エルミート演算子

エルミート演算子の性質を求めていきます。
大文字のローマ文字を演算子として、ハットは省きます。

　演算子 T のエルミート共役演算子 $T^\dagger$ は

$$\langle\psi|T^\dagger|\phi\rangle = \langle\phi|T|\psi\rangle^* \tag{1}$$

と定義されます。「†」はエルミート共役と呼ばれます。また、エルミート共役「†」は

$$(\langle\phi|T)^\dagger = |\phi'\rangle\ ,\ \langle\phi|T = \langle\phi'|\ ,\ T^\dagger|\phi\rangle = |\phi'\rangle \tag{2}$$

としても定義できます。実際に、この定義から (1) が出てきます。$T^\dagger$ が状態 $|\phi\rangle$ へ作用することで $|\phi'\rangle$ になるとして、$T^\dagger|\phi\rangle$ と $\langle\psi|$ の内積は

$$\langle\psi|T^\dagger|\phi\rangle = \langle\psi|\phi'\rangle$$

同様に、$\langle\phi|T$ と $|\psi\rangle$ との内積は

$$\langle\phi|T|\psi\rangle = \langle\phi'|\psi\rangle$$

これらに内積の複素共役の定義

$$\langle\psi|\phi'\rangle = \langle\phi'|\psi\rangle^*$$

を使えば

$$\langle\psi|T^\dagger|\phi\rangle = \langle\phi|T|\psi\rangle^*$$

となり、(1) が出てきます。
　「†」の性質をさらに見ていきます。(2) からブラケットのエルミート共役は

$$\langle\phi'|^\dagger = (\langle\phi|T)^\dagger = T^\dagger|\phi\rangle = |\phi'\rangle$$

となるので、「†」はブラとケットを入れ替えます。また、$|\phi'\rangle = T|\phi\rangle$ から

$$(\langle\phi|T)^\dagger = T^\dagger|\phi\rangle$$

逆に書いても

$$\langle\phi|T = \langle\phi'| = |\phi'\rangle^\dagger = (T^\dagger|\phi\rangle)^\dagger$$

となって、同じように「†」は作用します。そして、これは $T^\dagger = S$ と書けば

$$\langle\phi|T = (T^\dagger|\phi\rangle)^\dagger = (S|\phi\rangle)^\dagger = \langle\phi|S^\dagger = \langle\phi|(T^\dagger)^\dagger$$

なので、$T^\dagger$ にさらに「†」を作用させれば $(T^\dagger)^\dagger = T$ となって元に戻ります。
　今度は二つの演算子 T_1, T_2 を用意し

$$T_1T_2|\phi\rangle = T_1|\phi'\rangle = |\phi''\rangle$$

とします。$|\phi'\rangle$ のエルミート共役は

$$|\phi'\rangle^\dagger = (T_2|\phi\rangle)^\dagger = \langle\phi|T_2^\dagger = \langle\phi'|$$

なので

$$|\phi''\rangle^\dagger = (T_1|\phi'\rangle)^\dagger = \langle\phi'|T_1^\dagger = \langle\phi|T_2^\dagger T_1^\dagger$$

そうすると

$$|\phi''\rangle^\dagger = (T_1T_2|\phi\rangle)^\dagger = \langle\phi|T_2T_1$$
$$(T_1T_2|\phi\rangle)^\dagger = \langle\phi|(T_1T_2)^\dagger$$

これらから

$$(T_1T_2)^\dagger = T_2^\dagger T_1^\dagger$$

となります。これは演算子がいくつでも成立します。
　演算子の線形性から

$$\begin{aligned}\langle\psi|(T_1+T_2)^\dagger|\phi\rangle = \langle\phi|(T_1+T_2)|\psi\rangle^* &= \langle\phi|T_1|\psi\rangle^* + \langle\phi|T_2|\psi\rangle^* \\ &= \langle\psi|T_1^\dagger|\phi\rangle + \langle\psi|T_2^\dagger|\phi\rangle \\ &= \langle\psi|(T_1^\dagger + T_2^\dagger)|\phi\rangle\end{aligned}$$

となり、$(T_1+T_2)^\dagger = T_1^\dagger + T_2^\dagger$ です。これは演算子がいくつでも成立します。
　「†」はブラとケットを入れ替えることから、

$$\langle\psi|\phi'\rangle = \langle\phi'|\psi\rangle^* = \langle\phi'|\psi\rangle^\dagger$$

