物理のための線形代数

鈴木 修吾

2025 年 7 月 14 日

序文

本書は物理への応用，特に量子力学への応用を念頭において線形代数について述べたものです。本書の構成は

第 1 章 行列

第 2 章 線形空間

第 3 章 内積空間

第 4 章 テンソル積

第 5 章 関数空間

第 6 章 群の表現

第 7 章 物理への応用

となっています。第 1 章から第 3 章までの内容で大学 1，2 年生で学ぶ範囲はほぼ扱えたのではないかと思います。なお,「第 7 章 物理への応用」は随時更新していく予定です。

本書の第 1 章から第 3 章の特徴は以下の通りです。

第 1 章 行列

(1) 行列を列ベクトルの横並びまたは行ベクトルの縦並びとして扱うことにより，第 2 章，第 3 章で採用する行列記法の準備を行った。

(2) §1.3.4 と §1.3.5 において，列ベクトル空間の基底とそれに対応する行ベクトル空間の双対基底について述べた。また，基底と双対基底の積によって定義される射影について述べ，さらに射影の和によって表される完全性関係について述べた。これらを第 2 章で述べる一般の線形空間における射影と完全性関係への導入とした。

第 2 章 線形空間

(3) 一般的な線形空間について述べた。特に，固有値問題をスペクトル分解に重点をおいて説明した。

(4) 第 2 章では内積に関連する内容は一切扱わなかった。初学者にとってわかりにくい点の一つとして，線形代数の定理のうち内積を必要とするものはどれで必要としないものはどれなのかということがある。特に，線形代数の教科書では内積について述べた後で固有値問題を取り上げるのが普通であるが，固有値問題のどの部分が内積を必要とする箇所であり，また，どの部分が内積を必要としない箇所なのかを判断するのは初学者にとって難しいように思う。こういった点を明確にするため，内積に関連する内容はすべて第 3 章でまとめて述べることとした。

(5) ディラック記法 (ブラ-ケット記法) を採用し，線形形式 (ブラ) をベクトル (ケット) と同程度に重要な構成要素として扱った。ディラック記法は量子力学で広く用いられている記法であり，線形代数を量子力学に応用する際に役立つと考えた。

(6) 基底と双対基底について述べ，これらに基づいて射影・完全性関係・直和について述べた。

(7) 2 つの線形変換の交換子を定義し，その基本的性質について述べた。

(8) 2 つの線形変換が同時対角化可能であるための必要十分条件はこれらが可換であることを説明した。

(9) 同時対角化可能でない線形変換の組に関して，第 6 章で扱う群の表現において基本的となる，同時ブロック対角化，既約不変部分空間，シューアの補題について述べた。

第 3 章 内積空間

(10) 計量 (基底のグラム行列) を用いてベクトル，線形形式のエルミート共役を定義した。

(11) 相反基底 (双対基底のエルミート共役) について述べた。

(12) 正規直交基底に基づいて正射影・完全性関係・直交直和について述べた。

(13) 正規変換の不変部分空間，スペクトル分解，極分解，疑似逆変換について述べた。

線形代数の教科書で通常は取り上げられている内容で本書では取り上げなかったのは以下の通りです。

(1) 行列の基本変形の基本行列

(2) クラメルの公式

(3) 余因子行列による逆行列の公式

(4) ジョルダン標準形

物理への応用において上記 (1)-(4) が必要となることはありますが，本書で取り上げた内容に比べるとそういった場面は少ないように思います。これらについては線形代数の教科書を参照してください。

本書の内容は諸先輩方からの貴重なご指導やご意見および学生さんとの議論などがもとになっています。お世話になったみなさんに心から感謝いたします。

2025 年 7 月 14 日
鈴木 修吾

目 次

序文 **i**

第 1 章　行列 **1**

1.1　列ベクトル・行ベクトル・行列 1

1.1.1　列ベクトルと行ベクトル 1

1.1.2　行列 3

1.1.3　行列のエルミート共役 7

1.2　行列の基本変形 10

1.2.1　線形独立と線形従属 10

1.2.2　行列の基本変形と簡約階段形 11

1.3　基底・双対基底・射影・完全性関係 15

1.3.1　列ベクトル空間と行ベクトル空間 15

1.3.2　単位行列 17

1.3.3　正則行列 20

1.3.4　基底と双対基底 21

1.3.5　射影と完全性関係 23

1.4　連立一次方程式 26

1.4.1　写像としての行列 26

1.4.2　連立一次方程式 26

1.4.3　ガウスの消去法 27

1.4.4　逆行列の計算法 29

1.5　行列式 31

1.5.1　置換 31

1.5.2　行列式 33

1.5.3　余因子展開 36

第 2 章　線形空間 **39**

2.1　線形空間と双対空間 39

2.1.1 線形空間 39
2.1.2 双対空間 42
2.2 線形変換・射影・完全性関係 43
2.2.1 線形変換 43
2.2.2 線形変換の指数関数 51
2.2.3 射影・完全性関係・直和 56
2.3 表現 59
2.3.1 列ベクトル表現と行ベクトル表現 59
2.3.2 行列表現 61
2.3.3 基底変換 65
2.3.4 表現の変換則 68
2.4 固有値問題 70
2.4.1 固有値・固有ベクトル・固有空間 70
2.4.2 スペクトル分解と固有射影 71
2.4.3 同時対角化 73
2.4.4 固有多項式 74
2.5 線形写像 83
2.5.1 線形写像とその行列表現 83
2.5.2 線形写像の行列表現の標準形 84
2.6 同時ブロック対角化 88
2.6.1 同時ブロック対角化と既約不変部分空間 88
2.6.2 シューアの補題 90

第 3 章 内積空間 93
3.1 内積とエルミート共役 93
3.1.1 内積・ノルム・計量 93
3.1.2 ベクトルと線形形式のエルミート共役 95
3.1.3 線形変換のエルミート共役 97
3.1.4 正規変換 98
3.1.5 線形写像のエルミート共役 102
3.2 正規直交基底・正射影・直交直和 103
3.2.1 正規直交基底 103
3.2.2 正射影・完全性関係・直交直和 106
3.2.3 グラム–シュミットの直交化法 112
3.2.4 シュワルツの不等式と三角不等式 113
3.3 正規変換の固有値問題 115
3.3.1 正規変換の不変部分空間 115

3.3.2 正規変換のスペクトル分解 116
3.3.3 正規変換の極分解 118
3.3.4 正規変換の疑似逆変換 118

第 4 章 テンソル積 127
4.1 テンソル積 127
4.1.1 基底・双対基底・線形演算子 127
4.1.2 内積とエルミート共役 130
4.2 反対称テンソル空間 135
4.2.1 反対称テンソル空間 135
4.2.2 スレイター行列式 139
4.2.3 生成消滅演算子 142
4.2.4 1 体演算子と 2 体演算子 144
4.3 対称テンソル空間 152
4.3.1 対称テンソル空間 152
4.3.2 単純対称テンソル 153
4.3.3 生成消滅演算子 155
4.3.4 1 体演算子と 2 体演算子 155

第 5 章 関数空間 161
5.1 関数空間・デルタ関数・完全性関係 161
5.1.1 関数空間 161
5.1.2 デルタ関数 162
5.1.3 完全性関係 164
5.2 位置演算子と波数演算子 165
5.2.1 位置演算子とデルタ関数 165
5.2.2 波数演算子と平面波 169
5.2.3 フーリエ級数とフーリエ変換 171
5.2.4 並進演算子 174
5.2.5 シュツルム–リウヴィル理論 177
5.3 多変数関数の関数空間 186
5.3.1 スピン自由度をもつ 3 変数関数の関数空間 186
5.3.2 反転演算子・鏡映演算子・並進演算子 188
5.3.3 軌道角運動量演算子とスピン角運動量演算子 191
5.3.4 回転演算子 194
5.3.5 スカラー演算子とベクトル演算子 198
5.4 場の演算子 204

5.4.1 場の演算子 204
5.4.2 1 体演算子と 2 体演算子 205

第 6 章 群の表現 207
6.1 群 207
6.1.1 群の定義 207
6.1.2 共役類 208
6.1.3 剰余類・正規部分群・商群 209
6.2 群の表現 212
6.2.1 ユニタリ演算子のなす群の表現 212
6.2.2 シューアの補題と大直交性定理 213
6.2.3 指標の第 1 種および第 2 種直交性 215
6.2.4 射影演算子 218
6.2.5 正則表現 220
6.2.6 積表現 223
6.3 回転群 233
6.3.1 角運動量演算子の既約表現 233
6.3.2 $j = 1/2$ 236
6.3.3 $j = 1$ 236

第 7 章 物理への応用 (随時更新中) 239
7.1 力学 239
7.1.1 減衰振動 239
7.1.2 2 次元調和振動子 241
7.1.3 2 粒子系の連成振動 (同じ質量の場合) 243
7.1.4 2 粒子系の連成振動 (異なる質量の場合) 246
7.1.5 2 重振り子 (変位を座標とする場合) 248
7.1.6 2 重振り子 (角を座標とする場合) 251
7.1.7 CO_2 分子の伸縮振動 254
7.1.8 CO_2 分子の変角振動 258
7.1.9 1 次元格子の縦波格子振動 (単位胞に 1 原子の場合) 261
7.1.10 1 次元格子の横波格子振動 (単位胞に 1 原子の場合) 263
7.1.11 1 次元格子の縦波格子振動 (単位胞に 2 原子の場合) 265
7.1.12 1 次元格子の横波格子振動 (単位胞に 2 原子の場合) 268
7.1.13 2 次元六方格子の面直格子振動 (単位胞に 1 原子の場合) . . . 272
7.1.14 2 次元六方格子の面直格子振動 (単位胞に 2 原子の場合) . . . 274
7.1.15 2 次元六方格子の面内格子振動 (単位胞に 1 原子の場合) . . . 277

7.1.16 剛体の慣性テンソル 281
7.1.17 剛体の自由回転 283
7.2 波動 285
7.2.1 弦の振動 (ディリクレ境界条件) 285
7.2.2 弦の振動 (ノイマン境界条件) 286
7.2.3 弦の振動 (混合境界条件) 288
7.2.4 つり下げた鎖の振動 290
7.2.5 膜の振動 (矩形膜) 292
7.2.6 膜の振動 (円形膜) 294
7.2.7 気体の振動 (直方体容器) 296
7.2.8 気体の振動 (円筒容器) 299
7.2.9 気体の振動 (球形容器) 301
7.3 電磁気学 304
7.3.1 サイクロトロン運動 304
7.3.2 LC 回路 (1) 306
7.3.3 LC 回路 (2) 308
7.3.4 LC 伝送線路 (1) 310
7.3.5 LC 伝送線路 (2) 312
7.3.6 LC 伝送線路 (3) 314
7.3.7 LC 伝送線路 (4) 317
7.3.8 静電ポテンシャル (矩形領域) 320
7.3.9 静電ポテンシャル (円環領域) 322
7.3.10 静電ポテンシャル (直方体領域) 324
7.3.11 静電ポテンシャル (円筒領域 1) 327
7.3.12 静電ポテンシャル (円筒領域 2) 329
7.3.13 静電ポテンシャル (球殻領域) 332
7.3.14 矩形導波管 (TM モード) 334
7.3.15 矩形導波管 (TE モード) 336
7.3.16 円形導波管 (TM モード) 337
7.3.17 円形導波管 (TE モード) 339
7.3.18 直方体空洞共振器 (TM モード) 341
7.3.19 直方体空洞共振器 (TE モード) 343
7.3.20 円筒空洞共振器 (TM モード) 346
7.3.21 円筒空洞共振器 (TE モード) 348

補章 A　行列記法と略記法 **351**
A.1　行列記法 351
A.2　略記法 352

補章 B　球座標における軌道角運動量演算子 **355**
B.1　球座標 355
B.2　球座標における軌道角運動量演算子の座標表示 356

補章 C　重み付き内積 **361**
C.1　重み付き内積 361

参考文献 **366**

第 1 章　行列

本章では，第 2 章以降で必要となる行列の計算について述べる。特に，行列を列ベクトルの横並びまたは行ベクトルの縦並びとして扱う方法について説明する。また，連立一次方程式の解法，および，逆行列，行列式の計算についても述べる。なお，線形独立など一部のものを除き，本章では抽象的な内容は扱わない。

1.1　列ベクトル・行ベクトル・行列

1.1.1　列ベクトルと行ベクトル

n 個の複素数 $a_1, \cdots, a_n$ を縦に並べた

$$\boldsymbol{a} = \begin{bmatrix} a_1 \\ \vdots \\ a_n \end{bmatrix} \tag{1.1.1}$$

を n 次元または n 成分の**列ベクトル**または**縦ベクトル**といい，a_i を $\boldsymbol{a}$ の第 i 成分という。列ベクトルは特に断らない限り $\boldsymbol{a}$，$\boldsymbol{b}$，$\boldsymbol{c}$ などの太字のラテン文字で表すことにする。n 個の複素数 $\alpha_1, \cdots, \alpha_n$ を横に並べた

$$\boldsymbol{\alpha} = \begin{bmatrix} \alpha_1 & \cdots & \alpha_n \end{bmatrix} \tag{1.1.2}$$

を n 次元または n 成分の**行ベクトル**または**横ベクトル**といい，α_i を $\boldsymbol{\alpha}$ の第 i 成分という。行ベクトルは特に断らない限り $\boldsymbol{\alpha}$，$\boldsymbol{\beta}$，$\boldsymbol{\gamma}$ などの太字のギリシャ文字で表すことにする。列ベクトルと行ベクトルを**数ベクトル**という。成分がすべて 0 の列ベクトル，行ベクトルを**零列ベクトル**，**零行ベクトル**，あるいは単に**零ベクトル**という。混乱の生じない限り，零ベクトルは $\boldsymbol{0}$ によって表す。列ベクトルの和 $\boldsymbol{a} + \boldsymbol{b}$ とスカラー倍 $\lambda\boldsymbol{a}$ を

$$\begin{bmatrix} a_1 \\ \vdots \\ a_n \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} b_1 \\ \vdots \\ b_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} a_1 + b_1 \\ \vdots \\ a_n + b_n \end{bmatrix} \tag{1.1.3}$$

$$\lambda \begin{bmatrix} a_1 \\ \vdots \\ a_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \lambda a_1 \\ \vdots \\ \lambda a_n \end{bmatrix} \tag{1.1.4}$$

によって定義する。行ベクトルの和 $\boldsymbol{\alpha} + \boldsymbol{\beta}$ とスカラー倍 $\lambda\boldsymbol{\alpha}$ を

$$\begin{bmatrix} \alpha_1 & \cdots & \alpha_n \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} \beta_1 & \cdots & \beta_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \alpha_1 + \beta_1 & \cdots & \alpha_n + \beta_n \end{bmatrix} \tag{1.1.5}$$

$$\lambda \begin{bmatrix} \alpha_1 & \cdots & \alpha_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \lambda\alpha_1 & \cdots & \lambda\alpha_n \end{bmatrix} \tag{1.1.6}$$

によって定義する。行ベクトル $\boldsymbol{\alpha}$ と列ベクトル $\boldsymbol{a}$ から 1 つの複素数を与える演算である**ペアリング**を

$$\boldsymbol{\alpha}\boldsymbol{a} = \begin{bmatrix} \alpha_1 & \cdots & \alpha_n \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a_1 \\ \vdots \\ a_n \end{bmatrix} = \alpha_1 a_1 + \cdots \alpha_n a_n \tag{1.1.7}$$

によって定義する[1]。ペアリング $\boldsymbol{\alpha}\boldsymbol{a}$ は $\boldsymbol{\alpha}$ と $\boldsymbol{a}$ の次元が一致する場合のみ定義されることに注意せよ。

==========

補足・計算例 1.

列ベクトルの和とスカラー倍

$$\begin{bmatrix} 1 \\ 2 \\ 3 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} 4 \\ 5 \\ 6 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1+4 \\ 2+5 \\ 3+6 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 5 \\ 7 \\ 9 \end{bmatrix} \tag{1.1.8}$$

$$2\begin{bmatrix} 1 \\ 2 \\ 3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 2\cdot 1 \\ 2\cdot 2 \\ 2\cdot 3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 2 \\ 4 \\ 6 \end{bmatrix} \tag{1.1.9}$$

行ベクトルの和とスカラー倍

$$\begin{bmatrix} 1 & 2 & 3 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} 4 & 5 & 6 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1+4 & 2+5 & 3+6 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 5 & 7 & 9 \end{bmatrix} \tag{1.1.10}$$

$$2\begin{bmatrix} 1 & 2 & 3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 2\cdot 1 & 2\cdot 2 & 2\cdot 3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 2 & 4 & 6 \end{bmatrix} \tag{1.1.11}$$

[1] ペアリング (行ベクトルと列ベクトルに対して定義されます) は内積 (2 つの列ベクトルに対して定義されます) とは別の演算なので注意しましょう。内積は第 3 章で扱います。なお，ペアリングをスカラー積とよぶこともありますが，スカラー積という用語は内積を指すこともありますので，本書では混乱を避けるためにペアリングを用いることにします。

ペアリング

$$\begin{bmatrix} 1 & 2 & 3 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 4 \\ 5 \\ 6 \end{bmatrix} = 1 \cdot 4 + 2 \cdot 5 + 3 \cdot 6 = 4 + 10 + 18 = 32 \tag{1.1.12}$$

==========

1.1.2 行列

mn 個の複素数を

$$A = \begin{bmatrix} a_{11} & \cdots & a_{1n} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{m1} & \cdots & a_{mn} \end{bmatrix} \tag{1.1.13}$$

のように四角形に並べたものを m 行 n 列の**行列**または (m, n) 行列といい，a_{ij} を A の (i, j) 成分という。行列の観点からみると，m 次元列ベクトルは $(m, 1)$ 行列であり, n 次元行ベクトルは $(1, n)$ 行列である。A を n 個の m 次元列ベクトル $\boldsymbol{a}_1, \cdots, \boldsymbol{a}_n$ を横に並べた形，あるいは，m 個の n 次元行ベクトル $\boldsymbol{\alpha}_1, \cdots, \boldsymbol{\alpha}_m$ を縦に並べた形で,

$$A = [\, \boldsymbol{a}_1 \ \cdots \ \boldsymbol{a}_n \,] = \begin{bmatrix} \boldsymbol{\alpha}_1 \\ \vdots \\ \boldsymbol{\alpha}_m \end{bmatrix} \tag{1.1.14}$$

のように分割して表すと計算の見通しが良くなることが多い。そこで，以下では必要に応じて (1.1.14) のような表し方を用いることにする[2]。例えば，(1.1.14) と同様に，(m, n) 行列 B の第 i 列を $\boldsymbol{b}_i$，第 i 行を $\boldsymbol{\beta}_i$ のように表すなどである。成分がすべて 0 の行列を**零行列**といい，O で表す[3]。行と列の数が等しい行列を**正方行列**という[4]。正方行列 A の行の数 (=列の数) が n のとき n を A の**次数**とよび，A は n 次正方行列であるという。また，その (i, i) 成分を対角成分という。対角成分が

[2](1.1.14) のような表し方を行列の**ブロック分割**といいます。本書では行列を列ベクトルの横並びまたは行ベクトルの縦並びとして (1.1.14) のように表す場合に限ってブロック分割を用いることにします。一般のブロック分割については参考文献 [9] の第 8 章を参照してください。

[3]零行列の型 (m, n) を明示したいときは $O_{m,n}$ のように表します。

[4]本書では主に正方行列に関連する内容を扱います。

すべて 1 でその他の成分がすべて 0 の n 次正方行列

$$I = \begin{bmatrix} 1 & & O \\ & \ddots & \\ O & & 1 \end{bmatrix} \tag{1.1.15}$$

を n 次の**単位行列**という。次数を明示する場合は I_n と表すことにする[5]。n 次正方行列 A に対し $AB = BA = I$ を満たす n 次正方行列 B が存在するとき，A は**正則**あるいは**正則行列**であるという。$B = A^{-1}$ と表し，A^{-1} を A の**逆行列**という。単位行列については §1.3.2 で，また，正則行列については §1.3.3 でさらに詳しく述べる。

行列の和 $A + B$ とスカラー倍 λA を

$$[\,\boldsymbol{a}_1 \cdots \boldsymbol{a}_n\,] + [\,\boldsymbol{b}_1 \cdots \boldsymbol{b}_n\,] = [\,\boldsymbol{a}_1 + \boldsymbol{b}_1 \cdots \boldsymbol{a}_n + \boldsymbol{b}_n\,] \tag{1.1.16}$$

$$\lambda[\,\boldsymbol{a}_1 \cdots \boldsymbol{a}_n\,] = [\,\lambda\boldsymbol{a}_1 \cdots \lambda\boldsymbol{a}_n\,] \tag{1.1.17}$$

によって定義する。この定義から，$A + B$ と λA は

$$\begin{bmatrix} \boldsymbol{\alpha}_1 \\ \vdots \\ \boldsymbol{\alpha}_m \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} \boldsymbol{\beta}_1 \\ \vdots \\ \boldsymbol{\beta}_m \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \boldsymbol{\alpha}_1 + \boldsymbol{\beta}_1 \\ \vdots \\ \boldsymbol{\alpha}_m + \boldsymbol{\beta}_m \end{bmatrix} \tag{1.1.18}$$

$$\lambda \begin{bmatrix} \boldsymbol{\alpha}_1 \\ \vdots \\ \boldsymbol{\alpha}_m \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \lambda\boldsymbol{\alpha}_1 \\ \vdots \\ \lambda\boldsymbol{\alpha}_m \end{bmatrix} \tag{1.1.19}$$

と書くこともできる。さらに，(l, m) 行列 A，(m, n) 行列 B

$$A = [\,\boldsymbol{a}_1 \cdots \boldsymbol{a}_m\,] = \begin{bmatrix} \boldsymbol{\alpha}_1 \\ \vdots \\ \boldsymbol{\alpha}_l \end{bmatrix} \qquad B = [\,\boldsymbol{b}_1 \cdots \boldsymbol{b}_n\,] = \begin{bmatrix} \boldsymbol{\beta}_1 \\ \vdots \\ \boldsymbol{\beta}_m \end{bmatrix} \tag{1.1.20}$$

の積 AB を

$$AB = \begin{bmatrix} \boldsymbol{\alpha}_1 \\ \vdots \\ \boldsymbol{\alpha}_l \end{bmatrix} [\,\boldsymbol{b}_1 \cdots \boldsymbol{b}_n\,] = \begin{bmatrix} \boldsymbol{\alpha}_1\boldsymbol{b}_1 & \cdots & \boldsymbol{\alpha}_1\boldsymbol{b}_n \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \boldsymbol{\alpha}_l\boldsymbol{b}_1 & \cdots & \boldsymbol{\alpha}_l\boldsymbol{b}_n \end{bmatrix} \tag{1.1.21}$$

[5] 文脈から次数が明らかな場合は単に I と表します。

によって定義する。つまり，AB の (i,j) 成分をペアリング $\boldsymbol{\alpha}_i\boldsymbol{b}_j$ として定める。A, B の成分を用いて表すと，

$$(AB)_{ij} = \sum_{k=1}^{m} a_{ik}b_{kj} \tag{1.1.22}$$

である。行列の積 AB は A の列の数と B の行の数が一致する場合のみ定義されることに注意せよ。(1.1.21) より，

$$AB = A[\,\boldsymbol{b}_1 \cdots \boldsymbol{b}_n\,] = [\,A\boldsymbol{b}_1 \cdots A\boldsymbol{b}_n\,] \tag{1.1.23}$$

あるいは

$$AB = \begin{bmatrix} \boldsymbol{\alpha}_1 \\ \vdots \\ \boldsymbol{\alpha}_l \end{bmatrix} B = \begin{bmatrix} \boldsymbol{\alpha}_1 B \\ \vdots \\ \boldsymbol{\alpha}_l B \end{bmatrix} \tag{1.1.24}$$

と書くこともできる。また，A の第 k 列 $\boldsymbol{a}_k$ と B の第 k 行 $\boldsymbol{\beta}_k$ の積 $\boldsymbol{a}_k\boldsymbol{\beta}_k$ は

$$\boldsymbol{a}_k\boldsymbol{\beta}_k = \begin{bmatrix} a_{1k} \\ \vdots \\ a_{lk} \end{bmatrix} [\,b_{k1} \cdots b_{kn}\,] = \begin{bmatrix} a_{1k}b_{k1} & \cdots & a_{1k}b_{kn} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{lk}b_{k1} & \cdots & a_{lk}b_{kn} \end{bmatrix} \tag{1.1.25}$$

である。つまり，$\boldsymbol{a}_k\boldsymbol{\beta}_k$ の (i,j) 成分は $a_{ik}b_{kj}$ である。したがって，

$$AB = [\,\boldsymbol{a}_1 \cdots \boldsymbol{a}_m\,] \begin{bmatrix} \boldsymbol{\beta}_1 \\ \vdots \\ \boldsymbol{\beta}_m \end{bmatrix} = \boldsymbol{a}_1\boldsymbol{\beta}_1 + \cdots + \boldsymbol{a}_m\boldsymbol{\beta}_m \tag{1.1.26}$$

が成り立つ[6]。

[(1.1.26) の証明] $\boldsymbol{a}_1\boldsymbol{\beta}_1 + \cdots + \boldsymbol{a}_m\boldsymbol{\beta}_m$ の (i,j) 成分は

$$\left(\sum_{k=1}^{m} \boldsymbol{a}_k\boldsymbol{\beta}_k\right)_{ij} = \sum_{k=1}^{m} (\boldsymbol{a}_k\boldsymbol{\beta}_k)_{ij} = \sum_{k=1}^{m} a_{ik}b_{kj} = \boldsymbol{\alpha}_i\boldsymbol{b}_j = (AB)_{ij} \tag{1.1.27}$$

となる。よって，(1.1.26) が成り立つ。 ■

正方行列 A の対角成分の和を $\operatorname{tr} A$ で表す。$\operatorname{tr} A$ を A の**トレース**という[7]。つまり，

$$\operatorname{tr} A = \sum_{i=1}^{n} a_{ii} \tag{1.1.28}$$

[6] 行列を列ベクトルの横並びまたは行ベクトルの縦並びとして表すブロック分割による公式 (1.1.26) は非常に有用で，**列行展開**と名付ける価値のある公式だと思います。本書ではこの公式をいろいろなところで用いています。

[7] トレースは**跡**または**対角和**とよばれることもあります。

である。正方行列の積のトレースは，積の順序を巡回的に入れ替えても変わらない。例えば，n 次正方行列 A，B，C の積のトレースについて，

$$\mathrm{tr}(ABC) = \mathrm{tr}(BCA) = \mathrm{tr}(CAB) \tag{1.1.29}$$

が成り立つ。

[(1.1.29) の証明] A，B，C の成分を用いて積 ABC の (i,i) 成分を表すことにより，

$$\mathrm{tr}(ABC) = \sum_{i=1}^{n}(ABC)_{ii} = \sum_{i=1}^{n}\sum_{j=1}^{n}\sum_{k=1}^{n} a_{ij}b_{jk}c_{ki} = \sum_{i=1}^{n}\sum_{j=1}^{n}\sum_{k=1}^{n} b_{jk}c_{ki}a_{ij} = \mathrm{tr}(BCA) \tag{1.1.30}$$

を得る。$\mathrm{tr}(ABC) = \mathrm{tr}(CAB)$ も同様に示せる。 ■

行列の積の著しい特徴として**非可換性**がある。AB が定義されても BA が定義されないこともあるし，たとえ BA が定義されても AB とは型が異なることもある。より重要なのは，A，B がともに正方行列の場合，AB，BA はどちらも A，B と同じ次数の正方行列となるにもかかわらず，一般には $AB = BA$ は成り立たないという点である。

==========

補足・計算例 2.

