

0.1 Herm(N)

本小節では、ベクトル空間と内積空間についての定義を与えたあと、Hermite 行列が Herm(N) が内積空間となることを示す。ただし、Hermite 行列は、

$$\text{Herm}(N) \in \left\{ \hat{H} \in \mathbb{C}^{N \times N} \mid \hat{H} = \hat{H}^\dagger \right\} \quad (0.1)$$

である。

V が K 上のベクトル空間であることは、以下の条件を全て満たすことである。ただし、 $u, v, w \in V$, $a, b \in K$ とする。

ベクトル空間の定義

1. $\forall u, v, w \in V \quad u + (v + w) = (u + v) + w$
2. $\exists 0 \in V \quad \forall v \quad u + 0 = 0 + u = u$
3. $\forall v \in V \quad \exists -u \quad u + (-u) = 0$
4. $\forall u, v \in V \quad u + v = v + u$
5. $\forall a \in K \quad \forall u, v \in V \quad a(u + v) = au + av$
6. $\forall a, b \in K \quad \forall v \in V \quad (a + b)v = av + bv$
7. $\forall a, b \in K \quad \forall v \in V \quad a(bv) = (ab)v$
8. $\exists 1 \in K \quad \forall v \in V \quad 1v = v$

Herm(N) は通常の行列の演算規則に従えば、明らかに \mathbb{C} 上のベクトル空間である。

内積は、ベクトル空間 V に対して定義された演算 $(\cdot, \cdot) : V \times V \rightarrow \mathbb{R}$ が以下の性質を満たすものである。ただし、 $u, v, w \in V$, $a, b \in \mathbb{C}$ とする。

内積の定義

1. $(u, \lambda v) = \lambda(u, v)$
2. $(u, v) = (v, u)^*$
3. $\forall u \quad (u, u) \geq 0$
4. $(u, u) = 0 \implies u = 0$

$A, B \in \text{Herm}(N)$ に対して内積を定義するには、対角和を用いて、

$$(A, B) = \text{tr}(A^\dagger B) \quad (0.2)$$

と定義すればよい。行列の対角和が Herm(N) の内積になることは非自明なので示す。ただし、 $A, B \in \text{Herm}(N)$ A の固有値を $\lambda_1, \dots, \lambda_N$ とする。

1. $(A, \lambda B) = \text{tr}(A^\dagger \lambda B) = \lambda \text{tr}(A^\dagger B) = \lambda(A, B)$
2. $(B, A)^* = \text{tr}(B^\dagger A)^* = \text{tr}\left((B^\dagger A)^\dagger\right) = \text{tr}\{A^\dagger B\} = (A, B)$
3. A は Hermite 行列であるから固有値は全て実数で、 $(A, A) = \text{tr}\{A^\dagger A\} = \text{tr}\{A^2\} = \sum_{i=1}^N \lambda_i^2 \geq 0$
4. $(A, A) = \sum_{i=1}^N \lambda_i^2 = 0$ となるのは $\lambda_1 = \dots = \lambda_N = 0$ となるときのみで、そのときは A は 0 行列である。

よって、対角和を用いて内積を定義すると、Herm(N) は内積空間になる。

1 Pauli 行列

Pauli 行列を $\sqrt{2}$ で割ったものは $\text{Herm}(2)$ の正規直交基底となる。ただし、Pauli 行列は、

$$\hat{\sigma}^0 := \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \quad (1.1)$$

$$\hat{\sigma}^1 := \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \quad (1.2)$$

$$\hat{\sigma}^2 := \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \quad (1.3)$$

$$\hat{\sigma}^3 := \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \quad (1.4)$$

と定義される。まず、Pauli 行列を $\sqrt{2}$ で割ったものが $\text{Herm}(2)$ の基底であることを示す。 $a_0, a_1, a_2, a_3 \in \mathbb{C}$ を用いると、

$$\frac{1}{\sqrt{2}}a_0\hat{\sigma}^0 + \frac{1}{\sqrt{2}}a_1\hat{\sigma}^1 + \frac{1}{\sqrt{2}}a_2\hat{\sigma}^2 + \frac{1}{\sqrt{2}}a_3\hat{\sigma}^3 = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} a_0 + a_3 & a_1 - ia_2 \\ a_1 + ia_2 & a_0 - a_3 \end{pmatrix} \quad (1.5)$$