と書けるので、複素数 (スカラー) の「†」は複素共役と同じ意味です。
簡単にまとめれば

- $|\phi\rangle^\dagger = \langle\phi|,\ \langle\phi|^\dagger = |\phi\rangle,\ (T|\phi\rangle)^\dagger = \langle\phi|T^\dagger,\ ((\langle\phi|T)^\dagger = T^\dagger|\phi\rangle$
- $(T^\dagger)^\dagger = T$
- $(T_1T_2\cdots T_n)^\dagger = T_n^\dagger\cdots T_2^\dagger T_1^\dagger$
- $(T_1 + T_2 + \cdots + T_n)^\dagger = T_1^\dagger + T_2^\dagger + \cdots + T_n^\dagger$
- $\alpha^\dagger = \alpha^*$

となります。α は複素数です。
$T^\dagger = T$ のときエルミート演算子と呼ばれます。エルミート演算子では

$$\langle\psi|T|\phi\rangle = \langle\phi|T|\psi\rangle^*$$

となります。エルミート演算子の性質

- 固有値は実数
- 異なる固有値に対応する固有状態はそれぞれ直交する

を示します。これらは当たり前のように使われるので、覚えておいた方が良いです。
エルミート演算子の固有値が実数になることから示します。エルミート演算子を A、固有値を a_1、対応する固有状態を $|a_1\rangle$ として

$$A|a_1\rangle = a_1|a_1\rangle$$

エルミート共役によって $(A|a_1\rangle)^\dagger = \langle a_1|A^\dagger,\ a_1^\dagger = a_1^*$ なので

$$\langle a_1|A^\dagger = (a_1|a_1\rangle)^\dagger = a_1^*\langle a_1|$$

A の別の固有状態 $|a_2\rangle$ がいるとして、それで挟むと

$$\langle a_2|A|a_1\rangle = a\langle a_2|a_1\rangle\ ,\ \langle a_1|A^\dagger|a_2\rangle = a_1^*\langle a_1|a_2\rangle$$

ここで $|a_1\rangle = |a_2\rangle = |a\rangle$ と設定し、ノルムが $\langle a_1|a_1\rangle = 1$ と規格化されているとして

$$\langle a|A|a\rangle = a_1\ ,\ \langle a|A^\dagger|a\rangle = a_1^*$$

これから、$A = A^\dagger$ なら $a = a^*$ です。よって、エルミート演算子 $A = A^\dagger$ のとき、固有値は実数です。
固有値が実数になることから、$|a_1\rangle \neq |a_2\rangle$ なら $\langle a_2|a_1\rangle = 0$ が示せます。A の固有状態 $|a'\rangle$ の固有値を a' $(a' \neq a)$ とすれば、$A = A^\dagger$ と固有値は実数から

$$A|a\rangle = a'|a'\rangle\ ,\ (A|a'\rangle)^\dagger = \langle a'|A = a'\langle a'|$$

となるので

$$\langle a'|A|a\rangle = a\langle a'|a\rangle\ ,\ \langle a'|A|a\rangle = a'\langle a'|a\rangle$$

この 2 つを引けば

$$0 = (a - a')\langle a'|a\rangle$$

$a \neq a'$ なので $\langle a'|a\rangle = 0$ が言えて、エルミート演算子において異なる固有値を持つ固有状態は直交 (内積が 0) します。クロネッカーデルタを使えば、エルミート演算子の異なる固有値 a_n を持つ固有状態 $|a_n\rangle$ $(n = 1, 2, \ldots)$ は

$$\langle a_m|a_n\rangle = \delta_{mn}$$

となっています。このように、エルミート演算子の固有状態は正規直交系となります。そして、量子力学では完全性も加えて、完全正規直交系とします。

エルミート演算子の固有値は観測量に対応しているので、重要なのは

$$A|a_n\rangle = a_n|a_n\rangle$$

という固有値問題 (固有値と固有状態を求める問題) が解けるかです。この問題に対して、エルミート演算子の固有状態は完全正規直交系という性質から分かることがあります。