行列の和とスカラー倍

$$\begin{bmatrix}1 & 2\\3 & 4\end{bmatrix} + \begin{bmatrix}5 & 6\\7 & 8\end{bmatrix} = \begin{bmatrix}1+5 & 2+6\\3+7 & 4+8\end{bmatrix} = \begin{bmatrix}6 & 8\\10 & 12\end{bmatrix} \tag{1.1.31}$$

$$2\begin{bmatrix}1 & 2\\3 & 4\end{bmatrix} = \begin{bmatrix}2\cdot 1 & 2\cdot 2\\2\cdot 3 & 2\cdot 4\end{bmatrix} = \begin{bmatrix}2 & 4\\6 & 8\end{bmatrix} \tag{1.1.32}$$

行列の積

$$\begin{aligned}
\begin{bmatrix}1 & 2\\3 & 4\end{bmatrix}\begin{bmatrix}5 & 6 & 7\\8 & 9 & 10\end{bmatrix} &= \begin{bmatrix}[\,1\ 2\,]\begin{bmatrix}5\\8\end{bmatrix} & [\,1\ 2\,]\begin{bmatrix}6\\9\end{bmatrix} & [\,1\ 2\,]\begin{bmatrix}7\\10\end{bmatrix}\\ [\,3\ 4\,]\begin{bmatrix}5\\8\end{bmatrix} & [\,3\ 4\,]\begin{bmatrix}6\\9\end{bmatrix} & [\,3\ 4\,]\begin{bmatrix}7\\10\end{bmatrix}\end{bmatrix} = \begin{bmatrix}21 & 24 & 27\\47 & 54 & 61\end{bmatrix}\\
&= \begin{bmatrix}\begin{bmatrix}1 & 2\\3 & 4\end{bmatrix}\begin{bmatrix}5\\8\end{bmatrix} & \begin{bmatrix}1 & 2\\3 & 4\end{bmatrix}\begin{bmatrix}6\\9\end{bmatrix} & \begin{bmatrix}1 & 2\\3 & 4\end{bmatrix}\begin{bmatrix}7\\10\end{bmatrix}\end{bmatrix}\\
&= \begin{bmatrix}[\,1\ 2\,]\begin{bmatrix}5 & 6 & 7\\8 & 9 & 10\end{bmatrix}\\ [\,3\ 4\,]\begin{bmatrix}5 & 6 & 7\\8 & 9 & 10\end{bmatrix}\end{bmatrix}\\
&= \begin{bmatrix}1\\3\end{bmatrix}[\,5\ 6\ 7\,] + \begin{bmatrix}2\\4\end{bmatrix}[\,8\ 9\ 10\,] = \begin{bmatrix}5 & 6 & 7\\15 & 18 & 21\end{bmatrix} + \begin{bmatrix}16 & 18 & 20\\32 & 36 & 40\end{bmatrix}
\end{aligned} \tag{1.1.33}$$

正方行列のトレース

$$\mathrm{tr}\begin{bmatrix}1 & 2\\3 & 4\end{bmatrix} = 1+4=5 \tag{1.1.34}$$

$$\mathrm{tr}\left(\begin{bmatrix}1 & 2\\3 & 4\end{bmatrix}\begin{bmatrix}5 & 6\\7 & 8\end{bmatrix}\right) = \mathrm{tr}\begin{bmatrix}19 & 22\\43 & 50\end{bmatrix} = 19+50=69 \tag{1.1.35}$$

$$\mathrm{tr}\left(\begin{bmatrix}5 & 6\\7 & 8\end{bmatrix}\begin{bmatrix}1 & 2\\3 & 4\end{bmatrix}\right) = \mathrm{tr}\begin{bmatrix}23 & 34\\31 & 46\end{bmatrix} = 23+46=69 \tag{1.1.36}$$

非可換な正方行列の積

$$\begin{bmatrix}1 & 2\\3 & 4\end{bmatrix}\begin{bmatrix}5 & 6\\7 & 8\end{bmatrix} = \begin{bmatrix}19 & 22\\43 & 50\end{bmatrix} \qquad \begin{bmatrix}5 & 6\\7 & 8\end{bmatrix}\begin{bmatrix}1 & 2\\3 & 4\end{bmatrix} = \begin{bmatrix}23 & 34\\31 & 46\end{bmatrix} \tag{1.1.37}$$

$$\begin{bmatrix}0 & 1\\1 & 0\end{bmatrix}\begin{bmatrix}1 & 0\\0 & -1\end{bmatrix} = \begin{bmatrix}0 & -1\\1 & 0\end{bmatrix} \qquad \begin{bmatrix}1 & 0\\0 & -1\end{bmatrix}\begin{bmatrix}0 & 1\\1 & 0\end{bmatrix} = \begin{bmatrix}0 & 1\\-1 & 0\end{bmatrix} \tag{1.1.38}$$

==========

1.1.3 行列のエルミート共役

(m,n) 行列 A の**エルミート共役** $A^\dagger$ を

$$A = \begin{bmatrix}a_{11} & \cdots & a_{1n}\\ \vdots & \ddots & \vdots\\ a_{m1} & \cdots & a_{mn}\end{bmatrix} \quad\Leftrightarrow\quad A^\dagger = \begin{bmatrix}a_{11}^* & \cdots & a_{m1}^*\\ \vdots & \ddots & \vdots\\ a_{1n}^* & \cdots & a_{mn}^*\end{bmatrix} \tag{1.1.39}$$

によって定義する[8]。ここで，a_{ij}^* は a_{ij} の複素共役である[9]。(1.1.39) を成分で表すと $(A^\dagger)_{ij} = a_{ji}^*$ である。また，$(A^\dagger)^\dagger = A$ が成り立つ。$A^\dagger$ は (n,m) 行列であることに注意せよ。特に，列ベクトル $\boldsymbol{a}$ のエルミート共役 $\boldsymbol{a}^\dagger$ は行ベクトルであり，

$$\boldsymbol{a} = \begin{bmatrix}a_1\\ \vdots\\ a_n\end{bmatrix} \quad\Leftrightarrow\quad \boldsymbol{a}^\dagger = \begin{bmatrix} a_1^* & \cdots & a_n^* \end{bmatrix} \tag{1.1.40}$$

[8]行列のエルミート共役は**転置共役**あるいは**随伴行列**ともよばれます (余因子行列を随伴行列とよぶこともあるようですが，まったくの別物ですので注意しましょう)。行列 A のエルミート共役を表す記号として A^* もよく使われますが，本書では $A^\dagger$ を用いることにします。

[9]複素数 z の複素共役を表す記号として $\bar{z}$ もよく使われますが，本書では z^* を用いることにします。

となる。また，行ベクトル $\boldsymbol{\alpha}$ のエルミート共役 $\boldsymbol{\alpha}^\dagger$ は列ベクトルであり，

$$\boldsymbol{\alpha} = \begin{bmatrix} \alpha_1 & \cdots & \alpha_n \end{bmatrix} \quad \Leftrightarrow \quad \boldsymbol{\alpha}^\dagger = \begin{bmatrix} \alpha_1^* \\ \vdots \\ \alpha_n^* \end{bmatrix} \tag{1.1.41}$$

となる。(1.1.40) を用いると

$$A = [\, \boldsymbol{a}_1 \cdots \boldsymbol{a}_n \,] \quad \Leftrightarrow \quad A^\dagger = \begin{bmatrix} \boldsymbol{a}_1^\dagger \\ \vdots \\ \boldsymbol{a}_n^\dagger \end{bmatrix} \tag{1.1.42}$$

である。また，(1.1.41) を用いると

$$A = \begin{bmatrix} \boldsymbol{\alpha}_1 \\ \vdots \\ \boldsymbol{\alpha}_m \end{bmatrix} \quad \Leftrightarrow \quad A^\dagger = [\, \boldsymbol{\alpha}_1^\dagger \cdots \boldsymbol{\alpha}_m^\dagger \,] \tag{1.1.43}$$

である。行列の和とスカラー倍のエルミート共役について

$$(A+B)^\dagger = A^\dagger + B^\dagger \qquad (\lambda A)^\dagger = \lambda^* A^\dagger \tag{1.1.44}$$

である。行列の積のエルミート共役については，例えば

$$(ABC)^\dagger = C^\dagger B^\dagger A^\dagger \tag{1.1.45}$$

のように，それぞれのエルミート共役の逆順の積となる。
[(1.1.45) の証明] A，B，C の型を (k,l)，(l,m)，(m,n) とすると，

$$\begin{aligned} \left((ABC)^\dagger\right)_{ij} &= ((ABC)_{ji})^* = \left(\sum_{i'=1}^{l}\sum_{j'=1}^{m} a_{ji'} b_{i'j'} c_{j'i}\right)^* = \sum_{i'=1}^{l}\sum_{j'=1}^{m} a_{ji'}^* b_{i'j'}^* c_{j'i}^* \\ &= \sum_{i'=1}^{l}\sum_{j'=1}^{m} (A^\dagger)_{i'j} (B^\dagger)_{j'i'} (C^\dagger)_{ij'} = \sum_{i'=1}^{l}\sum_{j'=1}^{m} (C^\dagger)_{ij'} (B^\dagger)_{j'i'} (A^\dagger)_{i'j} = (C^\dagger B^\dagger A^\dagger)_{ij} \end{aligned} \tag{1.1.46}$$

であるから，(1.1.45) が成り立つ。 ■

n 次正方行列 A について

$$AA^\dagger = A^\dagger A \tag{1.1.47}$$

が成り立つとき，A を**正規行列**という。A が

$$A^\dagger = A \tag{1.1.48}$$

を満たすとき，A を**エルミート行列**という。A が

$$A^\dagger = -A \tag{1.1.49}$$

を満たすとき，A を**歪エルミート行列**という。A が

$$A^\dagger = A^{-1} \tag{1.1.50}$$

を満たすとき，A を**ユニタリ行列**という。エルミート行列，歪エルミート行列，ユニタリ行列は正規行列である。

==========

補足・計算例 3.

行列のエルミート共役

$$\begin{aligned}
\begin{bmatrix} 1+2i \\ 7+8i \end{bmatrix}^\dagger &= \begin{bmatrix} 1-2i & 7-8i \end{bmatrix} \\
\begin{bmatrix} 3+4i \\ 9+10i \end{bmatrix}^\dagger &= \begin{bmatrix} 3-4i & 9-10i \end{bmatrix} \\
\begin{bmatrix} 5+6i \\ 11+12i \end{bmatrix}^\dagger &= \begin{bmatrix} 5-6i & 11-12i \end{bmatrix}
\end{aligned} \tag{1.1.51}$$

$$\begin{aligned}
\begin{bmatrix} 1+2i & 3+4i & 5+6i \end{bmatrix}^\dagger &= \begin{bmatrix} 1-2i \\ 3-4i \\ 5-6i \end{bmatrix} \\
\begin{bmatrix} 7+8i & 9+10i & 11+12i \end{bmatrix}^\dagger &= \begin{bmatrix} 7-8i \\ 9-10i \\ 11-12i \end{bmatrix}
\end{aligned} \tag{1.1.52}$$

$$\begin{aligned}
\begin{bmatrix} 1+2i & 3+4i & 5+6i \\ 7+8i & 9+10i & 11+12i \end{bmatrix}^\dagger &= \begin{bmatrix} 1-2i & 7-8i \\ 3-4i & 9-10i \\ 5-6i & 11-12i \end{bmatrix} \\
&= \begin{bmatrix} \begin{bmatrix} 1+2i \\ 7+8i \end{bmatrix}^\dagger \\ \begin{bmatrix} 3+4i \\ 9+10i \end{bmatrix}^\dagger \\ \begin{bmatrix} 5+6i \\ 11+12i \end{bmatrix}^\dagger \end{bmatrix} \\
&= \begin{bmatrix} \begin{bmatrix} 1+2i & 3+4i & 5+6i \end{bmatrix}^\dagger & \begin{bmatrix} 7+8i & 9+10i & 11+12i \end{bmatrix}^\dagger \end{bmatrix}
\end{aligned} \tag{1.1.53}$$

$$
\begin{aligned}
\left(\begin{bmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} 1+2i & 3+4i & 5+6i \\ 7+8i & 9+10i & 11+12i \end{bmatrix}\right)^{\dagger} &= \begin{bmatrix} 8-7i & 10-9i & 12-11i \\ -2+i & -4+3i & -6+5i \end{bmatrix}^{\dagger} \\
&= \begin{bmatrix} 8+7i & -2-i \\ 10+9i & -4-3i \\ 12+11i & -6-5i \end{bmatrix} \\
\begin{bmatrix} 1+2i & 3+4i & 5+6i \\ 7+8i & 9+10i & 11+12i \end{bmatrix}^{\dagger}\begin{bmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{bmatrix}^{\dagger} &= \begin{bmatrix} 1-2i & 7-8i \\ 3-4i & 9-10i \\ 5-6i & 11-12i \end{bmatrix}\begin{bmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{bmatrix} \\
&= \begin{bmatrix} 8+7i & -2-i \\ 10+9i & -4-3i \\ 12+11i & -6-5i \end{bmatrix}
\end{aligned}
\tag{1.1.54}
$$

==========

1.2 行列の基本変形

1.2.1 線形独立と線形従属

n 個の m 次元列ベクトル $\boldsymbol{a}_1, \cdots, \boldsymbol{a}_n$ と n 個の複素数 $c_1, \cdots, c_n$ による

$$
c_1\boldsymbol{a}_1 + \cdots + c_n\boldsymbol{a}_n \tag{1.2.1}
$$

の形を $\boldsymbol{a}_1, \cdots, \boldsymbol{a}_n$ の**線形結合**という。$\boldsymbol{a}_1, \cdots, \boldsymbol{a}_n$ の線形結合の全体を

$$
\mathrm{span}(\boldsymbol{a}_1, \cdots, \boldsymbol{a}_n) \tag{1.2.2}
$$

と表し，$\boldsymbol{a}_1, \cdots, \boldsymbol{a}_n$ の**線形包**という[10]。また，$\boldsymbol{a}_1, \cdots, \boldsymbol{a}_n$ は $\mathrm{span}(\boldsymbol{a}_1, \cdots, \boldsymbol{a}_n)$ を**張る**, あるいは, $\mathrm{span}(\boldsymbol{a}_1, \cdots, \boldsymbol{a}_n)$ は $\boldsymbol{a}_1, \cdots, \boldsymbol{a}_n$ によって**張られる**という。$\boldsymbol{a}_1, \cdots, \boldsymbol{a}_n$ のすべてについて

$$
\boldsymbol{a}_i \notin \mathrm{span}(\boldsymbol{a}_1, \overset{\text{no } \boldsymbol{a}_i}{\cdots\cdots}, \boldsymbol{a}_n) \tag{1.2.3}
$$

が成り立つとき，$\boldsymbol{a}_1, \cdots, \boldsymbol{a}_n$ は**線形独立**または**一次独立**であるという[11]。そうでないとき，$\boldsymbol{a}_1, \cdots, \boldsymbol{a}_n$ は**線形従属**または**一次従属**であるという。言い換えると，$\boldsymbol{a}_1, \cdots, \boldsymbol{a}_n$ が線形独立であるとは，それらの線形結合について，

$$
c_1\boldsymbol{a}_1 + \cdots + c_n\boldsymbol{a}_n = \boldsymbol{0} \quad \Leftrightarrow \quad c_1 = 0, \cdots, c_n = 0 \tag{1.2.4}
$$

[10]線形包を表す記号として $[\,\boldsymbol{a}_1, \cdots, \boldsymbol{a}_n\,]$ や $L(\boldsymbol{a}_1, \cdots, \boldsymbol{a}_n)$ なども使われます。

[11](1.2.3) の $\boldsymbol{a}_1, \overset{\text{no } \boldsymbol{a}_i}{\cdots\cdots}, \boldsymbol{a}_n$ は $\boldsymbol{a}_1, \cdots, \boldsymbol{a}_n$ の並びの中に $\boldsymbol{a}_i$ がないこと，つまり，$\boldsymbol{a}_1, \cdots, \boldsymbol{a}_{i-1}, \boldsymbol{a}_{i+1}, \cdots, \boldsymbol{a}_n$ を表します。本書では，i 番目がないことを示すために，このような表し方を用いることにします。

あるいは

$$c_1\boldsymbol{a}_1 + \cdots + c_n\boldsymbol{a}_n = c'_1\boldsymbol{a}_1 + \cdots + c'_n\boldsymbol{a}_n \quad \Leftrightarrow \quad c_1 = c'_1, \cdots, c_n = c'_n \tag{1.2.5}$$

であることをいい，$\boldsymbol{a}_1, \cdots, \boldsymbol{a}_n$ が線形従属であるとは，それらの線形結合について，

$$c_1, \cdots, c_n \text{の中に} 0 \text{でないものがあっても} c_1\boldsymbol{a}_1 + \cdots + c_n\boldsymbol{a}_n = \boldsymbol{0} \text{が成り立つ} \tag{1.2.6}$$

あるいは

$$c_i \neq c'_i \text{のものがあっても} c_1\boldsymbol{a}_1 + \cdots + c_n\boldsymbol{a}_n = c'_1\boldsymbol{a}_1 + \cdots + c'_n\boldsymbol{a}_n \text{が成り立つ} \tag{1.2.7}$$

ことをいう[12]。行ベクトルの線形独立と線形従属も同様に定義する。

==========

補足・計算例 4.

線形独立・線形従属の意味

$\boldsymbol{a}_1, \cdots, \boldsymbol{a}_n$ が線形独立の場合，これらのうちどの一つが欠落しても，$\mathrm{span}(\boldsymbol{a}_1, \overset{\text{no } \boldsymbol{a}_i}{\cdots\cdots}, \boldsymbol{a}_n)$ $(i = 1, \cdots, n)$ は $\mathrm{span}(\boldsymbol{a}_1, \cdots, \boldsymbol{a}_n)$ よりも小さくなってしまう。つまり，$\boldsymbol{a}_1, \cdots, \boldsymbol{a}_n$ のすべてについて $\mathrm{span}(\boldsymbol{a}_1, \overset{\text{no } \boldsymbol{a}_i}{\cdots\cdots}, \boldsymbol{a}_n) \subsetneq \mathrm{span}(\boldsymbol{a}_1, \cdots, \boldsymbol{a}_n)$ である。言い換えると，$\boldsymbol{a}_1, \cdots, \boldsymbol{a}_n$ が線形独立であるとは，$\mathrm{span}(\boldsymbol{a}_1, \cdots, \boldsymbol{a}_n)$ を張るのに $\boldsymbol{a}_1, \cdots, \boldsymbol{a}_n$ のすべてが必要であることをいう。これに対し，$\boldsymbol{a}_1, \cdots, \boldsymbol{a}_n$ が線形従属の場合，$\boldsymbol{a}_1, \cdots, \boldsymbol{a}_n$ の中に $\mathrm{span}(\boldsymbol{a}_1, \overset{\text{no } \boldsymbol{a}_i}{\cdots\cdots}, \boldsymbol{a}_n) = \mathrm{span}(\boldsymbol{a}_1, \cdots, \boldsymbol{a}_n)$ となる $\boldsymbol{a}_i$ が存在する。言い換えると，$\boldsymbol{a}_1, \cdots, \boldsymbol{a}_n$ が線形従属であるとは，$\mathrm{span}(\boldsymbol{a}_1, \cdots, \boldsymbol{a}_n)$ を張るのに $\boldsymbol{a}_1, \cdots, \boldsymbol{a}_n$ のすべては必要でないことをいう。

==========

1.2.2 行列の基本変形と簡約階段形

n 個の m 次元列ベクトル $\boldsymbol{a}_1, \cdots, \boldsymbol{a}_n$ が線形従属の場合はこのうちのいくつかを他の列ベクトルの線形結合で表せる。そこで，$\boldsymbol{a}_1, \cdots, \boldsymbol{a}_n$ を並べて

$$A = [\, \boldsymbol{a}_1 \ \cdots \ \boldsymbol{a}_n \,] \tag{1.2.8}$$

とおき，A に対して次の (1)-(3) の**列基本変形**[13]を行って可能な限り零列ベクトルをつくりだすことにより，$\mathrm{span}(\boldsymbol{a}_1, \cdots, \boldsymbol{a}_n)$ を張るのに必要な最小の列ベクトルの組を見出すことができる。

[12] (1.2.5) は**係数比較法**の根拠となる性質です。
[13] 列基本変形は右基本変形ともいいます。

(1) 第 i 列を $\lambda(\neq 0)$ 倍する。

$$[\,\boldsymbol{a}_1 \cdots \boldsymbol{a}_i \cdots \boldsymbol{a}_n\,] \to [\,\boldsymbol{a}_1 \cdots \lambda\boldsymbol{a}_i \cdots \boldsymbol{a}_n\,] \tag{1.2.9}$$

(2) 第 i 列に第 j 列の λ 倍を加える。

$$[\,\boldsymbol{a}_1 \cdots \boldsymbol{a}_i \cdots \boldsymbol{a}_j \cdots \boldsymbol{a}_n\,] \to [\,\boldsymbol{a}_1 \cdots \boldsymbol{a}_i + \lambda\boldsymbol{a}_j \cdots \boldsymbol{a}_j \cdots \boldsymbol{a}_n\,] \tag{1.2.10}$$

(3) 第 i 列と第 j 列を交換する。

$$[\,\boldsymbol{a}_1 \cdots \boldsymbol{a}_i \cdots \boldsymbol{a}_j \cdots \boldsymbol{a}_n\,] \to [\,\boldsymbol{a}_1 \cdots \boldsymbol{a}_j \cdots \boldsymbol{a}_i \cdots \boldsymbol{a}_n\,] \tag{1.2.11}$$

行列 $A = [\,\boldsymbol{a}_1 \cdots \boldsymbol{a}_n\,]$ に対して列基本変形を行った結果,

$$A' = \begin{bmatrix} 1 & & & & & \\ * & & & & & \\ 0 & 1 & & & & \\ * & * & & & & \\ 0 & 0 & \cdots & 1 & & \\ * & * & \cdots & * & & \\ 0 & 0 & \cdots & 0 & 1 & \\ * & * & \cdots & * & * & \end{bmatrix} \tag{1.2.12}$$

$$\underbrace{\qquad\qquad\qquad}_{r\text{ 列}}\ \underbrace{\qquad\qquad}_{n-r\text{ 列}}$$

が得られたとする。ここで，$*$ は適当な数が縦に並んでいることを表し，また，空白のところはすべて 0 であることを表す。このような形を**列簡約階段形**という。**行基本変形**[14]や**行簡約階段形**についても同様に定義する[15]。列簡約階段形と行簡約階段形を**簡約階段形**という。

==========

補足・計算例 5.