となり、Pauli 行列を $\sqrt{2}$ で割ったものの線形結合で任意の Hermite 行列が書けることが分かる。Pauli 行列同士の内積について、

$$\left(\frac{1}{\sqrt{2}}\hat{\sigma}^0, \frac{1}{\sqrt{2}}\hat{\sigma}^0 \right) = \frac{1}{2} \text{tr} \left(\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \right) = \frac{1}{2} \text{tr} \left\{ \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \right\} = 1 \quad (1.6)$$

$$\left(\frac{1}{\sqrt{2}}\hat{\sigma}^1, \frac{1}{\sqrt{2}}\hat{\sigma}^1 \right) = \frac{1}{2} \text{tr} \left(\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \right) = \frac{1}{2} \text{tr} \left\{ \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \right\} = 1 \quad (1.7)$$

$$\left(\frac{1}{\sqrt{2}}\hat{\sigma}^2, \frac{1}{\sqrt{2}}\hat{\sigma}^2 \right) = \frac{1}{2} \text{tr} \left(\begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \right) = \frac{1}{2} \text{tr} \left\{ \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \right\} = 1 \quad (1.8)$$

$$\left(\frac{1}{\sqrt{2}}\hat{\sigma}^3, \frac{1}{\sqrt{2}}\hat{\sigma}^3 \right) = \frac{1}{2} \text{tr} \left(\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \right) = \frac{1}{2} \text{tr} \left\{ \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \right\} = 1 \quad (1.9)$$

$$\left(\frac{1}{\sqrt{2}}\hat{\sigma}^0, \frac{1}{\sqrt{2}}\hat{\sigma}^1 \right) = \frac{1}{2} \text{tr} \left(\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \right) = \frac{1}{2} \text{tr} \left\{ \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \right\} = 0 \quad (1.10)$$

$$\left(\frac{1}{\sqrt{2}}\hat{\sigma}^0, \frac{1}{\sqrt{2}}\hat{\sigma}^2 \right) = \frac{1}{2} \text{tr} \left(\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \right) = \frac{1}{2} \text{tr} \left\{ \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \right\} = 0 \quad (1.11)$$

$$\left(\frac{1}{\sqrt{2}}\hat{\sigma}^0, \frac{1}{\sqrt{2}}\hat{\sigma}^3 \right) = \frac{1}{2} \text{tr} \left(\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \right) = \frac{1}{2} \text{tr} \left\{ \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \right\} = 0 \quad (1.12)$$

$$\left(\frac{1}{\sqrt{2}}\hat{\sigma}^1, \frac{1}{\sqrt{2}}\hat{\sigma}^2 \right) = \frac{1}{2} \text{tr} \left(\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \right) = \frac{1}{2} \text{tr} \left\{ \begin{pmatrix} i & 0 \\ 0 & -i \end{pmatrix} \right\} = 0 \quad (1.13)$$

$$\left(\frac{1}{\sqrt{2}}\hat{\sigma}^1, \frac{1}{\sqrt{2}}\hat{\sigma}^3 \right) = \frac{1}{2} \text{tr} \left(\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \right) = \frac{1}{2} \text{tr} \left\{ \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix} \right\} = 0 \quad (1.14)$$

$$\left(\frac{1}{\sqrt{2}}\hat{\sigma}^2, \frac{1}{\sqrt{2}}\hat{\sigma}^3 \right) = \frac{1}{2} \text{tr} \left(\begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \right) = \frac{1}{2} \text{tr} \left\{ \begin{pmatrix} 0 & i \\ i & 0 \end{pmatrix} \right\} = 0 \quad (1.15)$$

となり、Pauli 行列は正規直交基底であると分かる。また、 $N \geq 4$ 以上の偶数について、Pauli 行列のテンソル積を用いて基底を定義すれば、トレースの性質より一般に $\text{Herm}(N)$ の正規直交基底が Pauli や、そのテンソル積であることが分かる。

1.1 密度行列

密度行列 $\hat{\rho}$ は状態 $|\psi\rangle$ に対して、

$$\hat{\rho} := |\rho\rangle \langle \rho| \quad (1.1)$$

と定義される。まず、任意の物理量の期待値が

1.2 偏光基底

1.3 密度行列の再構成