エルミート演算子 A の表現行列を固有状態から作ります。固有状態は完全正規直交系なので基底として選べます。異なる固有値 a_n に対応する固有状態 $|a_n\rangle$ $(n = 1, 2, \ldots)$ として、エルミート演算子 A の表現行列を

$$A_{mn} = \langle a_m|A|a_n\rangle$$

と作ります。行列では A_{mn} のように添え字をつけて演算子と区別します。エルミート演算子の固有状態 $|a_n\rangle$ は直交しているので

$$A_{mn} = \langle a_m|A|a_n\rangle = a_n\langle a_m|a_n\rangle = a_n\delta_{mn}$$

よって、A_{mn} は固有値を対角成分とする対角行列です。なので、正規直交系を作る固有状態を見つけると、エルミート演算子は対角化できると言えます。このことから、固有状態を見つけることをエルミート演算子を対角化すると言ったります。

基底は固有状態でなくていいので、任意の基底 $|\phi_n\rangle$ から表現行列は作れます。しかし、任意の基底による $\langle\phi_m|A|\phi_n\rangle$ は対角行列ではないです。なので、対角行列 A_{mn} にする変換を考えます。

任意の基底で挟んだ $\langle\phi_m|A|\phi_n\rangle$ はエルミート行列です。M_{mn} を表現行列として

$$M_{mn} = \langle\phi_m|A|\phi_n\rangle = \langle\phi_n|A|\phi_m\rangle^* = M^*_{nm}$$

転置の記号を t とすれば、$M^*_{nm} = (M^{*t})_{mn}$ なので、エルミート共役で $M^*_{nm} = (M^\dagger)_{mn}$ です。よって $M_{mn} = (M^\dagger)_{mn}$ となるので、$\langle\phi_m|A|\phi_n\rangle$ はエルミート行列です。そうすると、エルミート行列はユニタリー行列によって対角化できる性質が使えます。実際に、そうなるのを確かめます。

固有状態による完全性を挟めば

$$
\begin{aligned}
\langle\phi_m|A|\phi_n\rangle &= \langle\phi_m|\sum_j |a_j\rangle\langle a_j|A\sum_k |a_k\rangle\langle a_k|\phi_n\rangle \\
&= \sum_j\sum_k \langle\phi_m|a_j\rangle\langle a_j|A|a_k\rangle\langle a_k|\phi_n\rangle \\
&= \sum_j\sum_k \langle\phi_m|a_j\rangle A_{jk}\langle a_k|\phi_n\rangle
\end{aligned}
$$

和の範囲は省いていますが、1 から無限大です (有限の N 次元なら 1 から N)。$\langle\phi_m|a_j\rangle$ も何かの行列 U_{mj}、$\langle a_k|\phi_n\rangle = \langle\phi_n|a_k\rangle^* = U^*_{nk}$ として

$$
\langle\phi_m|A|\phi_n\rangle = \sum_i\sum_j U_{mj}A_{jk}U^*_{nk}
$$

U^*_{nk} は転置すればエルミート共役になるので $\langle a_k|\phi_n\rangle^* = U^*_{nk} = (U^\dagger)_{kn}$ と書けます。そして

$$
U_{mk}(U^\dagger)_{kn} = \sum_k \langle\phi_m|a_k\rangle\langle a_k|\phi_n\rangle = \langle\phi_m|\phi_n\rangle = \delta_{mn}
$$

から、単位行列になるので U_{mk} はユニタリー行列です。$(U^\dagger)_{am}$ を左から、U_{nb} を右からかければ

$$
\begin{aligned}
\langle\phi_m|A|\phi_n\rangle &= \sum_j\sum_k U_{mj}A_{jk}(U^\dagger)_{kn} \\
(U^\dagger)_{am}M_{mn}U_{nb} &= \sum_j\sum_k (U^\dagger)_{am}U_{mj}A_{jk}(U^\dagger)_{kn}U_{nb} \\
&= \sum_j\sum_k \delta_{aj}A_{jk}\delta_{kb} \\
&= A_{ab}
\end{aligned}
$$

となり、$M_{mn} = \langle\phi_m|A|\phi_n\rangle$ は対角行列 A_{ab} に変換されます。これはエルミート行列に対するユニタリー変換そのものです。

というわけで、固有状態が分からなくても、ユニタリー変換によって対角化できます。しかし、当たり前ですが、対角化のためには固有状態の代わりにユニタリー行列を求める必要があります (固有値問題を、対角化できるユニタリー行列を求める問題に変えただけ)。