列簡約階段形の定義

行列の第 1 列から第 r 列は零列ベクトルでない列ベクトルが並び，第 $r+1$ 列から第 n 列は零列ベクトルが並ぶとする。さらに，第 j 列 $(j = 1, \cdots, r)$ の成分を上から順にみていくとき，0 でない最初の成分は 1 であり，それが現れるのは第 $i(j)$ 行であるとする。このとき，$i(1) < i(2) < \cdots < i(r)$

[14]行基本変形は左基本変形ともいいます。

[15]任意の行列はいわゆる基本行列によって行簡約階段形，列簡約階段形へ変形することができます。簡単な説明を §2.5.2 で述べますが，詳細については参考文献を参照してください。

であり，第 $i(j)$ 行において $(i(j), j)$ 成分が 1，それ以外の成分はすべて 0 であるような行列の形を列簡約階段形という。

==========

(1.2.12) を

$$A' = [\underbrace{\boldsymbol{a}'_1 \cdots \boldsymbol{a}'_r}_{r\text{ 列}} \underbrace{\boldsymbol{0} \cdots \boldsymbol{0}}_{n-r\text{ 列}}] \tag{1.2.13}$$

と表すと，$\boldsymbol{a}'_1, \cdots, \boldsymbol{a}'_r$ は明らかに線形独立である[16]。したがって，$\boldsymbol{a}'_1, \cdots, \boldsymbol{a}'_r$ が $\mathrm{span}(\boldsymbol{a}_1, \cdots, \boldsymbol{a}_n)$ を張るのに必要な最小の列ベクトルの組であることがわかる。つまり，r は

$$\mathrm{span}(\boldsymbol{a}_1, \cdots, \boldsymbol{a}_n) = \mathrm{span}(\boldsymbol{a}'_1, \cdots, \boldsymbol{a}'_r) \tag{1.2.14}$$

を満たす最小の整数である。r を行列 A の**階数**といい, $r = \mathrm{rank}\, A$ と表す。$\boldsymbol{a}_1, \cdots, \boldsymbol{a}_n$ は $r = n$ ならば線形独立であり，$r < n$ ならば線形従属である。また，r が n を超えないことはいうまでもないが，列簡約階段形の形状からわかるように r は m を超えることもない。つまり，

$$n \text{ 個の } m \text{ 次元列ベクトルのうち線形独立なものの数} \leq \min(m, n) \tag{1.2.15}$$

である。ここで，$\min(\cdots)$ は数の組 $\cdots$ の最小値を表す記号である。特に，

$$n \text{ 個の } n \text{ 次元列ベクトルのうち線形独立なものの数} \leq n \tag{1.2.16}$$

である。

==========

補足・計算例 6.

行列の基本変形

例えば，第 3 列を 1/2 倍することを ③ := 1/2 ×③，第 2 列に第 1 列の 2 倍を加えることを ② += 2 ×①，第 1 列と第 2 列を交換することを ① ↔ ② などのように表すことにする。

[16] それぞれの $\boldsymbol{a}'_i$ の最も上にある 1 の行をみると，これ以外はすべて 0 となっていることから，$\boldsymbol{a}'_1, \cdots, \boldsymbol{a}'_r$ が線形独立であることは明らかです。

例 1：列基本変形による列簡約階段形への変形

$$
\begin{aligned}
A = \begin{bmatrix} 1 & -2 & 3 & 1 \\ 2 & -3 & 6 & 0 \\ 0 & -5 & 0 & 10 \\ -3 & 6 & -7 & -3 \\ 0 & 3 & 4 & -6 \end{bmatrix}
&\xrightarrow{②+=2\times①}
\begin{bmatrix} 1 & 0 & 3 & 1 \\ 2 & 1 & 6 & 0 \\ 0 & -5 & 0 & 10 \\ -3 & 0 & -7 & -3 \\ 0 & 3 & 4 & -6 \end{bmatrix}
\xrightarrow{③+=-3\times①}
\begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 1 \\ 2 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & -5 & 0 & 10 \\ -3 & 0 & 2 & -3 \\ 0 & 3 & 4 & -6 \end{bmatrix} \\
&\xrightarrow{④+=-1\times①}
\begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 2 & 1 & 0 & -2 \\ 0 & -5 & 0 & 10 \\ -3 & 0 & 2 & 0 \\ 0 & 3 & 4 & -6 \end{bmatrix}
\xrightarrow{④+=2\times②}
\begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 2 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & -5 & 0 & 0 \\ -3 & 0 & 2 & 0 \\ 0 & 3 & 4 & 0 \end{bmatrix}
\xrightarrow{③:=1/2\times③}
\begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 2 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & -5 & 0 & 0 \\ -3 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 3 & 2 & 0 \end{bmatrix} \\
&\xrightarrow{①+=3\times③}
\begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 2 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & -5 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 6 & 3 & 2 & 0 \end{bmatrix}
\xrightarrow{①+=-2\times②}
\begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 10 & -5 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 3 & 2 & 0 \end{bmatrix}
\qquad \therefore \operatorname{rank} A = 3
\end{aligned}
\tag{1.2.17}
$$

例 2：行基本変形による行簡約階段形への変形

$$
\begin{aligned}
A = \begin{bmatrix} 1 & -2 & 3 & 1 \\ 2 & -3 & 6 & 0 \\ 0 & -5 & 0 & 10 \\ -3 & 6 & -7 & -3 \\ 0 & 3 & 4 & -6 \end{bmatrix}
&\xrightarrow{②+=-2\times①}
\begin{bmatrix} 1 & -2 & 3 & 1 \\ 0 & 1 & 0 & -2 \\ 0 & -5 & 0 & 10 \\ -3 & 6 & -7 & -3 \\ 0 & 3 & 4 & -6 \end{bmatrix}
\xrightarrow{④+=3\times①}
\begin{bmatrix} 1 & -2 & 3 & 1 \\ 0 & 1 & 0 & -2 \\ 0 & -5 & 0 & 10 \\ 0 & 0 & 2 & 0 \\ 0 & 3 & 4 & -6 \end{bmatrix} \\
&\xrightarrow{③+=5\times②}
\begin{bmatrix} 1 & -2 & 3 & 1 \\ 0 & 1 & 0 & -2 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 2 & 0 \\ 0 & 3 & 4 & -6 \end{bmatrix}
\xrightarrow{⑤+=-3\times②}
\begin{bmatrix} 1 & -2 & 3 & 1 \\ 0 & 1 & 0 & -2 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 2 & 0 \\ 0 & 0 & 4 & 0 \end{bmatrix}
\xrightarrow{③\leftrightarrow④}
\begin{bmatrix} 1 & -2 & 3 & 1 \\ 0 & 1 & 0 & -2 \\ 0 & 0 & 2 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 4 & 0 \end{bmatrix} \\
&\xrightarrow{③:=1/2\times③}
\begin{bmatrix} 1 & -2 & 3 & 1 \\ 0 & 1 & 0 & -2 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 4 & 0 \end{bmatrix}
\xrightarrow{⑤+=-4\times③}
\begin{bmatrix} 1 & -2 & 3 & 1 \\ 0 & 1 & 0 & -2 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}
\xrightarrow{①+=-3\times③}
\begin{bmatrix} 1 & -2 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 & -2 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \\
&\xrightarrow{①+=2\times②}
\begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & -3 \\ 0 & 1 & 0 & -2 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}
\qquad \therefore \operatorname{rank} A = 3
\end{aligned}
\tag{1.2.18}
$$

==========

1.3 基底・双対基底・射影・完全性関係

1.3.1 列ベクトル空間と行ベクトル空間

第 i 成分が 1 でそれ以外の成分はすべて 0 であるような n 次元列ベクトルを $\boldsymbol{e}_i$ とする。つまり，

$$\boldsymbol{e}_i = \begin{bmatrix} 0 \\ \vdots \\ 0 \\ 1 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{bmatrix} \leftarrow \text{第 } i \text{ 成分} \tag{1.3.1}$$

である。このとき，$\boldsymbol{e}_1, \cdots, \boldsymbol{e}_n$ は線形独立であり，

$$V = \mathrm{span}(\boldsymbol{e}_1, \cdots, \boldsymbol{e}_n) \tag{1.3.2}$$

を $\boldsymbol{e}_1, \cdots, \boldsymbol{e}_n$ によって張られる**列ベクトル空間**という。また，$e = \{\boldsymbol{e}_1, \cdots, \boldsymbol{e}_n\}$ を V の**標準基底**という。任意の n 次元列ベクトル $\boldsymbol{a}$ は，標準基底 e により，

$$\boldsymbol{a} = a_1\boldsymbol{e}_1 + \cdots + a_n\boldsymbol{e}_n = \begin{bmatrix} \boldsymbol{e}_1 & \cdots & \boldsymbol{e}_n \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a_1 \\ \vdots \\ a_n \end{bmatrix} \tag{1.3.3}$$

と表される。n を V の**次元**といい，$n = \dim V$ と表す。V の任意の 2 つの列ベクトル $\boldsymbol{a}$，$\boldsymbol{b}$ について，$\boldsymbol{a} + \boldsymbol{b}$ も V の元である。また，任意の列ベクトル $\boldsymbol{a}$ のスカラー倍 $\lambda\boldsymbol{a}$ も V の元である。つまり，V は列ベクトルの和とスカラー倍について閉じている。V の部分集合 W が和とスカラー倍について閉じているとき，W は V の**部分空間**であるという。n 個の n 次元列ベクトルの組 $\boldsymbol{p}_1, \cdots, \boldsymbol{p}_n$ が線形独立のとき，

$$V = \mathrm{span}(\boldsymbol{e}_1, \cdots, \boldsymbol{e}_n) = \mathrm{span}(\boldsymbol{p}_1, \cdots, \boldsymbol{p}_n) \tag{1.3.4}$$

が成り立つ。このとき，$p = \{\boldsymbol{p}_1, \cdots, \boldsymbol{p}_n\}$ は V の**基底**であるという。

[(1.3.4) の証明] $\mathrm{span}(\boldsymbol{e}_1, \cdots, \boldsymbol{e}_n) \supseteq \mathrm{span}(\boldsymbol{p}_1, \cdots, \boldsymbol{p}_n)$ は明らかなので，$\mathrm{span}(\boldsymbol{e}_1, \cdots, \boldsymbol{e}_n) \subseteq \mathrm{span}(\boldsymbol{p}_1, \cdots, \boldsymbol{p}_n)$ を示せばよい。(1.2.15) より線形独立な n 次元列ベクトルの組を構成する列ベクトルの数は n を超えないから，$\boldsymbol{p}_1, \cdots, \boldsymbol{p}_n$ に $\boldsymbol{e}_i$ $(i = 1, \cdots, n)$ を加

えた $n+1$ 個の n 次元列ベクトルの組 $\boldsymbol{p}_1, \cdots, \boldsymbol{p}_n, \boldsymbol{e}_i$ は線形従属である。したがって，$\boldsymbol{e}_i$ は $\boldsymbol{p}_1, \cdots, \boldsymbol{p}_n$ の線形結合で表される。つまり，

$$[\,\boldsymbol{e}_1 \cdots \boldsymbol{e}_n\,] = [\,\boldsymbol{p}_1 \cdots \boldsymbol{p}_n\,]Q \tag{1.3.5}$$

を満たす n 次正方行列 Q が存在する。したがって，$\mathrm{span}(\boldsymbol{e}_1, \cdots, \boldsymbol{e}_n)$ の任意の列ベクトル $\boldsymbol{c} = c_1\boldsymbol{e}_1 + \cdots + c_n\boldsymbol{e}_n$ は

$$\boldsymbol{c} = [\,\boldsymbol{e}_1 \cdots \boldsymbol{e}_n\,]\begin{bmatrix} c_1 \\ \vdots \\ c_n \end{bmatrix} = [\,\boldsymbol{p}_1 \cdots \boldsymbol{p}_n\,]\begin{bmatrix} c'_1 \\ \vdots \\ c'_n \end{bmatrix} \quad \text{ここで，} \begin{bmatrix} c'_1 \\ \vdots \\ c'_n \end{bmatrix} = Q\begin{bmatrix} c_1 \\ \vdots \\ c_n \end{bmatrix} \tag{1.3.6}$$

と表される。つまり，$\mathrm{span}(\boldsymbol{e}_1, \cdots, \boldsymbol{e}_n) \subseteq \mathrm{span}(\boldsymbol{p}_1, \cdots, \boldsymbol{p}_n)$ である。よって，(1.3.4) が成り立つ。 ■

第 i 成分が 1 でそれ以外の成分はすべて 0 であるような n 次元行ベクトルを $\boldsymbol{\varepsilon}_i$ とする。つまり，

$$\begin{aligned} \boldsymbol{\varepsilon}_i = [\,0 \cdots 0\,1\,0 \cdots 0\,] \\ \uparrow \text{第 } i \text{ 成分} \end{aligned} \tag{1.3.7}$$

である。このとき，$\boldsymbol{\varepsilon}_1, \cdots, \boldsymbol{\varepsilon}_n$ は線形独立であり，

$$V^* = \mathrm{span}(\boldsymbol{\varepsilon}_1, \cdots, \boldsymbol{\varepsilon}_n) \tag{1.3.8}$$

を $\boldsymbol{\varepsilon}_1, \cdots, \boldsymbol{\varepsilon}_n$ によって張られる**行ベクトル空間**という。このとき，$\varepsilon = \{\boldsymbol{\varepsilon}_1, \cdots, \boldsymbol{\varepsilon}_n\}$ は V^* の標準基底となる。標準基底 ε を標準基底 e の**標準双対基底**という。任意の n 次元行ベクトル $\boldsymbol{\alpha}$ は，標準双対基底 ε により，

$$\boldsymbol{\alpha} = \alpha_1\boldsymbol{\varepsilon}_1 + \cdots + \alpha_n\boldsymbol{\varepsilon}_n = [\;\alpha_1 \;\; \cdots \;\; \alpha_n\;]\begin{bmatrix} \boldsymbol{\varepsilon}_1 \\ \vdots \\ \boldsymbol{\varepsilon}_n \end{bmatrix} \tag{1.3.9}$$

と表される。V^* の次元も，V と同じく，$n = \dim V^*$ である。標準基底 e と標準双対基底 ε の間には

$$\boldsymbol{\varepsilon}_i\boldsymbol{e}_j = \delta_{ij} \tag{1.3.10}$$

の関係が成り立つ。ここで，

$$\delta_{ij} = \begin{cases} 1 & (i = j) \\ 0 & (i \neq j) \end{cases} \tag{1.3.11}$$

は**クロネッカーのデルタ**である。

==========

補足・計算例 7.

標準基底
$e = \{\boldsymbol{e}_1, \boldsymbol{e}_2, \boldsymbol{e}_3\}$

$$\boldsymbol{e}_1 = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} \quad \boldsymbol{e}_2 = \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{bmatrix} \quad \boldsymbol{e}_3 = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{bmatrix} \tag{1.3.12}$$

$$\boldsymbol{a} = a_1\boldsymbol{e}_1 + a_2\boldsymbol{e}_2 + a_3\boldsymbol{e}_3 = a_1 \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} + a_2 \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{bmatrix} + a_3 \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} a_1 \\ a_2 \\ a_3 \end{bmatrix} \tag{1.3.13}$$

標準双対基底
$\varepsilon = \{\boldsymbol{\varepsilon}_1, \boldsymbol{\varepsilon}_2, \boldsymbol{\varepsilon}_3\}$

$$\boldsymbol{\varepsilon}_1 = [\,1\;0\;0\,] \quad \boldsymbol{\varepsilon}_2 = [\,0\;1\;0\,] \quad \boldsymbol{\varepsilon}_3 = [\,0\;0\;1\,] \tag{1.3.14}$$

$$\boldsymbol{\alpha} = \alpha_1\boldsymbol{\varepsilon}_1 + \alpha_2\boldsymbol{\varepsilon}_2 + \alpha_3\boldsymbol{\varepsilon}_3 = \alpha_1[\,1\;0\;0\,] + \alpha_2[\,0\;1\;0\,] + \alpha_3[\,0\;0\;1\,] = [\,\alpha_1\;\alpha_2\;\alpha_3\,] \tag{1.3.15}$$

標準基底と標準双対基底のペアリング

$$\boldsymbol{\varepsilon}_1\boldsymbol{e}_1 = [\,1\;0\;0\,] \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} = 1 \cdot 1 + 0 \cdot 0 + 0 \cdot 0 = 1 \qquad \boldsymbol{\varepsilon}_1\boldsymbol{e}_2 = [\,1\;0\;0\,] \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{bmatrix} = 1 \cdot 0 + 0 \cdot 1 + 0 \cdot 0 = 0$$

etc.
(1.3.16)

==========

1.3.2 単位行列

§1.1.2 ですでに述べたように，対角成分がすべて 1 でその他の成分がすべて 0 の n 次正方行列

$$I = \begin{bmatrix} 1 & & O \\ & \ddots & \\ O & & 1 \end{bmatrix} \tag{1.3.17}$$

を n 次の**単位行列**という。次数を明示する場合は I_n と表すことにする。単位行列はもう一つの行列との積が定義できるとき，積をとってもその行列を変えないという性質をもつ。I は標準基底 $e = \{\boldsymbol{e}_1, \cdots, \boldsymbol{e}_n\}$ を用いて，

$$I = [\, \boldsymbol{e}_1 \ \cdots \ \boldsymbol{e}_n \,] \tag{1.3.18}$$

と書ける。また，標準双対基底 $\varepsilon = \{\boldsymbol{\varepsilon}_1, \cdots, \boldsymbol{\varepsilon}_n\}$ を用いて，

$$I = \begin{bmatrix} \boldsymbol{\varepsilon}_1 \\ \vdots \\ \boldsymbol{\varepsilon}_n \end{bmatrix} \tag{1.3.19}$$

と書ける。$I = I^2$ より，

$$I = \begin{bmatrix} \boldsymbol{\varepsilon}_1 \\ \vdots \\ \boldsymbol{\varepsilon}_n \end{bmatrix} [\, \boldsymbol{e}_1 \ \cdots \ \boldsymbol{e}_n \,] = \begin{bmatrix} \boldsymbol{\varepsilon}_1 \boldsymbol{e}_1 & \cdots & \boldsymbol{\varepsilon}_1 \boldsymbol{e}_n \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \boldsymbol{\varepsilon}_n \boldsymbol{e}_1 & \cdots & \boldsymbol{\varepsilon}_n \boldsymbol{e}_n \end{bmatrix} \tag{1.3.20}$$

および

$$I = [\, \boldsymbol{e}_1 \ \cdots \ \boldsymbol{e}_n \,] \begin{bmatrix} \boldsymbol{\varepsilon}_1 \\ \vdots \\ \boldsymbol{\varepsilon}_n \end{bmatrix} = \boldsymbol{e}_1 \boldsymbol{\varepsilon}_1 + \cdots + \boldsymbol{e}_n \boldsymbol{\varepsilon}_n \tag{1.3.21}$$

を得る[17]。また，任意の (m, n) 行列 A は

$$\begin{aligned} A &= [\, \boldsymbol{a}_1 \ \cdots \ \boldsymbol{a}_n \,] = \boldsymbol{a}_1 \boldsymbol{\varepsilon}_1 + \cdots + \boldsymbol{a}_n \boldsymbol{\varepsilon}_n \\ &= \begin{bmatrix} \boldsymbol{\alpha}_1 \\ \vdots \\ \boldsymbol{\alpha}_m \end{bmatrix} = \boldsymbol{e}_1 \boldsymbol{\alpha}_1 + \cdots + \boldsymbol{e}_m \boldsymbol{\alpha}_m \end{aligned} \tag{1.3.22}$$

と表せる。

[(1.3.22) の証明] (1.3.19) より，

$$A = AI_n = [\, \boldsymbol{a}_1 \ \cdots \ \boldsymbol{a}_n \,] \begin{bmatrix} \boldsymbol{\varepsilon}_1 \\ \vdots \\ \boldsymbol{\varepsilon}_n \end{bmatrix} = \boldsymbol{a}_1 \boldsymbol{\varepsilon}_1 + \cdots + \boldsymbol{a}_n \boldsymbol{\varepsilon}_n \tag{1.3.23}$$

[17] (1.3.21) は §1.3.5 で述べる完全性関係の特別な場合になっています。

を得る。また，(1.3.18) より，

$$A = I_m A = [\,\boldsymbol{e}_1 \cdots \boldsymbol{e}_m\,]\begin{bmatrix}\boldsymbol{\alpha}_1\\ \vdots \\ \boldsymbol{\alpha}_m\end{bmatrix} = \boldsymbol{e}_1\boldsymbol{\alpha}_1 + \cdots + \boldsymbol{e}_m\boldsymbol{\alpha}_m \tag{1.3.24}$$

を得る。 ■

==========

補足・計算例 8.

単位行列

$e = \{\boldsymbol{e}_1, \boldsymbol{e}_2, \boldsymbol{e}_3\}$

$$\boldsymbol{e}_1 = \begin{bmatrix}1\\0\\0\end{bmatrix} \quad \boldsymbol{e}_2 = \begin{bmatrix}0\\1\\0\end{bmatrix} \quad \boldsymbol{e}_3 = \begin{bmatrix}0\\0\\1\end{bmatrix} \qquad I = [\,\boldsymbol{e}_1\,\boldsymbol{e}_2\,\boldsymbol{e}_3\,] = \begin{bmatrix}1&0&0\\0&1&0\\0&0&1\end{bmatrix} \tag{1.3.25}$$

$\varepsilon = \{\boldsymbol{\varepsilon}_1, \boldsymbol{\varepsilon}_2, \boldsymbol{\varepsilon}_3\}$

$$\boldsymbol{\varepsilon}_1 = [\,1\,0\,0\,] \quad \boldsymbol{\varepsilon}_2 = [\,0\,1\,0\,] \quad \boldsymbol{\varepsilon}_3 = [\,0\,0\,1\,] \qquad I = \begin{bmatrix}\boldsymbol{\varepsilon}_1\\ \boldsymbol{\varepsilon}_2\\ \boldsymbol{\varepsilon}_3\end{bmatrix} = \begin{bmatrix}1&0&0\\0&1&0\\0&0&1\end{bmatrix} \tag{1.3.26}$$

$I = I^2$

$$I = \begin{bmatrix}\boldsymbol{\varepsilon}_1\\ \boldsymbol{\varepsilon}_2\\ \boldsymbol{\varepsilon}_3\end{bmatrix}[\,\boldsymbol{e}_1\,\boldsymbol{e}_2\,\boldsymbol{e}_3\,] = \begin{bmatrix}\boldsymbol{\varepsilon}_1\boldsymbol{e}_1 & \boldsymbol{\varepsilon}_1\boldsymbol{e}_2 & \boldsymbol{\varepsilon}_1\boldsymbol{e}_3\\ \boldsymbol{\varepsilon}_2\boldsymbol{e}_1 & \boldsymbol{\varepsilon}_2\boldsymbol{e}_2 & \boldsymbol{\varepsilon}_1\boldsymbol{e}_3\\ \boldsymbol{\varepsilon}_3\boldsymbol{e}_1 & \boldsymbol{\varepsilon}_3\boldsymbol{e}_2 & \boldsymbol{\varepsilon}_1\boldsymbol{e}_3\end{bmatrix} = \begin{bmatrix}1&0&0\\0&1&0\\0&0&1\end{bmatrix} \tag{1.3.27}$$

$$\begin{aligned} I = [\,\boldsymbol{e}_1\,\boldsymbol{e}_2\,\boldsymbol{e}_3\,]\begin{bmatrix}\boldsymbol{\varepsilon}_1\\ \boldsymbol{\varepsilon}_2\\ \boldsymbol{\varepsilon}_3\end{bmatrix} &= \boldsymbol{e}_1\boldsymbol{\varepsilon}_1 + \boldsymbol{e}_2\boldsymbol{\varepsilon}_2 + \boldsymbol{e}_3\boldsymbol{\varepsilon}_3 = \begin{bmatrix}1\\0\\0\end{bmatrix}[\,1\,0\,0\,] + \begin{bmatrix}0\\1\\0\end{bmatrix}[\,0\,1\,0\,] + \begin{bmatrix}0\\0\\1\end{bmatrix}[\,0\,0\,1\,] \\ &= \begin{bmatrix}1&0&0\\0&0&0\\0&0&0\end{bmatrix} + \begin{bmatrix}0&0&0\\0&1&0\\0&0&0\end{bmatrix} + \begin{bmatrix}0&0&0\\0&0&0\\0&0&1\end{bmatrix} = \begin{bmatrix}1&0&0\\0&1&0\\0&0&1\end{bmatrix} \end{aligned} \tag{1.3.28}$$

$A = \boldsymbol{a}_1\boldsymbol{\varepsilon}_1 + \boldsymbol{a}_2\boldsymbol{\varepsilon}_2 + \boldsymbol{a}_3\boldsymbol{\varepsilon}_3 = \boldsymbol{e}_1\boldsymbol{\alpha}_1 + \boldsymbol{e}_2\boldsymbol{\alpha}_2$

$$\begin{aligned} &\boldsymbol{e}_1 = \begin{bmatrix}1\\0\end{bmatrix} \quad \boldsymbol{e}_2 = \begin{bmatrix}0\\1\end{bmatrix} \qquad \boldsymbol{\varepsilon}_1 = [\,1\,0\,0\,] \quad \boldsymbol{\varepsilon}_2 = [\,0\,1\,0\,] \quad \boldsymbol{\varepsilon}_3 = [\,0\,0\,1\,] \\ &A = \begin{bmatrix}1&2&3\\4&5&6\end{bmatrix} = [\,\boldsymbol{a}_1\,\boldsymbol{a}_2\,\boldsymbol{a}_3\,] = \begin{bmatrix}1\\4\end{bmatrix}[\,1\,0\,0\,] + \begin{bmatrix}2\\5\end{bmatrix}[\,0\,1\,0\,] + \begin{bmatrix}3\\6\end{bmatrix}[\,0\,0\,1\,] \\ &\qquad = \begin{bmatrix}\boldsymbol{\alpha}_1\\ \boldsymbol{\alpha}_2\end{bmatrix} = \begin{bmatrix}1\\0\end{bmatrix}[\,1\,2\,3\,] + \begin{bmatrix}0\\1\end{bmatrix}[\,4\,5\,6\,] \end{aligned} \tag{1.3.29}$$

