成, “線形代数学講義”, 培風館.
- [4] 南和彦, “線形代数講義”, 裳華房.
- [5] 藤原毅夫, “線形代数”, 岩波書店.
- [6] 寺田文行, “新版 演習 線形代数”, サイエンス社.
- [7] 齋藤正彦, “線型代数入門”, 東京大学出版会.
- [8] 齋藤正彦, “線型代数学”, 東京図書.
- [9] 志賀浩二, “線形代数 30 講”, 朝倉書店.
- [10] 志賀浩二, “固有値問題 30 講”, 朝倉書店.
- [11] 池田岳, “行列と行列式の基礎 線形代数入門”, 東京大学出版会.
- [12] 宇野勝博, “ライブ感あふれる 線形代数講義”, 裳華房.
- [13] 川久保勝夫, “なっとくする行列・ベクトル”, 講談社.
- [14] 竹内外史, “線形代数と量子力学”, 裳華房.
- [15] 佐藤光, “新版 物理数学ノート 基礎物理をよりよく理解するために”, サイエンス社.
- [16] 川畑有郷, “物理数学入門”, 培風館.
- [17] 薩摩順吉, “物理の数学”, 岩波書店.
- [18] 橋爪洋一郎, “物理学レクチャーコース 物理数学”, 裳華房.
- [19] 中田仁, “線形代数 量子力学を中心として”, 共立出版.
- [20] 高橋康, “物理数学ノート”, 講談社.
- [21] 廣川真男, “数物系に向けた フーリエ解析とヒルベルト空間論”, サイエンス社.
- [22] 榎田登美男, “数理物理における固有値問題 基礎からスペクトル理論へ”, サイエンス社.
- [23] 廣島文生, “現代の数学への道 関数解析”, サイエンス社.

- [24] 清水明, “新版 量子論の基礎 その本質のやさしい理解のために”, サイエンス社.
- [25] J.J. Sakurai, “Modern Quantum Mechanics”, Addison-Wesley: 現代の量子力学, 吉岡書店.
- [26] 三角樹弘, “コア・テキスト 量子力学基礎概念から発展的内容まで”, サイエンス社.
- [27] 初田泰之, “ライブ形式で理解する量子力学入門—現代的アプローチから—”, 共立出版.
- [28] 松浦壮, “初学の編集者がわかるまで書き直した基礎から鍛える量子力学 基本の数理から現実の物理まで一步一步”, 日本能率協会マネジメントセンター.
- [29] 堀田昌宏, “入門 現代の量子力学 量子情報・量子測定を中心として”, 講談社.
- [30] 江藤幹雄, “量子力学 I”, 丸善出版.
- [31] 勝本信吾, “量子の匠 実験量子力学入門”, 丸善出版.
- [32] 町田茂, “基礎量子力学”, 丸善株式会社.
- [33] 福田礼次郎, “マクロ系の量子力学”, 丸善株式会社.
- [34] 小川哲生, “量子力学講義”, サイエンス社.
- [35] 近藤慶一, “量子力学講義 I—物理の一般原理と数学的定式化—”, 共立出版.
- [36] 近藤慶一, “量子力学講義 II—原子から量子もつれまで—”, 共立出版.
- [37] 小形正男, “量子力学”, 裳華房.
- [38] 岡崎誠, “量子力学 [新訂版]”, サイエンス社.
- [39] 砂川重信, “量子力学”, 岩波書店.
- [40] 原康夫, “量子力学”, 岩波書店.
- [41] 岡崎誠, “物質の量子力学”, 岩波書店.
- [42] 中嶋貞雄, “量子力学 II 基本法則と応用”, 岩波書店.
- [43] 羽田野直道 井村健一郎, “非エルミート量子力学”, 講談社.
- [44] 齋藤理一郎, “量子物理学”, 培風館.
- [45] 上田正仁, “現代量子物理学”, 培風館.
- [46] 沙川貴大・上田正仁, “量子測定と量子制御 量子技術から数理構造まで”, サイエンス社.
- [47] 浅野健一, “固体電子の量子論”, 東京大学出版会.
- [48] 山本義隆, “新・物理入門”, 駿台文庫.
- [49] ローリーブラウン 編 北原和夫 田中篤司 訳, “ファインマン 経路積分の発見”, 岩波書店.
- [50] ファインマン レイトン サンズ 著 砂川重信 訳, “量子力学 ファインマン物理学 V”, 岩波書店.