最後にパウリ行列にも触れておきます。パウリ行列は

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

と定義され、トレースが 0 の 2×2 エルミート行列です。計算すればすぐに分かるように

$$\text{交換関係} : [\sigma_i, \sigma_j] = 2i \sum_{k=1}^{3} \epsilon_{ijk} \sigma_k$$

$$\text{反交換関係} : \{\sigma_i, \sigma_j\} = 2I_2 \delta_{ij}$$

ローマ文字の添え字は 1 から 3、I_2 は 2×2 単位行列、ϵ_{ijk} はレヴィ・チビタ記号で $\epsilon_{123} = +1$ です。他にも

$$\sigma_1^2 = \sigma_2^2 = \sigma_3^2 = I_2$$

$$\sigma_1 \sigma_2 = i\sigma_3 \ , \ \sigma_2 \sigma_3 = i\sigma_1 \ , \ \sigma_3 \sigma_1 = i\sigma_2$$

$\sigma_i^\dagger = \sigma_i$ で $\sigma_i^2 = I_2$ なのでパウリ行列はユニタリー行列でもあります。

定数をつけて I_2 とパウリ行列の和を取ると

$$aI_2 + b_1\sigma_1 + b_2\sigma_2 + b_3\sigma_3 = \begin{pmatrix} a + b_3 & b_1 - ib_2 \\ b_1 + ib_2 & a - b_3 \end{pmatrix}$$

これが 0 になるのは、対角成分では $a = \pm b_3$ から $a = b_3 = 0$、非対角成分では $b_1 = \pm ib_2$ から $b_1 = b_2 = 0$ となるので、I_2, σ_i は線形独立です。さらに任意の 2×2 行列 M は、成分を M_{ab} として

$$\begin{aligned} M &= \frac{1}{2}(M_{11} + M_{22}) \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} + \frac{1}{2}(M_{12} + M_{21}) \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} + \frac{i}{2}(M_{12} - M_{21}) \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} + \frac{1}{2}(M_{11} - M_{22}) \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \\ &= \frac{1}{2}(M_{11} + M_{22})I_2 + \frac{1}{2}(M_{12} + M_{21})\sigma_1 + \frac{i}{2}(M_{12} - M_{21})\sigma_2 + \frac{1}{2}(M_{11} - M_{22})\sigma_3 \end{aligned}$$

となり、I_2 と σ_i の線形結合になります。これのエルミート共役は

$$M^\dagger = \frac{1}{2}(M_{11}^* + M_{22}^*)I_2 + \frac{1}{2}(M_{21}^* + M_{12}^*)\sigma_1 - \frac{i}{2}(M_{12}^* - M_{21}^*)\sigma_2 + \frac{1}{2}(M_{11}^* - M_{22}^*)\sigma_3$$

比較すれば分かるように、エルミート行列であるなら係数は全て実数です。第 3 項では $i(a + ib) = -i(a - ib)$ $(a, b$ は実数$)$ から、実数です。というわけで、エルミート行列 $A = A^\dagger$ は実数 $\alpha, \beta_1, \beta_2, \beta_3$ によって

$$A = \alpha I_2 + \beta_1 \sigma_1 + \beta_2 \sigma_2 + \beta_3 \sigma_3$$

となり、任意の 2×2 エルミート行列は I_2, σ_i の線形結合で書けます。言い換えれば、I_2, σ_i は 2×2 エルミート行列による実ベクトル空間の基底です。

・補足

具体的に 3×3 行列としてエルミート行列のユニタリー変換を作ります。3 次元複素ベクトル空間として、任意の 3×3 エルミート行列を A とします異なる固有値を $a^{(i)}$、対応する固有ベクトルを $u^{(i)}$ として

$$Au^{(i)} = a^{(i)}u^{(i)}$$

$u^{(i)}$ は 3×1 行列です。行列成分との区別のために、異なる固有値は (i) と表記しています。今は 3 次元ベクトル空間なので基底は 3 つのベクトルの組です。エルミート行列の固有ベクトル $u^{(i)}$ は基底に選べるので、$i = 1, 2, 3$ です。