==========

1.3.3 正則行列

§1.1.2 ですでに述べたように，n 次正方行列 P に対し $PQ = QP = I$ を満たす n 次正方行列 Q が存在するとき，P は**正則**あるいは**正則行列**であるという。$Q = P^{-1}$ と表し，P^{-1} を P の**逆行列**という。$Q^{-1} = P$ であるから，$(P^{-1})^{-1} = P$ である。単位行列 I の逆行列は，$I^2 = I$ より，$I^{-1} = I$ である。正則行列の積の逆行列はそれぞれの逆行列の逆順の積となる。例えば，正則行列 A，B，C の積 ABC の逆行列は $(ABC)^{-1} = C^{-1}B^{-1}A^{-1}$ である。正則行列 P のエルミート共役について $(P^\dagger)^{-1} = (P^{-1})^\dagger$ である。正則行列の重要な性質として，

$$(1)\ P = [\,\boldsymbol{p}_1 \cdots \boldsymbol{p}_n\,] \text{ は正則} \quad \Leftrightarrow \quad (2)\ \boldsymbol{p}_1, \cdots, \boldsymbol{p}_n \text{は線形独立} \tag{1.3.30}$$

が成り立つ。このとき，$p = \{\boldsymbol{p}_1, \cdots, \boldsymbol{p}_n\}$ は $V = \mathrm{span}(\boldsymbol{e}_1, \cdots, \boldsymbol{e}_n)$ の基底となる。[(1.3.30) の証明] まず，(1) $\Rightarrow$ (2) を示す。$\boldsymbol{p}_1, \cdots, \boldsymbol{p}_n$ の線形結合 $\boldsymbol{c} = c_1\boldsymbol{p}_1 + \cdots + c_n\boldsymbol{p}_n$ が零ベクトルに等しい，つまり，

$$\boldsymbol{c} = [\,\boldsymbol{p}_1 \cdots \boldsymbol{p}_n\,] \begin{bmatrix} c_1 \\ \vdots \\ c_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ \vdots \\ 0 \end{bmatrix} \tag{1.3.31}$$

とすると，(1.3.31) の左から P の逆行列 P^{-1} を掛けることにより，

$$\begin{bmatrix} c_1 \\ \vdots \\ c_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ \vdots \\ 0 \end{bmatrix} \tag{1.3.32}$$

を得る。よって，(1) $\Rightarrow$ (2) が成り立つ。次に，(2) $\Rightarrow$ (1) を示す。$\boldsymbol{p}_1, \cdots, \boldsymbol{p}_n$ が線形独立のとき，$V = \mathrm{span}(\boldsymbol{e}_1, \cdots, \boldsymbol{e}_n) = \mathrm{span}(\boldsymbol{p}_1, \cdots, \boldsymbol{p}_n)$ であるから，V から V への写像 $\boldsymbol{c} \mapsto P\boldsymbol{c}\ (\boldsymbol{c} \in V)$，つまり，

$$P : [\,\boldsymbol{e}_1 \cdots \boldsymbol{e}_n\,] \begin{bmatrix} c_1 \\ \vdots \\ c_n \end{bmatrix} \mapsto [\,\boldsymbol{p}_1 \cdots \boldsymbol{p}_n\,] \begin{bmatrix} c_1 \\ \vdots \\ c_n \end{bmatrix} \tag{1.3.33}$$

は全射である。また，$\boldsymbol{p}_1, \cdots, \boldsymbol{p}_n$ が線形独立のとき，

$$[\,\boldsymbol{p}_1 \cdots \boldsymbol{p}_n\,] \begin{bmatrix} c_1 \\ \vdots \\ c_n \end{bmatrix} = [\,\boldsymbol{p}_1 \cdots \boldsymbol{p}_n\,] \begin{bmatrix} c'_1 \\ \vdots \\ c'_n \end{bmatrix} \quad \Rightarrow \quad \begin{bmatrix} c_1 \\ \vdots \\ c_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} c'_1 \\ \vdots \\ c'_n \end{bmatrix} \tag{1.3.34}$$

である。(1.3.34) の対偶をとって $[\,\boldsymbol{e}_1 \cdots \boldsymbol{e}_n\,]$ を補うと，

$$[\,\boldsymbol{e}_1 \cdots \boldsymbol{e}_n\,]\begin{bmatrix} c_1 \\ \vdots \\ c_n \end{bmatrix} \neq [\,\boldsymbol{e}_1 \cdots \boldsymbol{e}_n\,]\begin{bmatrix} c'_1 \\ \vdots \\ c'_n \end{bmatrix} \quad \Rightarrow \quad [\,\boldsymbol{p}_1 \cdots \boldsymbol{p}_n\,]\begin{bmatrix} c_1 \\ \vdots \\ c_n \end{bmatrix} \neq [\,\boldsymbol{p}_1 \cdots \boldsymbol{p}_n\,]\begin{bmatrix} c'_1 \\ \vdots \\ c'_n \end{bmatrix} \tag{1.3.35}$$

であるから，P は単射である。したがって，P は全単射であり，その逆写像，すなわち，逆行列 P^{-1} が存在する。よって，(2) $\Rightarrow$ (1) が成り立つ。 ■

==========

補足・計算例 9.

正則行列
$ad - bc \neq 0$ のとき

$$P = \begin{bmatrix} a & b \\ c & d \end{bmatrix} \quad \Rightarrow \quad P^{-1} = \frac{1}{ad-bc}\begin{bmatrix} d & -b \\ -c & a \end{bmatrix} \tag{1.3.36}$$

$$P = \begin{bmatrix} 1 & 2 \\ 2 & 3 \end{bmatrix} \quad \Rightarrow \quad P^{-1} = \begin{bmatrix} -3 & 2 \\ 2 & -1 \end{bmatrix} \tag{1.3.37}$$

==========

1.3.4 基底と双対基底

n 次の正則行列 P を

$$P = [\,\boldsymbol{p}_1 \cdots \boldsymbol{p}_n\,] \tag{1.3.38}$$

と表すと，$\boldsymbol{p}_1, \cdots, \boldsymbol{p}_n$ は線形独立である。このとき，(1.3.4)，つまり，

$$V = \mathrm{span}(\boldsymbol{e}_1, \cdots, \boldsymbol{e}_n) = \mathrm{span}(\boldsymbol{p}_1, \cdots, \boldsymbol{p}_n) \tag{1.3.39}$$

が成り立ち，$p = \{\boldsymbol{p}_1, \cdots, \boldsymbol{p}_n\}$ は V の基底となる。任意の n 次元列ベクトル $\boldsymbol{a}$ は，基底 p により，

$$\boldsymbol{a} = a'_1\boldsymbol{p}_1 + \cdots + a'_n\boldsymbol{p}_n = [\,\boldsymbol{p}_1 \cdots \boldsymbol{p}_n\,]\begin{bmatrix} a'_1 \\ \vdots \\ a'_n \end{bmatrix} \tag{1.3.40}$$

と表される。P の逆行列 P^{-1} を

$$P^{-1} = \begin{bmatrix} \boldsymbol{\pi}_1 \\ \vdots \\ \boldsymbol{\pi}_n \end{bmatrix} \tag{1.3.41}$$

と表すと，P^{-1} も正則行列であるから，$\boldsymbol{\pi}_1, \cdots, \boldsymbol{\pi}_n$ は線形独立である。このとき，

$$V^* = \mathrm{span}(\boldsymbol{\varepsilon}_1, \cdots, \boldsymbol{\varepsilon}_n) = \mathrm{span}(\boldsymbol{\pi}_1, \cdots, \boldsymbol{\pi}_n) \tag{1.3.42}$$

である。$\pi = \{\boldsymbol{\pi}_1, \cdots, \boldsymbol{\pi}_n\}$ は V^* の基底となる。基底 π を基底 p の**双対基底**という[18]。任意の n 次元行ベクトル $\boldsymbol{\alpha}$ は，双対基底 π により，

$$\boldsymbol{\alpha} = \alpha'_1 \boldsymbol{\pi}_1 + \cdots + \alpha'_n \boldsymbol{\pi}_n = \begin{bmatrix} \alpha'_1 & \cdots & \alpha'_n \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \boldsymbol{\pi}_1 \\ \vdots \\ \boldsymbol{\pi}_n \end{bmatrix} \tag{1.3.43}$$

と表される。等式 $I = P^{-1}P$ は基底 p と双対基底 π を用いると

$$I = \begin{bmatrix} \boldsymbol{\pi}_1 \\ \vdots \\ \boldsymbol{\pi}_n \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \boldsymbol{p}_1 & \cdots & \boldsymbol{p}_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \boldsymbol{\pi}_1 \boldsymbol{p}_1 & \cdots & \boldsymbol{\pi}_1 \boldsymbol{p}_n \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \boldsymbol{\pi}_n \boldsymbol{p}_1 & \cdots & \boldsymbol{\pi}_n \boldsymbol{p}_n \end{bmatrix} \tag{1.3.44}$$

と書ける。(1.3.44) の右辺の行列の (i, j) 成分は

$$\boldsymbol{\pi}_i \boldsymbol{p}_j = \delta_{ij} \tag{1.3.45}$$

である。(1.3.45) は基底 p と双対基底 π に関する最も基本的な関係式である。

==========

補足・計算例 10.

基底と双対基底

$$P = \begin{bmatrix} 1 & 2 \\ 2 & 3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \boldsymbol{p}_1 & \boldsymbol{p}_2 \end{bmatrix} \quad \Rightarrow \quad p = \{\boldsymbol{p}_1, \boldsymbol{p}_2\} \quad \boldsymbol{p}_1 = \begin{bmatrix} 1 \\ 2 \end{bmatrix} \quad \boldsymbol{p}_2 = \begin{bmatrix} 2 \\ 3 \end{bmatrix} \tag{1.3.46}$$

$$P^{-1} = \begin{bmatrix} -3 & 2 \\ 2 & -1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \boldsymbol{\pi}_1 \\ \boldsymbol{\pi}_2 \end{bmatrix} \quad \Rightarrow \quad \pi = \{\boldsymbol{\pi}_1, \boldsymbol{\pi}_2\} \quad \boldsymbol{\pi}_1 = \begin{bmatrix} -3 & 2 \end{bmatrix} \quad \boldsymbol{\pi}_1 = \begin{bmatrix} 2 & -1 \end{bmatrix} \tag{1.3.47}$$

[18]基底 p を与えると双対基底 π は一意的に決まります。逆に，双対基底 π を与えると基底 p は一意的に決まります。つまり，基底 p と双対基底 π は独立には選べないことに注意する必要があります。

基底と双対基底のペアリング

$$\boldsymbol{\pi}_1\boldsymbol{p}_1 = \begin{bmatrix} -3 & 2 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} 1 \\ 2 \end{bmatrix} = (-3)\cdot 1 + 2\cdot 2 = 1 \quad \boldsymbol{\pi}_1\boldsymbol{p}_2 = \begin{bmatrix} -3 & 2 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} 2 \\ 3 \end{bmatrix} = (-3)\cdot 2 + 2\cdot 3 = 0$$
$$\boldsymbol{\pi}_2\boldsymbol{p}_1 = \begin{bmatrix} 2 & -1 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} 1 \\ 2 \end{bmatrix} = 2\cdot 1 + (-1)\cdot 2 = 0 \quad \boldsymbol{\pi}_2\boldsymbol{p}_2 = \begin{bmatrix} 2 & -1 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} 2 \\ 3 \end{bmatrix} = 2\cdot 2 + (-1)\cdot 3 = 1 \tag{1.3.48}$$

==========

1.3.5 射影と完全性関係

$\boldsymbol{\pi}_i\boldsymbol{p}_j = \delta_{ij}$ を $\boldsymbol{a} = a'_1\boldsymbol{p}_1 + \cdots + a'_n\boldsymbol{p}_n$ に対して用いると，

$$\boldsymbol{\pi}_i\boldsymbol{a} = a'_i \tag{1.3.49}$$

を得る。したがって，

$$\boldsymbol{p}_i\boldsymbol{\pi}_i\boldsymbol{a} = a'_i\boldsymbol{p}_i \tag{1.3.50}$$

である[19]。つまり，n 次正方行列 $\boldsymbol{p}_i\boldsymbol{\pi}_i$ は $\boldsymbol{a} = a'_1\boldsymbol{p}_1 + \cdots + a'_n\boldsymbol{p}_n$ に対して左から作用して第 i 項 $a'_i\boldsymbol{p}_i$ を取り出す作用をもつ。$\boldsymbol{p}_i\boldsymbol{\pi}_i$ を $\boldsymbol{p}_i$ 軸への**射影**[20]という。射影は

$$(\boldsymbol{p}_i\boldsymbol{\pi}_i)^2 = \boldsymbol{p}_i\boldsymbol{\pi}_i \qquad (\boldsymbol{p}_i\boldsymbol{\pi}_i)(\boldsymbol{p}_j\boldsymbol{\pi}_j) = O \ \ (i \neq j) \tag{1.3.51}$$

の性質をもつ。$\boldsymbol{\pi}_i\boldsymbol{p}_j = \delta_{ij}$ を $\boldsymbol{\alpha} = \alpha'_1\boldsymbol{\pi}_1 + \cdots + \alpha'_n\boldsymbol{\pi}_n$ に対して用いると，

$$\boldsymbol{\alpha}\boldsymbol{p}_i = \alpha'_i \tag{1.3.52}$$

を得る。したがって，

$$\boldsymbol{\alpha}\boldsymbol{p}_i\boldsymbol{\pi}_i = \alpha'_i\boldsymbol{\pi}_i \tag{1.3.53}$$

である。つまり，射影 $\boldsymbol{p}_i\boldsymbol{\pi}_i$ は $\boldsymbol{\alpha} = \alpha'_1\boldsymbol{\pi}_1 + \cdots + \alpha'_n\boldsymbol{\pi}_n$ に対して右から作用して第 i 項 $\alpha'_i\boldsymbol{\pi}_i$ を取り出す作用をもつ。等式 $I = PP^{-1}$ は基底 p と双対基底 π を用いると

$$I = \begin{bmatrix} \boldsymbol{p}_1 & \cdots & \boldsymbol{p}_n \end{bmatrix}\begin{bmatrix} \boldsymbol{\pi}_1 \\ \vdots \\ \boldsymbol{\pi}_n \end{bmatrix} = \boldsymbol{p}_1\boldsymbol{\pi}_1 + \cdots + \boldsymbol{p}_n\boldsymbol{\pi}_n \tag{1.3.54}$$

[19]通常，スカラーはベクトルの前に書くことになっているため，(1.3.50) の右辺でも a'_i を $\boldsymbol{p}_i$ の前に書いています。

[20]ここでの射影という用語は n 次正方行列 $\boldsymbol{p}_i\boldsymbol{\pi}_i$ のことを指しています。射影という代わりに，射影行列ということもあります。なお，内積が与えられている場合は正射影 (直交射影) に対する用語として斜交射影とよばれることもありますが，ここでは内積が与えられていない場合を扱っていますので斜交射影という用語は用いないことにします。

と書ける。(1.3.54) を基底 p に関する**完全性関係**または**単位の分解**という[21]。特に，基底 p として標準基底 e を，また，双対基底 π として標準双対基底 ε をとると，$P = P^{-1} = I$ より，(1.3.21) が得られる。完全性関係を用いると，$\boldsymbol{a} = a'_1\boldsymbol{p}_1 + \cdots + a'_n\boldsymbol{p}_n$ は，$\boldsymbol{\pi}_i\boldsymbol{a} = a'_i$ より，

$$\boldsymbol{a} = [\,\boldsymbol{p}_1 \cdots \boldsymbol{p}_n\,]\begin{bmatrix}\boldsymbol{\pi}_1\\ \vdots \\ \boldsymbol{\pi}_n\end{bmatrix}\boldsymbol{a} = [\,\boldsymbol{p}_1 \cdots \boldsymbol{p}_n\,]\begin{bmatrix}\boldsymbol{\pi}_1\boldsymbol{a}\\ \vdots \\ \boldsymbol{\pi}_n\boldsymbol{a}\end{bmatrix} = [\,\boldsymbol{p}_1 \cdots \boldsymbol{p}_n\,]\begin{bmatrix}a'_1\\ \vdots \\ a'_n\end{bmatrix} \tag{1.3.55}$$

と書ける。また，$\boldsymbol{\alpha} = \alpha'_1\boldsymbol{\pi}_1 + \cdots + \alpha'_n\boldsymbol{\pi}_n$ は，$\boldsymbol{\alpha}\boldsymbol{p}_i = \alpha'_i$ より，

$$\boldsymbol{\alpha} = \boldsymbol{\alpha}[\,\boldsymbol{p}_1 \cdots \boldsymbol{p}_n\,]\begin{bmatrix}\boldsymbol{\pi}_1\\ \vdots \\ \boldsymbol{\pi}_n\end{bmatrix} = [\,\boldsymbol{\alpha}\boldsymbol{p}_1 \cdots \boldsymbol{\alpha}\boldsymbol{p}_n\,]\begin{bmatrix}\boldsymbol{\pi}_1\\ \vdots \\ \boldsymbol{\pi}_n\end{bmatrix} = [\ \alpha'_1 \ \cdots \ \alpha'_n\ ]\begin{bmatrix}\boldsymbol{\pi}_1\\ \vdots \\ \boldsymbol{\pi}_n\end{bmatrix} \tag{1.3.56}$$

と書ける。

==========

補足・計算例 11.

完全性関係の意味

完全性関係は「任意の列ベクトルに対してすべての軸へ射影を行い，さらにそれら射影されたものすべての和をとると元の列ベクトルに戻る」という意味をもつ。完全性関係は線形代数および量子力学において重要な役割を果たす関係式である。

射影と完全性関係 (標準基底・標準双対基底の場合)

$$e = \{\boldsymbol{e}_1, \boldsymbol{e}_2\} \quad \boldsymbol{e}_1 = \begin{bmatrix}1\\0\end{bmatrix} \quad \boldsymbol{e}_2 = \begin{bmatrix}0\\1\end{bmatrix} \tag{1.3.57}$$

$$\varepsilon = \{\boldsymbol{\varepsilon}_1, \boldsymbol{\varepsilon}_2\} \quad \boldsymbol{\varepsilon}_1 = [\ 1\ \ 0\ ] \quad \boldsymbol{\varepsilon}_2 = [\ 0\ \ 1\ ] \tag{1.3.58}$$

$$\boldsymbol{e}_1\boldsymbol{\varepsilon}_1 = \begin{bmatrix}1\\0\end{bmatrix}[\ 1\ \ 0\ ] = \begin{bmatrix}1 & 0\\0 & 0\end{bmatrix} \quad \boldsymbol{e}_2\boldsymbol{\varepsilon}_2 = \begin{bmatrix}0\\1\end{bmatrix}[\ 0\ \ 1\ ] = \begin{bmatrix}0 & 0\\0 & 1\end{bmatrix} \tag{1.3.59}$$

$$(\boldsymbol{e}_1\boldsymbol{\varepsilon}_1)^2 = \begin{bmatrix}1 & 0\\0 & 0\end{bmatrix}\begin{bmatrix}1 & 0\\0 & 0\end{bmatrix} = \begin{bmatrix}1 & 0\\0 & 0\end{bmatrix} \quad (\boldsymbol{e}_2\boldsymbol{\varepsilon}_2)^2 = \begin{bmatrix}0 & 0\\0 & 1\end{bmatrix}\begin{bmatrix}0 & 0\\0 & 1\end{bmatrix} = \begin{bmatrix}0 & 0\\0 & 1\end{bmatrix} \tag{1.3.60}$$

[21] 完全性関係は量子力学で広く使われている用語であるのに対し，単位の分解は数学で広く使われている用語です。本書では完全性関係を用いることにします。完全性関係については第 2 章でさらに詳しく扱います。

$$(\boldsymbol{e}_1\boldsymbol{\varepsilon}_1)(\boldsymbol{e}_2\boldsymbol{\varepsilon}_2) = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix} \quad (\boldsymbol{e}_2\boldsymbol{\varepsilon}_2)(\boldsymbol{e}_1\boldsymbol{\varepsilon}_1) = \begin{bmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix} \tag{1.3.61}$$

$$\boldsymbol{e}_1\boldsymbol{\varepsilon}_1 + \boldsymbol{e}_2\boldsymbol{\varepsilon}_2 = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} \tag{1.3.62}$$

射影と完全性関係 (一般の基底・双対基底の場合)

$$P = \begin{bmatrix} 1 & 2 \\ 2 & 3 \end{bmatrix} = [\,\boldsymbol{p}_1\,\boldsymbol{p}_2\,] \quad \Rightarrow \quad p = \{\boldsymbol{p}_1, \boldsymbol{p}_2\} \quad \boldsymbol{p}_1 = \begin{bmatrix} 1 \\ 2 \end{bmatrix} \quad \boldsymbol{p}_2 = \begin{bmatrix} 2 \\ 3 \end{bmatrix} \tag{1.3.63}$$

$$P^{-1} = \begin{bmatrix} -3 & 2 \\ 2 & -1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \boldsymbol{\pi}_1 \\ \boldsymbol{\pi}_2 \end{bmatrix} \quad \Rightarrow \quad \pi = \{\boldsymbol{\pi}_1, \boldsymbol{\pi}_2\} \quad \boldsymbol{\pi}_1 = [\ -3\ \ 2\ ] \quad \boldsymbol{\pi}_1 = [\ 2\ \ -1\ ] \tag{1.3.64}$$

$$\boldsymbol{p}_1\boldsymbol{\pi}_1 = \begin{bmatrix} 1 \\ 2 \end{bmatrix}[\ -3\ \ 2\ ] = \begin{bmatrix} -3 & 2 \\ -6 & 4 \end{bmatrix} \quad \boldsymbol{p}_2\boldsymbol{\pi}_2 = \begin{bmatrix} 2 \\ 3 \end{bmatrix}[\ 2\ \ -1\ ] = \begin{bmatrix} 4 & -2 \\ 6 & -3 \end{bmatrix} \tag{1.3.65}$$

$$(\boldsymbol{p}_1\boldsymbol{\pi}_1)^2 = \begin{bmatrix} -3 & 2 \\ -6 & 4 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} -3 & 2 \\ -6 & 4 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -3 & 2 \\ -6 & 4 \end{bmatrix} \quad (\boldsymbol{p}_2\boldsymbol{\pi}_2)^2 = \begin{bmatrix} 4 & -2 \\ 6 & -3 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} 4 & -2 \\ 6 & -3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 4 & -2 \\ 6 & -3 \end{bmatrix} \tag{1.3.66}$$

$$(\boldsymbol{p}_1\boldsymbol{\pi}_1)(\boldsymbol{p}_2\boldsymbol{\pi}_2) = \begin{bmatrix} -3 & 2 \\ -6 & 4 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} 4 & -2 \\ 6 & -3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix} \quad (\boldsymbol{p}_2\boldsymbol{\pi}_2)(\boldsymbol{p}_1\boldsymbol{\pi}_1) = \begin{bmatrix} 4 & -2 \\ 6 & -3 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} -3 & 2 \\ -6 & 4 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix} \tag{1.3.67}$$

$$\boldsymbol{p}_1\boldsymbol{\pi}_1 + \boldsymbol{p}_2\boldsymbol{\pi}_2 = \begin{bmatrix} -3 & 2 \\ -6 & 4 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} 4 & -2 \\ 6 & -3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} \tag{1.3.68}$$

列ベクトル，行ベクトルの基底，双対基底による表し方

$$\begin{aligned} &\boldsymbol{a} = \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \end{bmatrix} = a_1'\boldsymbol{p}_1 + a_2'\boldsymbol{p}_2 \quad a_1' = \boldsymbol{\pi}_1\boldsymbol{a} = [\ -3\ \ 2\ ]\begin{bmatrix} 1 \\ 1 \end{bmatrix} = -1 \quad a_2' = \boldsymbol{\pi}_2\boldsymbol{a} = [\ 2\ \ -1\ ]\begin{bmatrix} 1 \\ 1 \end{bmatrix} = 1 \\ &\boldsymbol{a} = -\boldsymbol{p}_1 + \boldsymbol{p}_2 \quad \boldsymbol{p}_1\boldsymbol{\pi}_1\boldsymbol{a} = -\boldsymbol{p}_1 \quad \boldsymbol{p}_2\boldsymbol{\pi}_2\boldsymbol{a} = \boldsymbol{p}_2 \end{aligned} \tag{1.3.69}$$

$$\begin{aligned} &\boldsymbol{\alpha} = [\ 1\ \ 1\ ] = \alpha_1'\boldsymbol{\pi}_1 + \alpha_2'\boldsymbol{\pi}_2 \quad \alpha_1' = \boldsymbol{\alpha}\boldsymbol{p}_1 = [\ 1\ \ 1\ ]\begin{bmatrix} 1 \\ 2 \end{bmatrix} = 3 \quad \alpha_2' = \boldsymbol{\alpha}\boldsymbol{p}_2 = [\ 1\ \ 1\ ]\begin{bmatrix} 2 \\ 3 \end{bmatrix} = 5 \\ &\boldsymbol{\alpha} = 3\boldsymbol{\pi}_1 + 5\boldsymbol{\pi}_2 \quad \boldsymbol{\alpha}\boldsymbol{p}_1\boldsymbol{\pi}_1 = 3\boldsymbol{\pi}_1 \quad \boldsymbol{\alpha}\boldsymbol{p}_2\boldsymbol{\pi}_2 = 5\boldsymbol{\pi}_2 \end{aligned} \tag{1.3.70}$$