固有ベクトルの成分を

$$u^{(i)} = \begin{pmatrix} u_{1i} \\ u_{2i} \\ u_{3i} \end{pmatrix}$$

とします。これから、新しい行列 U を

$$U = \begin{pmatrix} u_{11} & u_{12} & u_{13} \\ u_{21} & u_{22} & u_{23} \\ u_{31} & u_{32} & u_{33} \end{pmatrix} = (u^{(1)}\ u^{(2)}\ u^{(3)})$$

$$U^\dagger = \begin{pmatrix} u_{11}^* & u_{21}^* & u_{31}^* \\ u_{12}^* & u_{22}^* & u_{32}^* \\ u_{13}^* & u_{23}^* & u_{33}^* \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} (u^{(1)})^\dagger \\ (u^{(2)})^\dagger \\ (u^{(3)})^\dagger \end{pmatrix}$$

と作ります。$U^\dagger U$ を見てみると、$u^{(i)}$ の直交性 $(u^{(i)})^\dagger u^{(j)} = \delta_{ij}$ (内積。複素数なので転置だけでなく複素共役も必要) から

$$(U^\dagger U)_{11} = (u_{11}^*\ u_{21}^*\ u_{31}^*)\begin{pmatrix} u_{11} \\ u_{21} \\ u_{31} \end{pmatrix} = u_{11}^*u_{11} + u_{21}^*u_{21} + u_{31}^*u_{31} = (u^{(1)})^\dagger u^{(1)} = 1$$

$$(U^\dagger U)_{12} = (u_{11}^*\ u_{21}^*\ u_{31}^*)\begin{pmatrix} u_{12} \\ u_{22} \\ u_{32} \end{pmatrix} = u_{11}^*u_{12} + u_{21}^*u_{22} + u_{31}^*u_{33} = (u^{(1)})^\dagger u^{(2)} = 0$$

のようになっています。他の成分も同様に計算すれば、$U^\dagger U = I$ が分かります。I は単位行列です。よって、U は $U^\dagger = U^{-1}$ からユニタリー行列です。

ユニタリー行列 U とエルミート行列 A をかけると

$$
\begin{aligned}
AU &= A(u^{(1)}\ u^{(2)}\ u^{(3)}) = (a^{(1)}u^{(1)}\ a^{(2)}u^{(2)}\ a^{(3)}u^{(3)}) \\
&= \Big(a^{(1)}\begin{pmatrix} u_{11} \\ u_{21} \\ u_{31} \end{pmatrix}\ a^{(2)}\begin{pmatrix} u_{12} \\ u_{22} \\ u_{32} \end{pmatrix}\ a^{(3)}\begin{pmatrix} u_{13} \\ u_{23} \\ u_{33} \end{pmatrix}\Big)
\end{aligned}
$$

さらに左から $U^\dagger$ をかけると $u^{(i)}$ の直交性から

$$
\begin{aligned}
U^\dagger AU &= \begin{pmatrix} u_{11}^* & u_{21}^* & u_{31}^* \\ u_{12}^* & u_{22}^* & u_{32}^* \\ u_{13}^* & u_{23}^* & u_{33}^* \end{pmatrix}\Big(a^{(1)}\begin{pmatrix} u_{11} \\ u_{21} \\ u_{31} \end{pmatrix}\ a^{(2)}\begin{pmatrix} u_{12} \\ u_{22} \\ u_{32} \end{pmatrix}\ a^{(3)}\begin{pmatrix} u_{13} \\ u_{23} \\ u_{33} \end{pmatrix}\Big) \\
&= \Big(a^{(1)}\begin{pmatrix} (u^{(1)})^\dagger u^{(1)} \\ (u^{(2)})^\dagger u^{(1)} \\ (u^{(3)})^\dagger u^{(1)} \end{pmatrix}\ a^{(2)}\begin{pmatrix} (u^{(1)})^\dagger u^{(2)} \\ (u^{(2)})^\dagger u^{(2)} \\ (u^{(3)})^\dagger u^{(2)} \end{pmatrix}\ \begin{pmatrix} (u^{(1)})^\dagger u^{(3)} \\ (u^{(2)})^\dagger u^{(3)} \\ (u^{(3)})^\dagger u^{(3)} \end{pmatrix}\Big) \\
&= \begin{pmatrix} a^{(1)} & 0 & 0 \\ 0 & a^{(2)} & 0 \\ 0 & 0 & a^{(3)} \end{pmatrix}
\end{aligned}
$$

よって、エルミート行列 A はユニタリー変換 $U^\dagger AU$ によって対角成分が固有値となる対角行列になります。