==========

1.4 連立一次方程式

1.4.1 写像としての行列

A を (m,n) 行列，$\boldsymbol{x}$ を n 次元列ベクトルとすると，$A\boldsymbol{x}$ は m 次元列ベクトルである。したがって，A は n 次元列ベクトル空間 V から m 次元列ベクトル空間 W への写像と考えることができる。つまり，

$$A : V \to W \qquad A : \boldsymbol{x} \mapsto A\boldsymbol{x}\ (\boldsymbol{x} \in V,\ A\boldsymbol{x} \in W) \tag{1.4.1}$$

である。このとき，

$$A(\boldsymbol{x}_1 + \boldsymbol{x}_2) = A\boldsymbol{x}_1 + A\boldsymbol{x}_2 \qquad A(\lambda\boldsymbol{x}) = \lambda A\boldsymbol{x} \tag{1.4.2}$$

が成り立つ。(1.4.2) の性質をもつ写像を**線形写像**という[22]。$A = [\,\boldsymbol{a}_1 \cdots \boldsymbol{a}_n\,]$，$\boldsymbol{x} = x_1\boldsymbol{e}_1 + \cdots + x_n\boldsymbol{e}_n$ とすると，

$$A : [\,\boldsymbol{e}_1 \cdots \boldsymbol{e}_n\,]\begin{bmatrix} x_1 \\ \vdots \\ x_n \end{bmatrix} \mapsto [\,\boldsymbol{a}_1 \cdots \boldsymbol{a}_n\,]\begin{bmatrix} x_1 \\ \vdots \\ x_n \end{bmatrix} \tag{1.4.3}$$

である。したがって，$A\boldsymbol{x}$ の全体は $\mathrm{span}(\boldsymbol{a}_1 \cdots \boldsymbol{a}_n)$ であり，A の階数を $r = \mathrm{rank}\,A$ とすると，$\mathrm{span}(\boldsymbol{a}_1 \cdots \boldsymbol{a}_n)$ は W の r 次元部分空間をなす。これを A の**像**といい，$\mathrm{im}\,A$ あるいは $A(V)$ と表す[23]。$\dim \mathrm{im}\,A = \mathrm{rank}\,A$ であることに注意せよ。また，$A\boldsymbol{x} = \boldsymbol{0}$ となる $\boldsymbol{x}$ の全体は V の $n-r$ 次元部分空間をなす。これを A の**核**といい，$\ker A$ と表す[24]。$\dim V = n$，$\dim \mathrm{im}\,A = r$，$\dim \ker A = n - r$ より，$\dim V = \dim \mathrm{im}\,A + \dim \ker A$ が成り立つ。これを**次元定理**という。

1.4.2 連立一次方程式

A を (m,n) 行列，$\boldsymbol{x}$ を n 次元列ベクトル，$\boldsymbol{b}$ を m 次元列ベクトルとする。A, $\boldsymbol{b}$ が与えられたとき，

$$A\boldsymbol{x} = \boldsymbol{b} \tag{1.4.4}$$

[22]線形写像については第 2 章の §2.5 で詳しく述べます。
[23]$\mathrm{im}\,A$，$A(V)$ の代わりに $\mathrm{Im}\,A$，$\mathscr{R}(A)$ などのように記されることもあります。
[24]$\ker A$ の代わりに $\mathrm{Ker}\,A$，$\mathscr{N}(A)$ などのようにと記されることもあります。

を満たす $\boldsymbol{x}$ を求めることを考える。これを**連立一次方程式** $A\boldsymbol{x}=\boldsymbol{b}$ を解くといい，これを満たす $\boldsymbol{x}$ のことを $A\boldsymbol{x}=\boldsymbol{b}$ の**解**という。$\boldsymbol{b}\neq\boldsymbol{0}$ のとき $A\boldsymbol{x}=\boldsymbol{b}$ を**非同次方程式**といい，$A\boldsymbol{x}=\boldsymbol{0}$ をそれに付随する**同次方程式**という。n 次元列ベクトル空間を V，m 次元列ベクトル空間を W とすると，A は V から W への線形写像である。$A\boldsymbol{x}=\boldsymbol{b}$ の解 $\boldsymbol{x}$ が存在するためには，$\boldsymbol{b}\in\operatorname{im}A$ でなければならない。核の定義により，$A\boldsymbol{x}=\boldsymbol{0}$ の解 $\boldsymbol{x}_*$ の全体は $\ker A$ である。$\ker A$ の基底を $A\boldsymbol{x}=\boldsymbol{0}$ の**基本解**という。非同次方程式 $A\boldsymbol{x}=\boldsymbol{b}$ の一般解は付随する同次方程式 $A\boldsymbol{x}=\boldsymbol{0}$ の一般解 $\boldsymbol{x}_*$ と非同次方程式の特殊解 $\boldsymbol{x}_0$ の和

$$\boldsymbol{x}=\boldsymbol{x}_*+\boldsymbol{x}_0 \tag{1.4.5}$$

で与えられる[25]。

1.4.3 ガウスの消去法

実際に連立一次方程式 $A\boldsymbol{x}=\boldsymbol{b}$ を解くには以下に述べる**ガウスの消去法**[26]を用いる。まず，$A\boldsymbol{x}=\boldsymbol{b}$ を

$$\begin{cases} a_{11}x_1+\cdots+a_{1n}x_n=b_1 \\ \qquad\qquad\vdots \\ a_{m1}x_1+\cdots+a_{mn}x_n=b_m \end{cases} \tag{1.4.6}$$

と書く。A と $\boldsymbol{b}$ からなる $(m,n+1)$ 行列 $[\,A\,|\,\boldsymbol{b}\,]$ を導入し，これを**拡大係数行列**とよぶ。$[\,A\,|\,\boldsymbol{b}\,]$ に行基本変形

(1) 第 i 行を $\lambda(\neq 0)$ 倍する。

(2) 第 i 行に第 j 行の λ 倍を加える。

(3) 第 i 行と第 j 行を交換する。

[25] このことは線形微分方程式の一般解と密接に関係しています。
[26] ガウスの消去法は掃き出し法ともいわれます。

を用いることにより，

$$
[\,A' \,|\, \boldsymbol{b}'\,] = \begin{bmatrix}
1 & * & 0 & * & 0 & * & 0 & * & b'_1 \\
 & & 1 & * & 0 & * & 0 & * & b'_2 \\
 & & & & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\
 & & & & 1 & * & 0 & * & b'_{r-1} \\
 & & & & & & 1 & * & b'_r \\
 & & & & & & & & \\
 & & & & & & & &
\end{bmatrix} \tag{1.4.7}
$$

の形に変形する。ここで，$*$ は適当な数が横に並んでいることを表し，また，空白のところはすべて 0 であることを表す。これにより，第 i 行 $(1 \leq i \leq r)$ の左端の 1 を係数とする $\boldsymbol{x}$ の成分を b'_i から同じ行の $*$ を係数とする $\boldsymbol{x}$ の成分の和を引く形で表せる。$*$ を係数とする $\boldsymbol{x}$ の成分は解 $\boldsymbol{x}$ を表すためのパラメータとしての役割を担う。このとき，行の左端の 1 を係数とする $\boldsymbol{x}$ の成分の数は $r = \operatorname{rank} A = \dim \operatorname{im} A$ である。一方，$*$ を係数とする $\boldsymbol{x}$ の成分の数は $n - r = \dim \ker A$ である。なお,(1.4.7) の行列における右端の列ベクトル $\boldsymbol{b}'$ の第 $r+1$ 行目以下に 0 でない数が残る場合は，$A\boldsymbol{x} = \boldsymbol{b}$ の解 $\boldsymbol{x}$ は存在しない。この場合は $\boldsymbol{b} \notin \operatorname{im} A$ である。

==========

補足・計算例 12.

ガウスの消去法による連立一次方程式の解法

$$
\begin{cases}
3x_1 - 6x_2 + 3x_3 + 9x_4 = 3 \\
-2x_1 + 4x_2 - x_3 - 8x_4 = 1 \\
4x_1 - 8x_2 + 9x_3 + 2x_4 = 19
\end{cases} \tag{1.4.8}
$$

$$
\begin{aligned}
[\,A \,|\, \boldsymbol{b}\,] &= \begin{bmatrix} 3 & -6 & 3 & 9 & 3 \\ -2 & 4 & -1 & -8 & 1 \\ 4 & -8 & 9 & 2 & 19 \end{bmatrix} \xrightarrow{①:=1/3\times①} \begin{bmatrix} 1 & -2 & 1 & 3 & 1 \\ -2 & 4 & -1 & -8 & 1 \\ 4 & -8 & 9 & 2 & 19 \end{bmatrix} \\
&\xrightarrow{②+=2\times①} \begin{bmatrix} 1 & -2 & 1 & 3 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & -2 & 3 \\ 4 & -8 & 9 & 2 & 19 \end{bmatrix} \xrightarrow{③+=-4\times①} \begin{bmatrix} 1 & -2 & 1 & 3 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & -2 & 3 \\ 0 & 0 & 5 & -10 & 15 \end{bmatrix} \\
&\xrightarrow{③+=-5\times②} \begin{bmatrix} 1 & -2 & 1 & 3 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & -2 & 3 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \xrightarrow{①+=-1\times②} \begin{bmatrix} 1 & -2 & 0 & 5 & -2 \\ 0 & 0 & 1 & -2 & 3 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}
\end{aligned} \tag{1.4.9}
$$

$$
\begin{cases} x_1 - 2x_2 + 5x_4 = -2 \\ x_3 - 2x_4 = 3 \end{cases} \quad \Rightarrow \quad \boldsymbol{x} = \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ x_4 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 2s - 5t - 2 \\ s \\ 2t + 3 \\ t \end{bmatrix}
$$

$$
\boldsymbol{x} = \boldsymbol{x}_* + \boldsymbol{x}_0 \qquad \boldsymbol{x}_* = s \begin{bmatrix} 2 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} + t \begin{bmatrix} -5 \\ 0 \\ 2 \\ 1 \end{bmatrix} \qquad \boldsymbol{x}_0 = \begin{bmatrix} -2 \\ 0 \\ 3 \\ 0 \end{bmatrix} \tag{1.4.10}
$$

$$
\operatorname{rank} A = \dim \operatorname{im} A = 2 \qquad \dim \ker A = 2
$$

==========

1.4.4 逆行列の計算法

連立一次方程式 $A\boldsymbol{x} = \boldsymbol{y}$ の A が n 次の正則行列であり，$\boldsymbol{x}$ と $\boldsymbol{y}$ がともに n 次元列ベクトルである場合を考える。A の逆行列 A^{-1} を $A\boldsymbol{x} = \boldsymbol{y}$ の両辺に掛けると，$\boldsymbol{x} = A^{-1}\boldsymbol{y}$ となる。したがって，ガウスの消去法を用いて，

$$
\begin{cases} a_{11}x_1 + \cdots a_{1n}x_n = 1 \cdot y_1 + \cdots + 0 \cdot y_n \\ \qquad\qquad \vdots \\ a_{n1}x_1 + \cdots a_{nn}x_n = 0 \cdot y_1 + \cdots + 1 \cdot y_n \end{cases} \tag{1.4.11}
$$

を

$$
\begin{cases} 1 \cdot x_1 + \cdots + 0 \cdot x_n = b_{11}y_1 + \cdots + b_{1n}y_n \\ \qquad\qquad \vdots \\ 0 \cdot x_1 + \cdots + 1 \cdot x_n = b_{n1}y_1 + \cdots + b_{nn}y_n \end{cases} \tag{1.4.12}
$$

の形に変形できれば，右辺に現れる B が A^{-1} である。つまり，係数 $[\,A \,|\, I\,]$ に着目してこれに行基本変形を用いることにより $[\,A \,|\, I\,] \to [\,I \,|\, B\,]$ の形に変形すると，その結果として得られる B が A^{-1} である。またこのことから，A が正則であるための必要十分条件は $\operatorname{rank} A = n$ であり，(1.3.30) と同じ表し方をすれば，

$$
(1)\ A = [\,\boldsymbol{a}_1 \ \cdots \ \boldsymbol{a}_n\,] \text{ は正則} \quad \Leftrightarrow \quad (2)\ \boldsymbol{a}_1, \cdots, \boldsymbol{a}_n \text{は線形独立} \tag{1.4.13}
$$

である。

==========

補足・計算例 13.

ガウスの消去法による逆行列の計算

例 1

$$A = \begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 \\ 2 & 3 & 1 \\ 3 & 4 & 1 \end{bmatrix} \tag{1.4.14}$$

$$\begin{aligned}
[\,A \,|\, I\,] &= \begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 & 1 & 0 & 0 \\ 2 & 3 & 1 & 0 & 1 & 0 \\ 3 & 4 & 1 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \xrightarrow{②+=-2\times①} \begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & -1 & -2 & 1 & 0 \\ 3 & 4 & 1 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \\
&\xrightarrow{③+=-3\times①} \begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & -1 & -2 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & -2 & -3 & 0 & 1 \end{bmatrix} \xrightarrow{③+=-1\times②} \begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & -1 & -2 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & -1 & -1 & 1 \end{bmatrix} \\
&\xrightarrow{③:=-1\times③} \begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & -1 & -2 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 1 & 1 & -1 \end{bmatrix} \xrightarrow{②+=1\times③} \begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & -1 & 2 & -1 \\ 0 & 0 & 1 & 1 & 1 & -1 \end{bmatrix} \\
&\xrightarrow{①+=-1\times③} \begin{bmatrix} 1 & 1 & 0 & 0 & -1 & 1 \\ 0 & 1 & 0 & -1 & 2 & -1 \\ 0 & 0 & 1 & 1 & 1 & -1 \end{bmatrix} \xrightarrow{①+=-1\times②} \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 1 & -3 & 2 \\ 0 & 1 & 0 & -1 & 2 & -1 \\ 0 & 0 & 1 & 1 & 1 & -1 \end{bmatrix}
\end{aligned} \tag{1.4.15}$$

$$A^{-1} = \begin{bmatrix} 1 & -3 & 2 \\ -1 & 2 & -1 \\ 1 & 1 & -1 \end{bmatrix} \tag{1.4.16}$$

例 2

$$A = \begin{bmatrix} 1 & 0 & -2 \\ 0 & 2 & 0 \\ 0 & 0 & 4 \end{bmatrix} \tag{1.4.17}$$

$$\begin{aligned}
[\,A \,|\, I\,] &= \begin{bmatrix} 1 & 0 & -2 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 2 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 4 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \xrightarrow{②:=1/2\times②} \begin{bmatrix} 1 & 0 & -2 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 1/2 & 0 \\ 0 & 0 & 4 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \\
&\xrightarrow{③:=1/4\times③} \begin{bmatrix} 1 & 0 & -2 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 1/2 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 1/4 \end{bmatrix} \xrightarrow{①+=2\times③} \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 1 & 0 & 1/2 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 1/2 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 1/4 \end{bmatrix}
\end{aligned} \tag{1.4.18}$$

$$A^{-1} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 1/2 \\ 0 & 1/2 & 0 \\ 0 & 0 & 1/4 \end{bmatrix} \tag{1.4.19}$$

例 3

$$A = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 2 & 1 & 0 \\ -12 & -6 & 1 \end{bmatrix} \tag{1.4.20}$$

$$
\begin{aligned}
[\,A\,|\,I\,] &= \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 2 & 1 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ -12 & -6 & 1 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \xrightarrow{②+=-2\times①} \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & -2 & 1 & 0 \\ -12 & -6 & 1 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \\
&\xrightarrow{③+=12\times①} \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & -2 & 1 & 0 \\ 0 & -6 & 1 & 12 & 0 & 1 \end{bmatrix} \xrightarrow{③+=6\times②} \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & -2 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 6 & 1 \end{bmatrix}
\end{aligned} \tag{1.4.21}
$$

$$
A^{-1} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ -2 & 1 & 0 \\ 0 & 6 & 1 \end{bmatrix} \tag{1.4.22}
$$

例 4

$$
A = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ -12 & -6 & 1 \end{bmatrix} \tag{1.4.23}
$$

$$
\begin{aligned}
[\,A\,|\,I\,] &= \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ -12 & -6 & 1 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \xrightarrow{③+=12\times①} \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & -6 & 1 & 12 & 0 & 1 \end{bmatrix} \\
&\xrightarrow{③+=6\times②} \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 12 & 6 & 1 \end{bmatrix}
\end{aligned} \tag{1.4.24}
$$

$$
A^{-1} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 12 & 6 & 1 \end{bmatrix} \tag{1.4.25}
$$

==========

1.5 行列式

1.5.1 置換

n 個の数字 $1, \cdots, n$ を $\sigma(1), \cdots, \sigma(n)$ に並べ替える演算 σ を n 次の**置換**という。置換 σ を

$$
\sigma = \begin{pmatrix} 1 & \cdots & n \\ \sigma(1) & \cdots & \sigma(n) \end{pmatrix} \tag{1.5.1}
$$

と表す。ただし，(1.5.1) の右辺において，上下の対応のみが意味をもち，この対応を崩さない限り n 組の上下の対を任意の順番に並べても同じ置換 σ を表すもの

とする。n 次の置換 σ は全部で $n!$ 個ある。特に,

$$\mathbf{1} = \begin{pmatrix} 1 & \cdots & n \\ 1 & \cdots & n \end{pmatrix} \tag{1.5.2}$$

を**恒等置換**という。2 つの置換 σ と τ の積 $\sigma\tau$ を

$$(\sigma\tau)(i) = \sigma(\tau(i)) \tag{1.5.3}$$

によって定義する[27]。つまり,

$$\begin{aligned} &\sigma = \begin{pmatrix} i_1 & \cdots & i_n \\ j_1 & \cdots & j_n \end{pmatrix},\ \tau = \begin{pmatrix} 1 & \cdots & n \\ i_1 & \cdots & i_n \end{pmatrix} \text{のとき} \\ &\sigma\tau = \begin{pmatrix} i_1 & \cdots & i_n \\ j_1 & \cdots & j_n \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 1 & \cdots & n \\ i_1 & \cdots & i_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & \cdots & n \\ j_1 & \cdots & j_n \end{pmatrix} \end{aligned} \tag{1.5.4}$$

であるとする。$\sigma\tau$ はまた一つの置換となる。一般に $\sigma\tau$ と $\tau\sigma$ は等しいとは限らないことに注意せよ。恒等置換 $\mathbf{1}$ は任意の置換 σ に対し $\sigma\mathbf{1} = \mathbf{1}\sigma = \sigma$ を満たす。また,

$$\sigma\sigma^{-1} = \sigma^{-1}\sigma = \mathbf{1} \tag{1.5.5}$$

であるような σ^{-1} を σ の**逆置換**といい,

$$\sigma^{-1} = \begin{pmatrix} \sigma(1) & \cdots & \sigma(n) \\ 1 & \cdots & n \end{pmatrix} \tag{1.5.6}$$

である。$1, \cdots, n$ を $\sigma(1), \cdots, \sigma(n)$ に並べ替えるのに偶数回の入れ替えが必要となる置換を**偶置換**といい，奇数回の入れ替えが必要となる置換を**奇置換**という。σ が偶置換であれば σ^{-1} も偶置換であり，σ が奇置換であれば σ^{-1} も奇置換である。σ の**符号** $\mathrm{sgn}(\sigma)$ を

$$\mathrm{sgn}(\sigma) = \begin{cases} +1 & (\sigma\text{: 偶置換}) \\ -1 & (\sigma\text{: 奇置換}) \end{cases} \tag{1.5.7}$$

によって定義する。符号について

$$\mathrm{sgn}(\sigma\tau) = \mathrm{sgn}(\sigma)\cdot\mathrm{sgn}(\tau) \qquad \mathrm{sgn}(\sigma^{-1}) = \mathrm{sgn}(\sigma) \tag{1.5.8}$$

が成り立つ。

==========

補足・計算例 14.

[27] 置換の積の定義にはここで採用したものとは逆の順番で定義される流儀もあるので注意が必要です。

置換

・$\{1,2,3\}$ の置換 (置換の総数は 3!個)

$$\begin{pmatrix}1&2&3\\1&2&3\end{pmatrix}\quad\begin{pmatrix}1&2&3\\1&3&2\end{pmatrix}\quad\begin{pmatrix}1&2&3\\2&1&3\end{pmatrix}\quad\begin{pmatrix}1&2&3\\2&3&1\end{pmatrix}\quad\begin{pmatrix}1&2&3\\3&1&2\end{pmatrix}\quad\begin{pmatrix}1&2&3\\3&2&1\end{pmatrix}\tag{1.5.9}$$

・上下の対応が同じ置換は同一の置換

$$\begin{pmatrix}1&2&3\\2&3&1\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}1&3&2\\2&1&3\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}2&1&3\\3&2&1\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}2&3&1\\3&1&2\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}3&1&2\\1&2&3\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}3&2&1\\1&3&2\end{pmatrix}\tag{1.5.10}$$

・置換の積 ($\sigma\tau\neq\tau\sigma$ の例)

$$\sigma=\begin{pmatrix}1&2&3\\1&3&2\end{pmatrix},\ \tau=\begin{pmatrix}1&2&3\\2&3&1\end{pmatrix}\text{のとき}$$

$$\begin{aligned}\sigma\tau&=\begin{pmatrix}1&2&3\\1&3&2\end{pmatrix}\begin{pmatrix}1&2&3\\2&3&1\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}2&3&1\\3&2&1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}1&2&3\\2&3&1\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}1&2&3\\3&2&1\end{pmatrix}\\ \tau\sigma&=\begin{pmatrix}1&2&3\\2&3&1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}1&2&3\\1&3&2\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}1&3&2\\2&1&3\end{pmatrix}\begin{pmatrix}1&2&3\\1&3&2\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}1&2&3\\2&1&3\end{pmatrix}\end{aligned}\tag{1.5.11}$$

・逆置換

$$\begin{pmatrix}1&2&3\\2&3&1\end{pmatrix}^{-1}=\begin{pmatrix}2&3&1\\1&2&3\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}1&2&3\\3&1&2\end{pmatrix}\qquad\begin{pmatrix}1&2&3\\3&1&2\end{pmatrix}^{-1}=\begin{pmatrix}3&1&2\\1&2&3\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}1&2&3\\2&3&1\end{pmatrix}\tag{1.5.12}$$

・置換の符号

$$\operatorname{sgn}\begin{pmatrix}1&2&3\\2&3&1\end{pmatrix}=+1\qquad\operatorname{sgn}\begin{pmatrix}1&2&3\\1&3&2\end{pmatrix}=-1\qquad\text{etc.}\tag{1.5.13}$$

==========

1.5.2 行列式

n 次正方行列 $A=[\,\boldsymbol{a}_1\cdots\boldsymbol{a}_n\,]$ の**行列式** $\det A$ を

$$\det A=\sum_{\sigma}\operatorname{sgn}(\sigma)a_{\sigma(1)1}\cdots a_{\sigma(n)n}\tag{1.5.14}$$

によって定義する。(1.5.14) は，σ を σ^{-1} で置き換えると，

$$\det A=\sum_{\sigma}\operatorname{sgn}(\sigma)a_{1\sigma(1)}\cdots a_{n\sigma(n)}\tag{1.5.15}$$

と書くこともできるから，$\det A$ の列について成り立つ性質は行についても成り立つ。行列式について

(1) $\det[\,\boldsymbol{a}_1 \cdots \boldsymbol{a}_i \cdots \boldsymbol{a}_j \cdots \boldsymbol{a}_n\,] = -\det[\,\boldsymbol{a}_1 \cdots \boldsymbol{a}_j \cdots \boldsymbol{a}_i \cdots \boldsymbol{a}_n\,]$

(2) $\det[\,\boldsymbol{a}_1 \cdots \lambda\boldsymbol{a}_i + \lambda'\boldsymbol{a}'_i \cdots \boldsymbol{a}_n\,] = \lambda\det[\,\boldsymbol{a}_1 \cdots \boldsymbol{a}_i \cdots \boldsymbol{a}_n\,] + \lambda'\det[\,\boldsymbol{a}_1 \cdots \boldsymbol{a}'_i \cdots \boldsymbol{a}_n\,]$

(3) $\det[\,\boldsymbol{e}_1 \cdots \boldsymbol{e}_n\,] = 1$

の 3 つの性質が基本的である。(1) を**交代性**，(2) を**多重線形性**という。(1) より，

$$\det[\,\boldsymbol{a}_{\sigma(1)} \cdots \boldsymbol{a}_{\sigma(n)}\,] = \mathrm{sgn}(\sigma)\det[\,\boldsymbol{a}_1 \cdots \boldsymbol{a}_n\,] \tag{1.5.16}$$

が成り立つ。また，$\boldsymbol{a}_i = \boldsymbol{a}_j$ $(i \neq j)$ のとき，

$$\det[\,\boldsymbol{a}_1 \cdots \boldsymbol{a}_i \cdots \boldsymbol{a}_j \cdots \boldsymbol{a}_n\,] = 0 \tag{1.5.17}$$

である。したがって，$\det A$ の第 i 列に第 j 列の λ 倍を加えても $\det A$ の値は変わらない。つまり，

$$\det[\,\boldsymbol{a}_1 \cdots \boldsymbol{a}_i \cdots \boldsymbol{a}_j \cdots \boldsymbol{a}_n\,] = \det[\,\boldsymbol{a}_1 \cdots \boldsymbol{a}_i + \lambda\boldsymbol{a}_j \cdots \boldsymbol{a}_j \cdots \boldsymbol{a}_n\,] \tag{1.5.18}$$

である。(1.5.18) は行列式の計算においても有用な性質である[28]。積 AB の行列式について，

$$\det AB = \det A \det B \tag{1.5.19}$$

が成り立つ。
[(1.5.19) の証明] AB は

$$AB = [\,\boldsymbol{a}_1 \cdots \boldsymbol{a}_n\,]\begin{bmatrix} b_{11} & \cdots & b_{1n} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ b_{n1} & \cdots & b_{nn} \end{bmatrix} = \left[\,\sum_{k_1=1}^{n} b_{k_1 1}\boldsymbol{a}_{k_1} \cdots \sum_{k_n=1}^{n} b_{k_n n}\boldsymbol{a}_{k_n}\,\right] \tag{1.5.20}$$

[28]行列の基本変形の場合と違って，行や列のスカラー倍や交換を行うと，行列式の値が変わってしまうので注意が必要です。

と書けるから，

$$
\begin{aligned}
\det AB &= \det \left[\sum_{k_1=1}^{n} b_{k_1 1}\boldsymbol{a}_{k_1} \ \cdots \ \sum_{k_n=1}^{n} b_{k_n n}\boldsymbol{a}_{k_n} \right] \\
&= \sum_{k_1=1}^{n} \cdots \sum_{k_n=1}^{n} b_{k_1 1} \cdots b_{k_n n} \det[\, \boldsymbol{a}_{k_1} \ \cdots \ \boldsymbol{a}_{k_n} \,] \\
&= \sum_{\sigma} b_{\sigma(1)1} \cdots b_{\sigma(n)n} \det[\, \boldsymbol{a}_{\sigma(1)} \ \cdots \ \boldsymbol{a}_{\sigma(n)} \,] \\
&= \sum_{\sigma} b_{\sigma(1)1} \cdots b_{\sigma(n)n} \operatorname{sgn}(\sigma) \det[\, \boldsymbol{a}_1 \ \cdots \ \boldsymbol{a}_n \,] \\
&= \det[\, \boldsymbol{a}_1 \ \cdots \ \boldsymbol{a}_n \,] \sum_{\sigma} \operatorname{sgn}(\sigma) b_{\sigma(1)1} \cdots b_{\sigma(n)n} \\
&= \det A \det B
\end{aligned}
\tag{1.5.21}
$$

を得る。 ■

特に，A が正則のとき $AA^{-1} = I$ より $\det AA^{-1} = \det A \det A^{-1} = 1$ であるから，

$$
\det A^{-1} = \frac{1}{\det A} \tag{1.5.22}
$$

となる。また，正方行列の積の行列式について，$\det ABC = \det ACB = \cdots = \det CBA$ のように積の順序を入れ替えても行列式の値は変わらない。2 次または 3 次の行列式の計算法としてよく使われる**サラスの方法**を図 1.1 に示す。サラスの方法は 4 次以上の行列式の計算には使えないことに注意せよ。

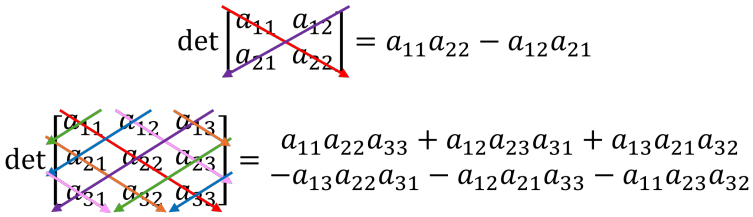


図 1.1: サラスの方法

$A = [\, \boldsymbol{a}_1 \ \cdots \ \boldsymbol{a}_n \,]$ の正則性と $\det A$ について

$$
A \text{ は正則である} \quad \Leftrightarrow \quad \det A \neq 0 \tag{1.5.23}
$$

が成り立つ[29]。したがって，

$$A\text{は正則でない} \quad \Leftrightarrow \quad \det A = 0 \tag{1.5.24}$$

である。

[(1.5.23) の証明] A が正則ならば，$\det A \det A^{-1} = 1$ より，$\det A \neq 0$ である。逆を示すには，その対偶である「A が正則でないならば $\det A = 0$」が成り立つことを示せばよい。(1.3.30) より，A が正則でないならば $\boldsymbol{a}_1, \cdots, \boldsymbol{a}_n$ は線形従属だから，このうち 1 つのベクトル，例えば $\boldsymbol{a}_i$ を他の $n-1$ 個のベクトルの線形結合で表せる。したがって，(1.5.18) によると，$\det A$ の第 i 列の $\boldsymbol{a}_i$ を $\boldsymbol{0}$ に置き換えることができる。つまり，

$$\det[\,\boldsymbol{a}_1 \cdots \boldsymbol{a}_i \cdots \boldsymbol{a}_n\,] = \det[\,\boldsymbol{a}_1 \cdots \boldsymbol{0} \cdots \boldsymbol{a}_n\,] \tag{1.5.25}$$

とすることができる。よって，A が正則でないならば $\det A = 0$ である。 ■

1.5.3 余因子展開

行列式 $\det A$ において，第 i 行と第 j 列を除いてつくる行列式を $A^{(ij)}$ とするとき，$\tilde{A}_{ij} = (-1)^{i+j} A^{(ij)}$ を $\det A$ の (i,j) 成分の**余因子**という。つまり，$\tilde{A}_{ij}$ を

$$\tilde{A}_{ij} = \det[\,\boldsymbol{a}_1 \cdots \underbrace{\boldsymbol{e}_i}_{\text{第 } j \text{ 列}} \cdots \boldsymbol{a}_n\,] = \det \begin{bmatrix} \boldsymbol{\alpha}_1 \\ \vdots \\ \boldsymbol{\varepsilon}_j \\ \vdots \\ \boldsymbol{a}_n \end{bmatrix} \leftarrow \text{第 } i \text{ 行} \tag{1.5.26}$$

によって定義する。$\tilde{A}_{ij}$ を用いることにより，$\det A$ は

$$\det A = \sum_{j=1}^{n} a_{ij}\tilde{A}_{ij} \qquad \det A = \sum_{i=1}^{n} a_{ij}\tilde{A}_{ij} \tag{1.5.27}$$

と表される。(1.5.27) の第 1 式，第 2 式を，$\det A$ の第 i 行，第 j 列による**余因子展開**という。また，$\tilde{A}_{ji}$ を (i,j) 成分とする n 次正方行列を**余因子行列**という[30]。

[29] 通常は余因子行列による逆行列の公式を証明することにより (1.5.23) が成り立つことも示します。詳細については参考文献を参照してください。

[30] 正則行列 A の逆行列 A^{-1} は A の余因子行列を $\det A$ で割ったものであることが知られています。詳細については参考文献を参照してください。

[(1.5.27) の証明] 第 j 列による余因子展開は,

$$\begin{aligned}\det A &= \det[\,\boldsymbol{a}_1 \cdots \boldsymbol{a}_j \cdots \boldsymbol{a}_n\,] = \det[\,\boldsymbol{a}_1 \cdots \sum_{i=1}^{n} a_{ij}\boldsymbol{e}_i \cdots \boldsymbol{a}_n\,] \\ &= \sum_{i=1}^{n} a_{ij} \det[\,\boldsymbol{a}_1 \cdots \boldsymbol{e}_i \cdots \boldsymbol{a}_n\,] = \sum_{i=1}^{n} a_{ij}\tilde{A}_{ij}\end{aligned} \tag{1.5.28}$$

である。第 i 行による余因子展開も同様に示せる。 ■

==========

補足・計算例 15.

行列式

例 1：サラスの方法

$$\det\begin{bmatrix}1 & 2\\ 3 & 4\end{bmatrix} = 1\cdot 4 - 2\cdot 3 = -2 \tag{1.5.29}$$

$$\det\begin{bmatrix}1 & 2 & 3\\ 4 & 5 & 6\\ 7 & 8 & 9\end{bmatrix} = 1\cdot 5\cdot 9 + 2\cdot 6\cdot 7 + 3\cdot 4\cdot 8 - 3\cdot 5\cdot 7 - 2\cdot 4\cdot 9 - 1\cdot 6\cdot 8 = 0 \tag{1.5.30}$$

例 2：(1.5.18) と余因子展開の連携

$$\det\begin{bmatrix}1 & 2\\ 3 & 4\end{bmatrix} \xrightarrow{\text{列：②+=−2×①}} = \det\begin{bmatrix}1 & 0\\ 3 & -2\end{bmatrix} = 1\cdot(-2) = -2 \tag{1.5.31}$$

$$\begin{aligned}&\det\begin{bmatrix}1 & 2 & 3\\ 4 & 5 & 6\\ 7 & 8 & 9\end{bmatrix} \xrightarrow[\text{列：③+=−3×①}]{\text{列：②+=−2×①}} = \det\begin{bmatrix}1 & 0 & 0\\ 4 & -3 & -6\\ 7 & -6 & -12\end{bmatrix} = 1\cdot\det\begin{bmatrix}-3 & -6\\ -6 & -12\end{bmatrix} \\ &\xrightarrow{\text{列：②+=−2×①}} = \det\begin{bmatrix}-3 & 0\\ -6 & 0\end{bmatrix} = 0\end{aligned} \tag{1.5.32}$$

$$\begin{aligned}&\det\begin{bmatrix}7 & 3 & -5 & 4\\ 3 & 1 & -2 & 0\\ 5 & 4 & -5 & 2\\ 8 & 2 & 2 & 3\end{bmatrix} \xrightarrow[\text{列：③+=2×②}]{\text{列：①+=−3×②}} = \det\begin{bmatrix}-2 & 3 & 1 & 4\\ 0 & 1 & 0 & 0\\ -7 & 4 & 3 & 2\\ 2 & 2 & 6 & 3\end{bmatrix} \xrightarrow[\text{行：①↔②}]{\text{列：①↔②}} = (-1)^2\cdot\det\begin{bmatrix}1 & 0 & 0 & 0\\ 3 & -2 & 1 & 4\\ 4 & -7 & 3 & 2\\ 2 & 2 & 6 & 3\end{bmatrix} \\ &= 1\cdot\det\begin{bmatrix}-2 & 1 & 4\\ -7 & 3 & 2\\ 2 & 6 & 3\end{bmatrix} \xrightarrow[\text{列：③+=−4×②}]{\text{列：①+=2×②}} = \det\begin{bmatrix}0 & 1 & 0\\ -1 & 3 & -10\\ 14 & 6 & -21\end{bmatrix} \xrightarrow{\text{列：①↔②}} = (-1)\cdot\det\begin{bmatrix}1 & 0 & 0\\ 3 & -1 & -10\\ 6 & 14 & -21\end{bmatrix} \\ &= (-1)\cdot\begin{bmatrix}-1 & -10\\ 14 & -21\end{bmatrix} \xrightarrow{\text{列：②+=−10×①}} = (-1)\cdot\begin{bmatrix}-1 & 0\\ 14 & -161\end{bmatrix} = -161\end{aligned} \tag{1.5.33}$$

==========

第 2 章　線形空間

本章では，まず，線形空間と基底，および，双対空間と双対基底について述べる。次に，線形空間の特別な写像である線形変換について述べる。さらに，線形代数の応用において重要となる固有値問題について説明する。なお，この章では内積に関する内容は一切扱わず，それらについてはすべて第 3 章で取り上げることにする。

2.1　線形空間と双対空間

2.1.1　線形空間

集合 V の元 $|a\rangle$，$|b\rangle$ について和と複素数 λ によるスカラー倍が定義されていて，

$$|a\rangle + |b\rangle \in V \qquad\qquad \lambda\,|a\rangle \in V \tag{2.1.1}$$

が成り立つとき，V は**線形空間**または**ベクトル空間**であるという。また，$|a\rangle$，$|b\rangle$ を**ベクトル**という。任意の $|a\rangle$ に対し，

$$\mathbf{0} + |a\rangle = |a\rangle \tag{2.1.2}$$

を満たすベクトル $\mathbf{0}$ を**零ベクトル**という。V の部分集合 W が線形空間であるとき，W を V の**部分空間**という。$\{\mathbf{0}\}$ および V 自身は V の部分空間である。

k 個のベクトル $|a_1\rangle, \cdots, |a_k\rangle$ と k 個の複素数 $c_1, \cdots, c_k$ による

$$c_1\,|a_1\rangle + \cdots + c_k\,|a_k\rangle \tag{2.1.3}$$

の形を $|a_1\rangle, \cdots, |a_k\rangle$ の**線形結合**という。$|a_1\rangle, \cdots, |a_k\rangle$ の線形結合の全体を

$$\mathrm{span}(\,|a_1\rangle, \cdots, |a_k\rangle) \tag{2.1.4}$$

と表し，$|a_1\rangle, \cdots, |a_k\rangle$ の**線形包**という。より一般に，S を V の部分集合とするとき，S に属するベクトルの線形結合全体を $\mathrm{span}(S)$ と表し，S の線形包という[1]。S

[1]線形包を表す記号として $[\,S\,]$ や $L(S)$ なども使われます。

は $\mathrm{span}(S)$ を**張る**，あるいは，$\mathrm{span}(S)$ は S によって**張られる**という。$\mathrm{span}(S)$ は V の部分空間である。V の 2 つの部分空間を W_1 と W_2 とするとき，これらの共通部分 $W_1 \cap W_2$ は V の部分空間となる。これを W_1 と W_2 の**交空間**という。一方，W_1 と W_2 の和集合 $W_1 \cup W_2$ は部分空間となるとは限らないが，$\mathrm{span}(W_1 \cup W_2)$ は V の部分空間となる。$\mathrm{span}(W_1 \cup W_2)$ を $W_1 + W_2$ と表し，W_1 と W_2 の**和空間**という。

k 個のベクトル $|a_1\rangle, \cdots, |a_k\rangle$ のすべてについて

$$|a_i\rangle \notin \mathrm{span}(|a_1\rangle, \overset{\text{no } |a_i\rangle}{\cdots\cdots}, |a_k\rangle) \tag{2.1.5}$$

が成り立つとき，$|a_1\rangle, \cdots, |a_k\rangle$ は**線形独立**または**一次独立**であるという。そうでないとき，$|a_1\rangle, \cdots, |a_k\rangle$ は**線形従属**または**一次従属**であるという。言い換えると，$|a_1\rangle, \cdots, |a_k\rangle$ が線形独立であるとは，それらの線形結合について，

$$c_1 |a_1\rangle + \cdots + c_k |a_k\rangle = \mathbf{0} \quad \Leftrightarrow \quad c_1 = 0, \cdots, c_k = 0 \tag{2.1.6}$$

が成り立つことをいう。

線形独立な n 個のベクトル $|e_1\rangle, \cdots, |e_n\rangle$ が V を張るとき，つまり，

$$V = \mathrm{span}(|e_1\rangle, \cdots, |e_n\rangle) \tag{2.1.7}$$

であるとき，$e = \{|e_1\rangle, \cdots, |e_n\rangle\}$ を V の**基底**という。任意のベクトル $|a\rangle$ は基底 e によって

$$|a\rangle = a_1 |e_1\rangle + \cdots + a_n |e_n\rangle \tag{2.1.8}$$

と一意的に表される。また，n を V の**次元**といい，$n = \dim V$ と表す。W_1，W_2 を V の部分空間とするとき，

$$\dim W_1 + \dim W_2 = \dim(W_1 + W_2) + \dim(W_1 \cap W_2) \tag{2.1.9}$$

が成り立つ[2]。

==========

補足・計算例 16.

線形空間・部分空間・和空間の例

例 1：xy 平面上の点の全体は通常の和とスカラー倍について (実)2 次元の線形空間となる。零ベクトルは原点 $(0,0)$ である。基底としては，例えば，点 $(1,0)$ を $\boldsymbol{e}_x$，点 $(0,1)$ を $\boldsymbol{e}_y$ と表すと，$e = \{\boldsymbol{e}_x, \boldsymbol{e}_y\}$

[2]部分空間と次元に関連する基本的性質については参考文献 [3] の第 4 章 §4 と参考文献 [8] の第 2 章 §2.2 を参照してください。

をとることができる。x 軸はその 1 次元の部分空間であり，x 軸 $= \mathrm{span}(\boldsymbol{e}_x)$ である。同様に y 軸も 1 次元の部分空間であり，y 軸 $= \mathrm{span}(\boldsymbol{e}_y)$ である。これらの和空間 x 軸 $+ y$ 軸 $= \mathrm{span}(x$ 軸 $\cup y$ 軸) は xy 平面に一致する。ただし，x 軸 $\cup y$ 軸 は部分空間ではないことに注意せよ (例えば，$\boldsymbol{e}_x$ と $\boldsymbol{e}_y$ はともに x 軸 $\cup y$ 軸 に属するが $\boldsymbol{e}_x + \boldsymbol{e}_y$ は x 軸 $\cup y$ 軸 に属さない)。

例 2：高々 2 次 (2 次以下) の多項式 $a_0 + a_1x + a_2x^2$ の全体は通常の和とスカラー倍について 3 次元の線形空間となる。零ベクトルは 0 である ($a_0 = a_1 = a_2 = 0$)。基底としては，例えば，$e = \{1, x, x^2\}$ をとることができる。したがって，この線形空間は $\mathrm{span}(1, x, x^2)$ と表せる。高々 1 次 (1 次以下) の多項式 $a_0 + a_1x$ の全体は 2 次元の部分空間であり，$\mathrm{span}(1, x)$ と表せる。また，$a_1x + a_2x^2$ の形の多項式全体も 2 次元の部分空間であり，$\mathrm{span}(x, x^2)$ と表せる。これらの和空間 $\mathrm{span}(1, x) + \mathrm{span}(x, x^2) = \mathrm{span}(\mathrm{span}(1, x) \cup \mathrm{span}(x, x^2))$ は $\mathrm{span}(1, x, x^2)$ に一致する。ただし，$\mathrm{span}(1, x) \cup \mathrm{span}(x, x^2)$ は部分空間ではないことに注意せよ (例えば，1 と x^2 はともに $\mathrm{span}(1, x) \cup \mathrm{span}(x, x^2)$ に属するが $1 + x^2$ は $\mathrm{span}(1, x) \cup \mathrm{span}(x, x^2)$ に属さない)。

例 3：2 次正方行列の全体は通常の和とスカラー倍について 4 次元の線形空間となる。零ベクトルは $\begin{bmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix}$ である。基底としては, 例えば, $A_1 = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix}, A_2 = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{bmatrix}, A_3 = \begin{bmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}, A_4 = \begin{bmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}$ とおくと, $e = \{A_1, A_2, A_3, A_4\}$ をとることができる。したがって, この線形空間は $\mathrm{span}(A_1, A_2, A_3, A_4)$ と表せる。$(1, 1)$ 成分以外すべて 0 の 2 次正方行列の全体は 1 次元の部分空間であり，$\mathrm{span}(A_1)$ と表せる。$(2, 2)$ 成分以外すべて 0 の 2 次正方行列の全体は 1 次元の部分空間であり，$\mathrm{span}(A_4)$ と表せる。これらの和空間 $\mathrm{span}(A_1) + \mathrm{span}(A_4) = \mathrm{span}(\mathrm{span}(A_1) \cup \mathrm{span}(A_4))$ は $\mathrm{span}(A_1, A_2, A_3, A_4)$ の 2 次元の部分空間となる。ただし，$\mathrm{span}(A_1) \cup \mathrm{span}(A_4)$ は部分空間ではないことに注意せよ (例えば, A_1 と A_4 はともに $\mathrm{span}(A_1) \cup \mathrm{span}(A_4)$ に属するが $A_1 + A_4 = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}$ は $\mathrm{span}(A_1) \cup \mathrm{span}(A_4$ に属さない)。

線形空間ではない集合の例

例 4：xy 平面上の原点を中心とする単位円の周上および内部の点の集合は線形空間ではない。例えば，点 $(1, 0)$ と点 $(0, 1)$ の和 $(1, 1)$ はこの集合に属さない。あるいは，点 $(1, 0)$ を 3 倍した点 $(3, 0)$ はこの集合に属さない。

例 5：2 次多項式 $a_0 + a_1x + a_2x^2$ $(a_2 \neq 0)$ 全体の集合は線形空間ではない。例えば，$1 + x + x^2$ と $1 + x - x^2$ の和 $2 + 2x$ はこの集合に属さない。あるいは，$1 + x + x^2$ を 0 倍した 0 はこの集合に属さない。

例 6：正則な 2 次正方行列全体の集合は線形空間ではない。例えば，$\begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}$ と $\begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix}$ はともに正則であるが，これらの和 $\begin{bmatrix} 2 & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix}$ は正則でないからこの集合に属さない。あるいは，$\begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}$ を 0

倍した $\begin{bmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix}$ は正則でないからこの集合に属さない。
==========

2.1.2 双対空間

線形空間 V の基底を $e = \{ |e_1\rangle, \cdots, |e_n\rangle \}$ とするとき,

$$|a\rangle = a_1 |e_1\rangle + \cdots + a_n |e_n\rangle \quad \mapsto \quad \langle \varepsilon_i | a\rangle = a_i \quad (i = 1, \cdots, n) \tag{2.1.10}$$

によって定義される $\varepsilon = \{ \langle \varepsilon_1|, \cdots, \langle \varepsilon_n| \}$ を基底 e の**双対基底**という[3]。つまり, $\langle \varepsilon_i|$ は $|a\rangle$ を基底 e によって表したときに $|e_i\rangle$ の項の係数 a_i を取り出す演算である。特に,

$$\langle \varepsilon_i | e_j\rangle = \delta_{ij} \tag{2.1.11}$$

である。本書では $|\, e\,]$ および $[\, \varepsilon\,|$ を

$$|\, e\,] = [\, |e_1\rangle \cdots |e_n\rangle\,] \qquad\qquad [\, \varepsilon\,| = \begin{bmatrix} \langle \varepsilon_1| \\ \vdots \\ \langle \varepsilon_n| \end{bmatrix} \tag{2.1.12}$$

によって定義し，補章 A.1 の**行列記法**と補章 A.2 の**略記法**を合わせて使うことにする[4]。例えば，(2.1.11) は

$$I = [\, \varepsilon\,|\, e\,] \tag{2.1.13}$$

と表せる。(2.1.13) を詳しく書けば,

$$I = [\, \varepsilon\,|\, e\,] = \begin{bmatrix} \langle \varepsilon_1| \\ \vdots \\ \langle \varepsilon_n| \end{bmatrix} [\, |e_1\rangle \cdots |e_n\rangle\,] = \begin{bmatrix} \langle \varepsilon_1|e_1\rangle & \cdots & \langle \varepsilon_1|e_n\rangle \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \langle \varepsilon_n|e_1\rangle & \cdots & \langle \varepsilon_n|e_n\rangle \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & & O \\ & \ddots & \\ O & & 1 \end{bmatrix} \tag{2.1.14}$$

である。$\langle \varepsilon_1|, \cdots, \langle \varepsilon_n|$ の線形結合

$$\langle \alpha| = \alpha_1 \langle \varepsilon_1| + \cdots + \alpha_n \langle \varepsilon_n| \tag{2.1.15}$$

[3]論理的には V から $\mathbb{C}$ への線形写像である線形形式を先に定義してから双対基底を導入すべきですが，わかりやすさを優先して本書ではこのように扱うことにします。

[4]行列記法は他の文献でもよく使われる書き方ですが，略記法は本書のみで用いるものであり，広く使われる書き方ではないことに注意してください。

を**線形形式**または**一次形式**という[5]。線形形式の全体は n 次元線形空間をなす。これを V の**双対空間**といい，V^* と表す。線形形式 $\langle\alpha|$ とベクトル $|a\rangle$ から 1 つの複素数 $\langle\alpha|a\rangle$ を定める演算

$$\langle\alpha|a\rangle = \alpha_1 a_1 + \cdots + \alpha_n a_n \tag{2.1.16}$$

を $\langle\alpha|$ と $|a\rangle$ の**ペアリング**という[6]。

==========

補足・計算例 17.

双対空間
高々 2 次の多項式 $a(x) = a_0 + a_1 x + a_2 x^2$ 全体のなす線形空間を V とする。V の基底 $e = \{1, x, x^2\}$ に対し，

$$\varepsilon_0(a(x)) = a_0 \qquad \varepsilon_1(a(x)) = a_1 \qquad \varepsilon_2(a(x)) = a_2 \tag{2.1.17}$$

によって定義される $\varepsilon = \{\varepsilon_0(\,\cdot\,), \varepsilon_1(\,\cdot\,), \varepsilon_2(\,\cdot\,)\}$ は e の双対基底である[7]。線形形式

$$\alpha(\,\cdot\,) = \alpha_0\varepsilon_0(\,\cdot\,) + \alpha_1\varepsilon_1(\,\cdot\,) + \alpha_2\varepsilon_2(\,\cdot\,) \tag{2.1.18}$$

の全体は V の双対空間 V^* となる。$\alpha(\,\cdot\,)$ と $a(x)$ のペアリングは

$$\alpha(a(x)) = \alpha_0\varepsilon_0(a(x)) + \alpha_1\varepsilon_1(a(x)) + \alpha_2\varepsilon_2(a(x)) = \alpha_0 a_0 + \alpha_1 a_1 + \alpha_2 a_2 \tag{2.1.19}$$

である。

==========

2.2 線形変換・射影・完全性関係

2.2.1 線形変換

V を線形空間とする。V から V 自身への写像 $\hat{X}$ が

$$\hat{X}(\,|a\rangle + |b\rangle) = \hat{X}\,|a\rangle + \hat{X}\,|b\rangle \qquad \hat{X}(\lambda\,|a\rangle) = \lambda\hat{X}(\,|a\rangle) \tag{2.2.1}$$

[5] (2.1.16) で $a_1, \cdots, a_n$ を $x_1, \cdots, x_n$ に書き換えてみると，$\langle\alpha|x\rangle = \alpha_1 x_1 + \cdots + \alpha_n x_n$ と書けます。これが $\langle\alpha|$ が線形形式または一次形式とよばれる理由です。例えば $n = 2$ のとき，変数を x，y とすると，一次形式とは $ax + by$ の形の 1 次同次多項式のことです。2 次同次多項式 $ax^2 + bxy + cy^2$ を二次形式とよぶことを知っていれば，なぜ $\langle\alpha|$ が線形形式または一次形式とよばれるかは納得がいくかと思います。

[6] 数学ではペアリング $\langle\alpha|a\rangle$ を $\alpha(a)$ あるいは $\langle\alpha, a\rangle$ と表します。

[7] 双対基底をこのような形で定義されると，かなり漠然とした感じがするかもしれません。しかし，§2.3.3 で述べるように，双対基底を行ベクトルとして表現するとはっきりとイメージできるようになります。

を満たすとき，$\hat{X}$ を**線形変換**という[8]。任意のベクトル $|a\rangle$ に対して，

$$\hat{I}\,|a\rangle = |a\rangle \tag{2.2.2}$$

を満たす線形変換 $\hat{I}$ を**恒等変換**という。線形空間 V の恒等変換であることを明示する場合は $\hat{I}_V$ と表すことにする[9]。任意のベクトル $|a\rangle$ に対して，

$$\hat{0}\,|a\rangle = \mathbf{0} \tag{2.2.3}$$

を満たす線形変換 $\hat{0}$ を**零変換**という。混乱の生じない限り，零変換は単に 0 と表してもよい。

W を V の部分空間とするとき，$\hat{X}(W)$ を

$$\hat{X}(W) = \{\hat{X}\,|a\rangle \mid |a\rangle \in W\} \tag{2.2.4}$$

とおき，W の $\hat{X}$ による**像**という。$\hat{X}(W)$ は V の部分空間をなす。特に，

$$\hat{X}(W) \subseteq W \tag{2.2.5}$$

が成り立つとき，W は $\hat{X}$ に関して**不変**である，あるいは，$\hat{X}$-不変であるという。また，W を $\hat{X}$ に関する**不変部分空間**という[10]。W が $\hat{X}$-不変であるとき，$\hat{X}$ を W の線形変換とみなすことができる[11]。$\{\mathbf{0}\}$ および V 自身は $\hat{X}$ に関する不変部分空間である。

$\hat{X}(V)$ は V の部分空間をなす。$\hat{X}(V)$ を $\hat{X}$ の**像**といい，$\operatorname{im}\hat{X}$ と表す[12]。また，$\hat{X}\,|a\rangle = \mathbf{0}$ となる $|a\rangle$ の全体も V の部分空間をなす。これを $\hat{X}$ の**核**といい，$\ker\hat{X}$ と表す。$\operatorname{im}\hat{X}$ および $\ker\hat{X}$ は $\hat{X}$ に関する不変部分空間である。$\dim\operatorname{im}\hat{X}$ を $\hat{X}$ の**階数**といい，$\operatorname{rank}\hat{X}$ と表す。像と核の次元について，$\dim V = \dim\operatorname{im}\hat{X} + \dim\ker\hat{X}$ が成り立つ。これを**次元定理**という。

---

[8]線形変換は §2.5 で述べる線形写像の特殊な場合とみることもできます。しかし，§2.4 で述べる線形変換の固有値問題は物理への応用に際して重要だという理由で，本書では主に線形変換について扱います。

[9]恒等変換を表す記号として id あるいは id_V もよく使われます。

[10]第 6 章で述べる群の表現を理解するためには，不変部分空間についてしっかり理解しておく必要があります。

[11]$\hat{X}$ を W の線形変換とみなすときは $\hat{X}|_W$ のように表すこともあります。$\hat{X}|_W$ を $\hat{X}$ の W への**制限**といいます。

[12]像という用語は V の任意の部分空間 W に対して用いられますが，単に「$\hat{X}$ の像」という場合は，V の $\hat{X}$ による像，つまり，$\operatorname{im}\hat{X} = \hat{X}(V)$ のことを指します。

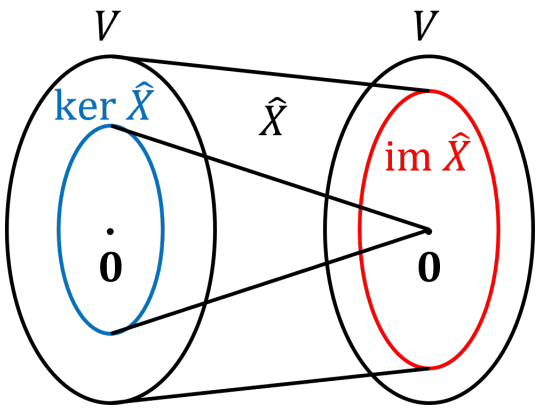


図 2.1: 像と核

線形変換の和 $\hat{X}+\hat{Y}$，スカラー倍 $\lambda\hat{X}$，積 $\hat{X}\hat{Y}$ を

$$\begin{aligned}(\hat{X}+\hat{Y})\,|a\rangle &= \hat{X}\,|a\rangle + \hat{Y}\,|a\rangle \\ (\lambda\hat{X})\,|a\rangle &= \lambda(\hat{X}\,|a\rangle) \\ (\hat{X}\hat{Y})\,|a\rangle &= \hat{X}(\hat{Y}\,|a\rangle)\end{aligned} \tag{2.2.6}$$

によって定義する[13]。ここで，$|a\rangle$ は任意のベクトルである。(2.2.6) の和とスカラー倍によって線形変換の全体は線形空間となる[14]。

$\hat{X}$ と $\hat{Y}$ の**交換子** $[\,\hat{X},\hat{Y}\,]$ を

$$[\,\hat{X},\hat{Y}\,] = \hat{X}\hat{Y} - \hat{Y}\hat{X} \tag{2.2.7}$$

によって定義する[15]。明らかに

$$[\,\hat{X},\hat{Y}\,] = -[\,\hat{Y},\hat{X}\,] \tag{2.2.8}$$

が成り立つ。$[\,\hat{X},\hat{Y}\,]=\hat{0}$ のとき，$\hat{X}$ と $\hat{Y}$ は**可換**あるいは**交換可能**であるという。そうでないとき，$\hat{X}$ と $\hat{Y}$ は**非可換**であるという。交換子について

$$[\,\hat{X}+\hat{Y},\hat{Z}\,] = [\,\hat{X},\hat{Z}\,] + [\,\hat{Y},\hat{Z}\,] \qquad [\,\hat{Z},\hat{X}+\hat{Y}\,] = [\,\hat{Z},\hat{X}\,] + [\,\hat{Z},\hat{Y}\,] \tag{2.2.9}$$

[13] $\hat{X}$，$\hat{Y}$ を写像らしく φ_X，φ_Y のように表すと，積 $\hat{X}\hat{Y}$ は合成写像 $\varphi_X\circ\varphi_Y$ のことです。

[14] 線形変換全体のなす線形空間は第 3 章の (3.2.10) のところで述べるヒルベルト-シュミット内積により内積空間となります。

[15] 交換子によって表される**交換関係**は量子力学の**不確定性原理**と密接に関連しています。また，交換子は**リー代数**の公理に登場する**リー括弧積**の代表的な例であり，量子力学でも**角運動量**の理論において重要な役割を果たします。

$$[\,\lambda\hat{X},\hat{Y}\,]=\lambda[\,\hat{X},\hat{Y}\,]\qquad[\,\hat{X},\lambda\hat{Y}\,]=\lambda[\,\hat{X},\hat{Y}\,]\tag{2.2.10}$$

$$[\,\hat{X},\hat{X}]=\hat{0}\tag{2.2.11}$$

$$[\,\hat{X},[\,\hat{Y},\hat{Z}\,]]+[\,\hat{Y},[\,\hat{Z},\hat{X}\,]]+[\,\hat{Z},[\,\hat{X},\hat{Y}\,]]=\hat{0}\tag{2.2.12}$$

などが成り立つ[16]。
[(2.2.12) の証明] (2.2.12) の左辺を計算すると，

$$\begin{aligned}\hat{X}(\hat{Y}\hat{Z}-\hat{Z}\hat{Y})-(\hat{Y}\hat{Z}-\hat{Z}\hat{Y})\hat{X}+\hat{Y}(\hat{Z}\hat{X}-\hat{X}\hat{Z})-(\hat{Z}\hat{X}-\hat{X}\hat{Z})\hat{Y}\\ +\hat{Z}(\hat{X}\hat{Y}-\hat{Y}\hat{X})-(\hat{X}\hat{Y}-\hat{Y}\hat{X})\hat{Z}=\hat{0}\end{aligned}\tag{2.2.13}$$

となる。 ■

交換子の計算において，

$$\begin{aligned}[\,\hat{X},\hat{Y}\hat{Z}\,]&=\hat{Y}[\,\hat{X},\hat{Z}\,]+[\,\hat{X},\hat{Y}\,]\hat{Z}\\ [\,\hat{Y}\hat{Z},\hat{X}\,]&=\hat{Y}[\,\hat{Z},\hat{X}\,]+[\,\hat{Y},\hat{X}\,]\hat{Z}\end{aligned}\tag{2.2.14}$$

も役に立つ公式である。
[(2.2.14) の証明] (2.2.14) の第 1 式は以下のように示される。$[\,\hat{X},\hat{Y}\hat{Z}\,]=\hat{X}\hat{Y}\hat{Z}-\hat{Y}\hat{Z}\hat{X}=\hat{X}\hat{Y}\hat{Z}-\hat{Y}\hat{X}\hat{Z}+\hat{Y}\hat{X}\hat{Z}-\hat{Y}\hat{Z}\hat{X}=(\hat{X}\hat{Y}-\hat{Y}\hat{X})\hat{Z}+\hat{Y}(\hat{X}\hat{Z}-\hat{Z}\hat{X})=[\,\hat{X},\hat{Y}\,]\hat{Z}+\hat{Y}[\,\hat{X},\hat{Z}\,]=\hat{Y}[\,\hat{X},\hat{Z}\,]+[\,\hat{X},\hat{Y}\,]\hat{Z}$ である。(2.2.14) の第 2 式も同様に示せる。 ■

$\hat{X}$ に対し $\hat{X}\hat{Y}=\hat{Y}\hat{X}=\hat{I}$ を満たす線形変換 $\hat{Y}$ が存在するとき，$\hat{X}$ は**正則**あるいは**正則変換**であるという。$\hat{Y}=\hat{X}^{-1}$ と表し，$\hat{X}^{-1}$ を $\hat{X}$ の**逆変換**という。つまり，$\hat{X}$ が正則のとき逆変換 $\hat{X}^{-1}$ が存在して，

$$\hat{X}\hat{X}^{-1}=\hat{X}^{-1}\hat{X}=\hat{I}\tag{2.2.15}$$

が成り立つ。$\hat{X}$ が正則であるための必要十分条件は $\operatorname{rank}\hat{X}=\dim V$ となることである。正則変換の積の逆変換はそれぞれの逆変換の逆順の積となる。例えば，正則変換 $\hat{X}$，$\hat{Y}$，$\hat{Z}$ の積 $\hat{X}\hat{Y}\hat{Z}$ の逆変換は $(\hat{X}\hat{Y}\hat{Z})^{-1}=\hat{Z}^{-1}\hat{Y}^{-1}\hat{X}^{-1}$ である。

任意のベクトル $|b\rangle$ に対して，線形変換 $|a\rangle\langle\alpha|$ を

$$(\,|a\rangle\langle\alpha|)\,|b\rangle=\,|a\rangle\,(\,\langle\alpha|b\rangle)\tag{2.2.16}$$

[16] (2.2.9)-(2.2.12) はリー括弧積の基本的性質です。(2.2.12) を**ヤコビ恒等式**といいます。

によって定義する。$|a\rangle\langle\alpha|$ を**ダイアド**という。また，ダイアドの線形結合を**ダイアディック**という。

$\hat{X}$ が与えられたとき，任意の線形形式 $\langle\alpha|$ に対する $\hat{X}$ の右からの作用を

$$(\langle\alpha|\,\hat{X})\,|a\rangle = \langle\alpha|\,(\hat{X}\,|a\rangle) \tag{2.2.17}$$

によって定義する[17]。ここで，$|a\rangle$ は任意のベクトルである。

==========

補足・計算例 18.

回転と鏡映

xy 平面上の点全体のなす線形空間における**回転**や**鏡映**は線形変換である。

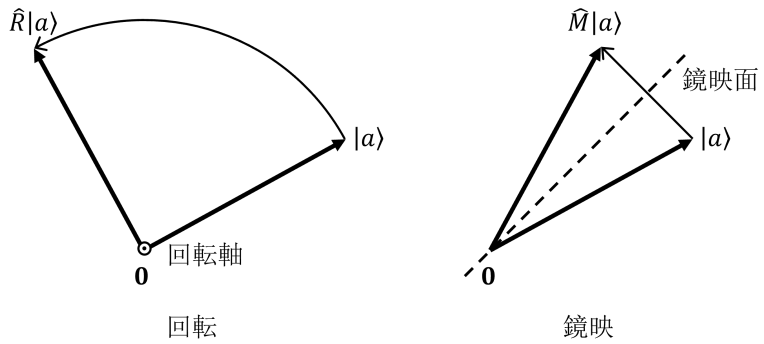


図 2.2: 回転と鏡映

像・核・階数・逆変換

高々 2 次の多項式 $a(x) = a_0 + a_1x + a_2x^2$ 全体のなす線形空間を V とする。**微分演算子**[18]，**並進演算子**[19]，**反転演算子**[20]を以下の例 1，例 2，例 3 のように定義する。

例 1：微分演算子

$$D_x : a_0 + a_1x + a_2x^2 \mapsto a_1 + 2a_2x \tag{2.2.18}$$

は V の線形変換である。$\mathrm{im}\,D_x$ は高々 1 次の多項式全体のなす部分空間であり，$\dim \mathrm{im}\,D_x = 2$ である。$\ker D_x$ は定数項 $(a(x) = a_0)$ 全体のなす部分空間であり，$\dim \ker D_x = 1$ である。D_x の階

[17] $\langle\alpha|$，$\hat{X}$ を写像らしく ψ_α，φ_X のように表すと，$\langle\alpha|\,\hat{X}$ は合成写像 $\psi_\alpha \circ \varphi_X$ のことです。

[18]本書では微分演算子 $\frac{d}{dx}$，$\frac{\partial}{\partial x}$ などを必要に応じて D_x，∂_x などのように記すことにします。微分演算子に $-i\hbar$ を掛けたもの ($\hbar$ はプランク定数 h を 2π で割った定数) は量子力学で**運動量演算子**として重要な役割を果たします。

[19]並進演算子は微分演算子 (運動量演算子) によって表され (補足・計算例 19)，微分演算子と同様に重要な演算子です。

[20]反転演算子は量子力学で状態の偶奇性に関連する重要な演算子です。**反転**は**空間反転**あるいは**パリティ変換**とよばれることが多いですが，本書では単に反転とよぶことにします。

数は $\operatorname{rank} D_x = \dim \operatorname{im} D_x = 2 < \dim V = 3$ であるから，D_x は正則でない。したがって，逆変換は存在しない。

例 2：並進演算子

$$\mathscr{T}_c : a_0 + a_1 x + a_2 x^2 \mapsto a_0 + a_1(x-c) + a_2(x-c)^2 \tag{2.2.19}$$

は V の線形変換である。$\operatorname{im} \mathscr{T}_c = V$ であり，$\dim \operatorname{im} \mathscr{T}_c = 3$ である。$\ker \mathscr{T}_c = \{0\}$ であり，$\dim \ker \mathscr{T}_c = 0$ である。$\mathscr{T}_c$ の階数は $\operatorname{rank} \mathscr{T}_c = \dim \operatorname{im} \mathscr{T}_c = 3 = \dim V$ であるから，$\mathscr{T}_c$ は正則である。したがって，逆変換 $\mathscr{T}_c^{-1}$ が存在する。実際，$\mathscr{T}_c^{-1} = \mathscr{T}_{-c}$ である。

例 3：反転演算子

$$\mathscr{P} : a_0 + a_1 x + a_2 x^2 \mapsto a_0 + a_1(-x) + a_2(-x)^2 \tag{2.2.20}$$

は V の線形変換である。$\operatorname{im} \mathscr{P} = V$ であり, $\dim \operatorname{im} \mathscr{P} = 3$ である。$\ker \mathscr{P} = \{0\}$ であり, $\dim \ker \mathscr{P} = 0$ である。$\mathscr{P}$ の階数は $\operatorname{rank} \mathscr{P} = \dim \operatorname{im} \mathscr{P} = 3 = \dim V$ であるから，$\mathscr{P}$ は正則である。したがって，逆変換 $\mathscr{P}^{-1}$ が存在する。実際，$\mathscr{P}^{-1} = \mathscr{P}$ である。

交換子

高々 2 次の多項式 $a(x) = a_0 + a_1 x + a_2 x^2$ 全体のなす線形空間を V とする。

例 4：微分演算子 D_x と並進演算子 $\mathscr{T}_c$(可換)[21]

$$\begin{aligned} \mathscr{T}_c :&\ a_0 + a_1 x + a_2 x^2 \mapsto a_0 + a_1(x-c) + a_2(x-c)^2 \\ D_x :&\ a_0 + a_1(x-c) + a_2(x-c)^2 \mapsto a_1 + 2a_2(x-c) \\ D_x\mathscr{T}_c :&\ a_0 + a_1 x + a_2 x^2 \mapsto a_1 + 2a_2(x-c) \end{aligned} \tag{2.2.21}$$

$$\begin{aligned} D_x :&\ a_0 + a_1 x + a_2 x^2 \mapsto a_1 + 2a_2 x \\ \mathscr{T}_c :&\ a_1 + 2a_2 x \mapsto a_1 + 2a_2(x-c) \\ \mathscr{T}_c D_x :&\ a_0 + a_1 x + a_2 x^2 \mapsto a_1 + 2a_2(x-c) \end{aligned} \tag{2.2.22}$$

$$D_x\mathscr{T}_c = \mathscr{T}_c D_x \qquad [\,D_x,\, \mathscr{T}_c\,] = 0 \tag{2.2.23}$$

例 5：微分演算子 D_x と反転演算子 $\mathscr{P}$(非可換)

$$\begin{aligned} \mathscr{P} :&\ a_0 + a_1 x + a_2 x^2 \mapsto a_0 + a_1(-x) + a_2(-x)^2 \\ D_x :&\ a_0 + a_1(-x) + a_2(-x)^2 \mapsto -a_1 + 2a_2 x \\ D_x\mathscr{P} :&\ a_0 + a_1 x + a_2 x^2 \mapsto -a_1 + 2a_2 x \end{aligned} \tag{2.2.24}$$

$$\begin{aligned} D_x :&\ a_0 + a_1 x + a_2 x^2 \mapsto a_1 + 2a_2 x \\ \mathscr{P} :&\ a_1 + 2a_2 x \mapsto a_1 + 2a_2(-x) \\ \mathscr{P} D_x :&\ a_0 + a_1 x + a_2 x^2 \mapsto a_1 - 2a_2 x \end{aligned} \tag{2.2.25}$$

[21] 補足・計算例 19 で述べるように，並進演算子は微分演算子の指数関数として表されます。これら 2 つの演算子が可換なのはそのためです。

$$D_x\mathscr{P} \neq \mathscr{P}D_x \qquad [\,D_x,\,\mathscr{P}\,] \neq 0 \tag{2.2.26}$$

例 6：並進演算子 $\mathscr{T}_c(c \neq 0)$ と反転演算子 $\mathscr{P}$(非可換)

$$\begin{aligned}
\mathscr{P}:\ & a_0 + a_1x + a_2x^2 \mapsto a_0 + a_1(-x) + a_2(-x)^2 \\
\mathscr{T}_c:\ & a_0 + a_1(-x) + a_2(-x)^2 \mapsto a_0 + a_1(-x+c) + a_2(-x+c)^2 \\
\mathscr{T}_c\mathscr{P}:\ & a_0 + a_1x + a_2x^2 \mapsto a_0 + a_1(-x+c) + a_2(-x+c)^2
\end{aligned} \tag{2.2.27}$$

$$\begin{aligned}
\mathscr{T}_c:\ & a_0 + a_1x + a_2x^2 \mapsto a_0 + a_1(x-c) + a_2(x-c)^2 \\
\mathscr{P}:\ & a_0 + a_1(x-c) + a_2(x-c)^2 \mapsto a_0 + a_1(-x-c) + a_2(-x-c)^2 \\
\mathscr{P}\mathscr{T}_c:\ & a_0 + a_1x + a_2x^2 \mapsto a_0 + a_1(-x-c) + a_2(-x-c)^2
\end{aligned} \tag{2.2.28}$$

$$\mathscr{T}_c\mathscr{P} \neq \mathscr{P}\mathscr{T}_c \qquad [\,\mathscr{T}_c,\,\mathscr{P}\,] \neq 0 \tag{2.2.29}$$

角運動量演算子の交換関係

例 7：**角運動量演算子** $\hat{\boldsymbol{J}} = \hat{J}_x\,\boldsymbol{e}_x + \hat{J}_y\,\boldsymbol{e}_y + \hat{J}_z\,\boldsymbol{e}_z$ は交換関係

$$[\,\hat{J}_x, \hat{J}_y\,] = i\hat{J}_z \qquad [\,\hat{J}_y, \hat{J}_z\,] = i\hat{J}_x \qquad [\,\hat{J}_z, \hat{J}_x\,] = i\hat{J}_y \tag{2.2.30}$$

を満たす線形変換である[22]。角運動量演算子の 2 乗を

$$\hat{\boldsymbol{J}}^2 = \hat{J}_x^2 + \hat{J}_y^2 + \hat{J}_z^2 \tag{2.2.31}$$

によって定義すると，

$$[\,\hat{\boldsymbol{J}}^2, \hat{J}_x\,] = \hat{0} \qquad [\,\hat{\boldsymbol{J}}^2, \hat{J}_y\,] = \hat{0} \qquad [\,\hat{\boldsymbol{J}}^2, \hat{J}_z\,] = \hat{0} \tag{2.2.32}$$

が成り立つ。

[(2.2.32) の証明] $[\,\hat{\boldsymbol{J}}^2, \hat{J}_x\,] = \hat{0}$ を示す。左辺を計算すると，

$$\begin{aligned}
[\,\hat{\boldsymbol{J}}^2, \hat{J}_x\,] &= [\,\hat{J}_x^2 + \hat{J}_y^2 + \hat{J}_z^2, \hat{J}_x\,] = [\,\hat{J}_x^2, \hat{J}_x\,] + [\,\hat{J}_y^2, \hat{J}_x\,] + [\,\hat{J}_z^2, \hat{J}_x\,] \\
&= \hat{J}_y[\,\hat{J}_y, \hat{J}_x\,] + [\,\hat{J}_y, \hat{J}_x\,]\hat{J}_y + \hat{J}_z[\,\hat{J}_z, \hat{J}_x\,] + [\,\hat{J}_z, \hat{J}_x\,]\hat{J}_z \\
&= \hat{J}_y(-i\hat{J}_z) + (-i\hat{J}_z)\hat{J}_y + \hat{J}_z(i\hat{J}_y) + (i\hat{J}_y)\hat{J}_z = \hat{0}
\end{aligned} \tag{2.2.33}$$

となる。$[\,\hat{\boldsymbol{J}}^2, \hat{J}_y\,] = \hat{0}$，$[\,\hat{\boldsymbol{J}}^2, \hat{J}_z\,] = \hat{0}$ についても同様に示せる。 ■

例 8：**軌道角運動量演算子** $\boldsymbol{\ell} = \ell_x\,\boldsymbol{e}_x + \ell_y\,\boldsymbol{e}_y + \ell_z\,\boldsymbol{e}_z$ は，球座標 (r, θ, ϕ) の天頂角 θ と方位角 ϕ を用いて，

$$\ell_x = -i\left(-\frac{\cos\phi}{\tan\theta}\frac{\partial}{\partial\phi} - \sin\phi\frac{\partial}{\partial\theta}\right) \qquad \ell_y = -i\left(-\frac{\sin\phi}{\tan\theta}\frac{\partial}{\partial\phi} + \cos\phi\frac{\partial}{\partial\theta}\right) \qquad \ell_z = -i\frac{\partial}{\partial\phi} \tag{2.2.34}$$

[22]角運動量演算子も運動量演算子と同じく量子力学で重要な演算子です。なお，ここで与えた角運動量演算子は $\hbar$($\hbar$ はプランク定数 h を 2π で割った定数) を単位として表したものです。

と表される[23]。ℓ_x，ℓ_y，ℓ_z は角運動量演算子の交換関係

$$[\,\ell_x, \ell_y\,] = i\ell_z \qquad [\,\ell_y, \ell_z\,] = i\ell_x \qquad [\,\ell_z, \ell_x\,] = i\ell_y \tag{2.2.35}$$

を満たす[24]。したがって，軌道角運動量演算子の 2 乗を

$$\boldsymbol{\ell}^2 = \ell_x^2 + \ell_y^2 + \ell_z^2 \tag{2.2.36}$$

とすると，(2.2.32) より，

$$[\,\boldsymbol{\ell}^2, \ell_x\,] = 0 \qquad [\,\boldsymbol{\ell}^2, \ell_y\,] = 0 \qquad [\,\boldsymbol{\ell}^2, \ell_z\,] = 0 \tag{2.2.37}$$

が成り立つ。
[(2.2.35) の証明] $[\,\ell_x, \ell_y\,] = i\ell_z$ を示す。$\ell_x\ell_y$，$\ell_y\ell_x$ を計算すると，

$$\begin{aligned}
\ell_x\ell_y &= (-i)^2\left(-\frac{\cos\phi}{\tan\theta}\frac{\partial}{\partial\phi} - \sin\phi\frac{\partial}{\partial\theta}\right)\left(-\frac{\sin\phi}{\tan\theta}\frac{\partial}{\partial\phi} + \cos\phi\frac{\partial}{\partial\theta}\right) \\
&= -\left(\frac{\cos\phi}{\tan\theta}\frac{\partial}{\partial\phi}\frac{\sin\phi}{\tan\theta}\frac{\partial}{\partial\phi} - \frac{\cos\phi}{\tan\theta}\frac{\partial}{\partial\phi}\cos\phi\frac{\partial}{\partial\theta} + \sin\phi\frac{\partial}{\partial\theta}\frac{\sin\phi}{\tan\theta}\frac{\partial}{\partial\phi} - \sin\phi\frac{\partial}{\partial\theta}\cos\phi\frac{\partial}{\partial\theta}\right) \\
&= -\left(\frac{\cos\phi}{\tan\theta}\frac{\cos\phi}{\tan\theta}\frac{\partial}{\partial\phi} + \frac{\cos\phi}{\tan\theta}\frac{\sin\phi}{\tan\theta}\frac{\partial^2}{\partial\phi^2} + \frac{\cos\phi}{\tan\theta}\sin\phi\frac{\partial}{\partial\theta} - \frac{\cos\phi}{\tan\theta}\cos\phi\frac{\partial^2}{\partial\phi\partial\theta}\right. \\
&\qquad\left. - \sin\phi\frac{\sin\phi}{\tan^2\theta\cos^2\theta}\frac{\partial}{\partial\phi} + \sin\phi\frac{\sin\phi}{\tan\theta}\frac{\partial^2}{\partial\theta\partial\phi} - \sin\phi\cos\phi\frac{\partial^2}{\partial\theta^2}\right)
\end{aligned} \tag{2.2.38}$$

$$\begin{aligned}
\ell_y\ell_x &= (-i)^2\left(-\frac{\sin\phi}{\tan\theta}\frac{\partial}{\partial\phi} + \cos\phi\frac{\partial}{\partial\theta}\right)\left(-\frac{\cos\phi}{\tan\theta}\frac{\partial}{\partial\phi} - \sin\phi\frac{\partial}{\partial\theta}\right) \\
&= -\left(\frac{\sin\phi}{\tan\theta}\frac{\partial}{\partial\phi}\frac{\cos\phi}{\tan\theta}\frac{\partial}{\partial\phi} + \frac{\sin\phi}{\tan\theta}\frac{\partial}{\partial\phi}\sin\phi\frac{\partial}{\partial\theta} - \cos\phi\frac{\partial}{\partial\theta}\frac{\cos\phi}{\tan\theta}\frac{\partial}{\partial\phi} - \cos\phi\frac{\partial}{\partial\theta}\sin\phi\frac{\partial}{\partial\theta}\right) \\
&= -\left(-\frac{\sin\phi}{\tan\theta}\frac{\sin\phi}{\tan\theta}\frac{\partial}{\partial\phi} + \frac{\sin\phi}{\tan\theta}\frac{\cos\phi}{\tan\theta}\frac{\partial^2}{\partial\phi^2} + \frac{\sin\phi}{\tan\theta}\cos\phi\frac{\partial}{\partial\theta} + \frac{\sin\phi}{\tan\theta}\sin\phi\frac{\partial^2}{\partial\phi\partial\theta}\right. \\
&\qquad\left. + \cos\phi\frac{\cos\phi}{\tan^2\theta\cos^2\theta}\frac{\partial}{\partial\phi} - \cos\phi\frac{\cos\phi}{\tan\theta}\frac{\partial^2}{\partial\theta\partial\phi} - \cos\phi\sin\phi\frac{\partial^2}{\partial\theta^2}\right)
\end{aligned} \tag{2.2.39}$$

となる。したがって，

$$[\,\ell_x, \ell_y\,] = -\frac{1}{\tan^2\theta}\frac{\partial}{\partial\phi} + \frac{1}{\tan^2\theta\cos^2\theta}\frac{\partial}{\partial\phi} = \frac{\partial}{\partial\phi} = i\ell_z \tag{2.2.40}$$

---

[23]微分演算子 (運動量演算子) によって並進演算子が表される (補足・計算例 19) ことに対応して，角運動量演算子によって**回転演算子**が表されます。なお，軌道角運動量演算子については第 5 章の §5.3.3 で定義と基本的性質について述べます。(2.2.34) の導出については補章 B.2 を参照してください。

[24]直交座標 (x, y, z) を用いて $\ell_x = -i(y\partial_z - z\partial_y)$，$\ell_y = -i(z\partial_x - x\partial_z)$，$\ell_z = -i(x\partial_y - y\partial_x)$ と定義するほうが (2.2.35) をより容易に導くことができますが，ここでは軌道角運動量演算子が球面上の関数 $f(\theta, \phi)$ に作用する演算子であるという点を強調するために球座標 (r, θ, ϕ) の天頂角 θ と方位角 ϕ による軌道角運動量の表式をその定義として採用することにします。

を得る。$[\ell_y, \ell_z] = i\ell_x$，$[\ell_z, \ell_x] = i\ell_y$ についても同様に示せる。 ■

例 9：**スピン角運動量演算子** $\boldsymbol{s} = s_x\,\boldsymbol{e}_x + s_y\,\boldsymbol{e}_y + s_z\,\boldsymbol{e}_z$ は

$$s_x = \frac{1}{2}\sigma_x \qquad s_y = \frac{1}{2}\sigma_y \qquad s_z = \frac{1}{2}\sigma_z \tag{2.2.41}$$

と表される[25]。ここで，$\boldsymbol{\sigma} = \sigma_x\,\boldsymbol{e}_x + \sigma_y\,\boldsymbol{e}_y + \sigma_z\,\boldsymbol{e}_z$ は

$$\sigma_x = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix} \qquad \sigma_y = \begin{bmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{bmatrix} \qquad \sigma_z = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix} \tag{2.2.42}$$

によって定義される**パウリ行列**である。パウリ行列について，

$$\sigma_x^2 = \sigma_y^2 = \sigma_z^2 = I \qquad \sigma_x\sigma_y = -\sigma_y\sigma_x = i\sigma_z \qquad \sigma_y\sigma_z = -\sigma_z\sigma_y = i\sigma_x \qquad \sigma_z\sigma_x = -\sigma_x\sigma_z = i\sigma_y \tag{2.2.43}$$

および

$$(\boldsymbol{a}\cdot\boldsymbol{\sigma})(\boldsymbol{b}\cdot\boldsymbol{\sigma}) = (\boldsymbol{a}\cdot\boldsymbol{b})I + i(\boldsymbol{a}\times\boldsymbol{b})\cdot\boldsymbol{\sigma} \tag{2.2.44}$$

が成り立つ。ここで，I は 2 次の単位行列であり，また，$\boldsymbol{a} = a_x\,\boldsymbol{e}_x + a_y\,\boldsymbol{e}_y + a_z\,\boldsymbol{e}_z$，$\boldsymbol{b} = b_x\,\boldsymbol{e}_x + b_y\,\boldsymbol{e}_y + b_z\,\boldsymbol{e}_z$ である。s_x，s_y，s_z は角運動量演算子の交換関係

$$[s_x, s_y] = is_z \qquad [s_y, s_z] = is_x \qquad [s_z, s_x] = is_y \tag{2.2.45}$$

を満たす。したがって，スピン角運動量演算子の 2 乗を

$$\boldsymbol{s}^2 = s_x^2 + s_y^2 + s_z^2 \tag{2.2.46}$$

とすると，(2.2.32) より，

$$[\boldsymbol{s}^2, s_x] = 0 \qquad [\boldsymbol{s}^2, s_y] = 0 \qquad [\boldsymbol{s}^2, s_z] = 0 \tag{2.2.47}$$

が成り立つ。
[(2.2.45) の証明] $[s_x, s_y] = is_z$ を示す。(2.2.43) を用いて左辺を計算すると，

$$[s_x, s_y] = \frac{1}{4}[\sigma_x, \sigma_y] = \frac{1}{4}(\sigma_x\sigma_y - \sigma_y\sigma_x) = \frac{1}{2}\sigma_x\sigma_y = \frac{1}{2}i\sigma_z = is_z \tag{2.2.48}$$

を得る。$[s_y, s_z] = is_x$，$[s_z, s_x] = is_y$ についても同様に示せる。 ■

==========

2.2.2 線形変換の指数関数

線形変換 $\hat{X}$ に対して，その指数関数を

$$e^{\hat{X}} = \hat{I} + \hat{X} + \frac{1}{2!}\hat{X}^2 + \cdots + \frac{1}{n!}\hat{X}^n + \cdots \tag{2.2.49}$$

[25] (2.2.41) のスピン角運動量演算子は電子などスピン 1/2 をもつ粒子の場合のものです。なお，スピン角運動量演算子についても第 5 章の §5.3.3 で定義と基本的性質について述べます。

によって定義する[26]。特に，$\hat{X}=\hat{0}$ のとき，

$$e^{\hat{0}}=\hat{I} \tag{2.2.50}$$

である。また，線形変換 $\hat{X}$ と $\hat{Y}$ が可換ならば，

$$e^{\hat{X}+\hat{Y}}=e^{\hat{X}}e^{\hat{Y}} \tag{2.2.51}$$

が成り立つ[27]。
[(2.2.51) の証明] 定義より

$$e^{\hat{X}+\hat{Y}}=\sum_{k=0}^{\infty}\frac{1}{k!}(\hat{X}+\hat{Y})^k \tag{2.2.52}$$

である。$\hat{X}$ と $\hat{Y}$ が可換ならば (2.2.52) の右辺の $(\hat{X}+\hat{Y})^k$ を通常の二項定理によって展開してよいから，

$$\begin{aligned}(2.2.52)\text{ の右辺}&=\sum_{k=0}^{\infty}\frac{1}{k!}\sum_{s=0}^{k}\frac{k!}{s!(k-s)!}\hat{X}^{k-s}\hat{Y}^s=\sum_{s=0}^{\infty}\sum_{k=s}^{\infty}\frac{1}{s!(k-s)!}\hat{X}^{k-s}\hat{Y}^s\\&=\sum_{s=0}^{\infty}\sum_{r=0}^{\infty}\frac{1}{s!r!}\hat{X}^r\hat{Y}^s=\left(\sum_{r=0}^{\infty}\frac{1}{r!}\hat{X}^r\right)\left(\sum_{s=0}^{\infty}\frac{1}{s!}\hat{Y}^s\right)=e^{\hat{X}}e^{\hat{Y}}\end{aligned} \tag{2.2.53}$$

を得る。よって，(2.2.51) が成り立つ。 ■

特に，(2.2.51) において $\hat{Y}=-\hat{X}$ とおくと，$e^{\hat{0}}=\hat{I}$ より，

$$\hat{I}=e^{\hat{X}}e^{-\hat{X}} \tag{2.2.54}$$

つまり，

$$(e^{\hat{X}})^{-1}=e^{-\hat{X}} \tag{2.2.55}$$

である。

パラメータ λ を導入して (2.2.49) の $\hat{X}$ を $\lambda\hat{X}$ で置き換えると，

$$e^{\lambda\hat{X}}=\hat{I}+\lambda\hat{X}+\frac{\lambda^2}{2!}\hat{X}^2+\cdots+\frac{\lambda^n}{n!}\hat{X}^n+\cdots \tag{2.2.56}$$

[26]線形変換の指数関数は非常によく使うので，この定義は是非記憶しておきましょう。

[27]$\hat{X}$ と $\hat{Y}$ が可換でない場合は (2.2.51) は成り立ちません。その場合は (2.2.51) を一般化した**ベイカー–キャンベル–ハウスドルフ公式** が成り立ちます。簡単な場合については補足・計算例 19 で述べますが，一般の場合を理解するにはかなり高度な数学を必要とします。興味のある方は参考文献 [17] の第 7 章の章末問題 [2](p.273) を参照してください。

であるから，

$$\frac{d}{d\lambda}e^{\lambda\hat{X}} = \hat{X} + \lambda\hat{X}^2 + \cdots + \frac{\lambda^{n-1}}{(n-1)!}\hat{X}^n + \cdots = \hat{X}e^{\lambda\hat{X}} \tag{2.2.57}$$

を得る。

線形変換 $\hat{X}$，$\hat{Y}$ に対して，

$$e^{\lambda\hat{X}}\hat{Y}e^{-\lambda\hat{X}} = \sum_{n=0}^{\infty}\frac{\lambda^n}{n!}[\,\hat{X},\cdots[\,\hat{X},\hat{Y}\,]\cdots] \tag{2.2.58}$$

が成り立つ。ここで，λ はパラメータである。(2.2.58) を**アダマールの補題**という[28]。

[(2.2.58) の証明] $\hat{Y}(\lambda)$ を

$$\hat{Y}(\lambda) = e^{\lambda\hat{X}}\hat{Y}e^{-\lambda\hat{X}} \tag{2.2.59}$$

とおいて λ で微分すると，

$$\frac{d}{d\lambda}\hat{Y}(\lambda) = \hat{X}\hat{Y}(\lambda) - \hat{Y}(\lambda)\hat{X} = [\,\hat{X},\hat{Y}(\lambda)\,] \tag{2.2.60}$$

である。これを λ で積分すると，

$$\hat{Y}(\lambda) = \hat{Y} + \int_0^{\lambda} d\lambda_1\,[\,\hat{X},\hat{Y}(\lambda_1)\,] \tag{2.2.61}$$

となる。したがって，逐次代入により，

$$\begin{aligned}
\hat{Y}(\lambda) &= \hat{Y} + \int_0^{\lambda} d\lambda_1\,[\,\hat{X},\hat{Y}\,] + \int_0^{\lambda} d\lambda_1 \int_0^{\lambda_1} d\lambda_2\,[\,\hat{X},[\,\hat{X},\hat{Y}(\lambda_2)\,]\,] \\
&\qquad\vdots \\
&= \hat{Y} + \sum_{n=1}^{\infty}\int_0^{\lambda} d\lambda_1\cdots\int_0^{\lambda_{n-1}} d\lambda_n\,\underbrace{[\,\hat{X},\cdots[\,\hat{X},}_{n\text{ 重}}\hat{Y}\,]\cdots] \\
&= \sum_{n=0}^{\infty}\frac{\lambda^n}{n!}[\,\hat{X},\cdots[\,\hat{X},\hat{Y}\,]\cdots]
\end{aligned} \tag{2.2.62}$$

を得る。 ■

==========

[28] アダマールの補題は $\mathrm{ad}_{\hat{X}}(\hat{Y}) = [\,\hat{X},\hat{Y}\,]$ とおいて $e^{\hat{X}}\hat{Y}e^{-\hat{X}} = e^{\mathrm{ad}_{\hat{X}}}(\hat{Y})$ と表されることもあります。$\mathrm{ad}_{\hat{X}}(\,\cdot\,)$ や $e^{\mathrm{ad}_{\hat{X}}}(\,\cdot\,)$ は $\hat{X}$，$\hat{Y}$ などの線形変換全体のなす線形空間の線形変換とみることができます。

補足・計算例 19.

微分演算子と並進演算子

任意の関数 $f(x)$ に対して，並進演算子 $\mathscr{T}_c$ を

$$\mathscr{T}_c : f(x) \mapsto f(x-c) \tag{2.2.63}$$

によって定義する[29]。$f(x-c)$ をテイラー展開すると，

$$\begin{aligned} f(x-c) &= f(x) - c\frac{d}{dx}f(x) + \frac{(-c)^2}{2!}\frac{d^2}{dx^2}f(x) + \cdots + \frac{(-c)^n}{n!}\frac{d^n}{dx^n}f(x) + \cdots \\ &= \left(1 - cD_x + \frac{(-c)^2}{2!}D_x^2 + \cdots + \frac{(-c)^n}{n!}D_x^n + \cdots\right)f(x) = e^{-cD_x}f(x) \end{aligned} \tag{2.2.64}$$

と書ける。したがって，並進演算子 $\mathscr{T}_c$ は微分演算子 D_x の指数関数として

$$\mathscr{T}_c = e^{-cD_x} \tag{2.2.65}$$

と表せる。あるいは，**波数演算子** $\mathscr{k}_x$ を $\mathscr{k}_x = -iD_x$ によって定義すると，

$$\mathscr{T}_c = e^{-ic\mathscr{k}_x} \tag{2.2.66}$$

と表せる。

例 1：高々 2 次の多項式 $a(x) = a_0 + a_1x + a_2x^2$ 全体のなす線形空間を V とする。$a(x)$ に対して D_x^n $(n > 2)$ は $D_x^n a(x) = 0$ と作用するから，

$$e^{-cD_x}a(x) = \left(1 - cD_x + \frac{(-c)^2}{2!}D_x^2\right)a(x) \tag{2.2.67}$$

と書ける。(2.2.67) において $a(x) = a_0 + a_1x + a_2x^2$ とすると，

$$\begin{aligned} e^{-cD_x}a(x) &= \left(1 - cD_x + \frac{(-c)^2}{2!}D_x^2\right)\left(a_0 + a_1x + a_2x^2\right) = a_0 + a_1x + a_2x^2 - c(a_1 + 2a_2x) + \frac{c^2}{2!}2a_2 \\ &= a_0 + a_1(x-c) + a_2(x-c)^2 = a(x-c) = \mathscr{T}_c a(x) \end{aligned} \tag{2.2.68}$$

を得る。つまり，$\mathscr{T}_c = e^{-cD_x}$ が成り立つ。

角運動量演算子と回転演算子[30]

球面上の任意の関数 $f(\theta, \phi)$ に対して，z 軸を回転軸として ψ だけ回転させる回転演算子 $\mathscr{R}_z(\psi)$ を

$$\mathscr{R}_z(\psi) : f(\theta, \phi) \mapsto f(\theta, \phi - \psi) \tag{2.2.69}$$

によって定義する[31]。$f(\theta, \phi - \psi)$ をテイラー展開すると，

$$\begin{aligned} f(\theta, \phi - \psi) &= f(\theta, \phi) - \psi\frac{\partial}{\partial\phi}f(\theta, \phi) + \frac{(-\psi)^2}{2!}\frac{\partial^2}{\partial\phi^2}f(\theta, \phi) + \cdots + \frac{(-\psi)^n}{n!}\frac{\partial^n}{\partial\phi^n}f(\theta, \phi) + \cdots \\ &= \left(1 - \psi\partial_\phi + \frac{(-\psi)^2}{2!}\partial_\phi^2 + \cdots + \frac{(-\psi)^n}{n!}\partial_\phi^n + \cdots\right)f(\theta, \phi) = e^{-\psi\partial_\phi}f(\theta, \phi) \end{aligned} \tag{2.2.70}$$

---

[29] $\mathscr{T}_c$ は $f(x)$ のグラフを x 軸の正の向きに c だけ平行移動する演算子です。並進演算子については第 5 章の §5.2.4 で詳しく述べます。

[30] 角運動量演算子と回転演算子の詳細については参考文献 [16] を参照してください。

[31] $\mathscr{R}_z(\psi)$ は $f(\theta, \phi)$ のグラフを z 軸を回転軸として反時計回りに ψ だけ回転する演算子です。回転演算子については第 5 章の §5.3.4 で述べます。

と書ける。したがって，回転演算子 $\mathscr{R}_z(\psi)$ は軌道角運動量演算子 $\ell_z = -i\partial_\phi$ の指数関数として

$$\mathscr{R}_z(\psi) = e^{-i\psi\ell_z} \tag{2.2.71}$$

と表される。より一般に，ある方向を向く単位ベクトル $\boldsymbol{n}$ を

$$\boldsymbol{n} = n_x\,\boldsymbol{e}_x + n_y\,\boldsymbol{e}_y + n_z\,\boldsymbol{e}_z \tag{2.2.72}$$

として，$\boldsymbol{n}$ で定まる回転軸のまわりに関数 $f(\theta,\phi)$ を ψ だけ回転する回転演算子は軌道角運動量演算子 $\boldsymbol{\ell} = \ell_x\,\boldsymbol{e}_x + \ell_y\,\boldsymbol{e}_y + \ell_z\,\boldsymbol{e}_z$ によって

$$\mathscr{R}_{\boldsymbol{n}}(\psi) = e^{-i\psi\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{\ell}} \tag{2.2.73}$$

と表される。また, スピン空間における回転演算子はスピン角運動量演算子 $\boldsymbol{\mathscr{s}} = \mathscr{s}_x\,\boldsymbol{e}_x + \mathscr{s}_y\,\boldsymbol{e}_y + \mathscr{s}_z\,\boldsymbol{e}_z$ によって

$$\mathscr{R}_{\boldsymbol{n}}(\psi) = e^{-i\psi\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{\mathscr{s}}} \tag{2.2.74}$$

と表される。スピン空間における回転演算子について,

$$e^{-i\psi\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{\mathscr{s}}} = \cos\frac{\psi}{2}\,I - 2i\sin\frac{\psi}{2}\,\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{\mathscr{s}} \tag{2.2.75}$$

が成り立つ。
[(2.2.75) の証明] (2.2.75) をパウリ行列 (2.2.42) で表した

$$e^{-i\frac{\psi}{2}\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{\sigma}} = \cos\frac{\psi}{2}\,I - i\sin\frac{\psi}{2}\,\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{\sigma} \tag{2.2.76}$$

が成り立つことを示せばよい。パウリ行列の性質 (2.2.44) において $\boldsymbol{a} = \boldsymbol{b} = \boldsymbol{n}$ とおくと,

$$(\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{\sigma})^2 = I \tag{2.2.77}$$

であるから,

$$(\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{\sigma})^k = \begin{cases} I & (k:\text{偶数}) \\ \boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{\sigma} & (k:\text{奇数}) \end{cases} \tag{2.2.78}$$

となる。したがって,

$$\begin{aligned} e^{-i\frac{\psi}{2}\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{\sigma}} &= \sum_{k=0}^{\infty}\frac{(-i\psi/2)^k}{k!}(\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{\sigma})^k \\ &= \left(1 - \frac{(\psi/2)^2}{2!} + \frac{(\psi/2)^4}{4!} - \cdots\right)I - i\left(\psi/2 - \frac{(\psi/2)^3}{3!} + \frac{(\psi/2)^5}{5!} - \cdots\right)\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{\sigma} \\ &= \cos\frac{\psi}{2}\,I - i\sin\frac{\psi}{2}\,\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{\sigma} \end{aligned} \tag{2.2.79}$$

を得る。 ■

ベイカー–キャンベル–ハウスドルフ公式
ここでは $[\,\hat{X},[\,\hat{X},\hat{Y}\,]\,] = \hat{0}$, $[\,\hat{Y},[\,\hat{X},\hat{Y}\,]\,] = \hat{0}$ の場合のみ扱う[32]。このとき,

$$e^{\lambda\hat{X}}e^{\lambda\hat{Y}} = e^{\lambda(\hat{X}+\hat{Y})+\frac{1}{2}\lambda^2[\,\hat{X},\hat{Y}\,]} \tag{2.2.80}$$

[32]一般の場合については参考文献 [17] の第 7 章の章末問題 [2](p.273) を参照してください。

が成り立つ。
[(2.2.80) の証明] $[\,\hat{X},[\,\hat{X},\hat{Y}\,]\,]=\hat{0}$ のとき，(2.2.58) は

$$\hat{Y}(\lambda)=\hat{Y}+\lambda[\,\hat{X},\hat{Y}\,] \tag{2.2.81}$$

と書ける。次に，

$$\hat{F}(\lambda)=e^{-\lambda(\hat{X}+\hat{Y})}e^{\lambda\hat{X}}e^{\lambda\hat{Y}} \tag{2.2.82}$$

とおくと，$[\,\hat{X},[\,\hat{X},\hat{Y}\,]\,]=[\,\hat{Y},[\,\hat{X},\hat{Y}\,]\,]=\hat{0}$ より $[\,\hat{F}(\lambda),[\,\hat{X},\hat{Y}\,]\,]=\hat{0}$ であるから，

$$\frac{d}{d\lambda}\hat{F}(\lambda)=e^{-\lambda(\hat{X}+\hat{Y})}[\,\hat{Y}(\lambda)-\hat{Y}\,]e^{\lambda\hat{X}}e^{\lambda\hat{Y}}=\lambda[\,\hat{X},\hat{Y}\,]\hat{F}(\lambda) \tag{2.2.83}$$

となる。初期条件 $\hat{F}(0)=\hat{I}$ の下で微分方程式 (2.2.83) を解くと，その解は

$$\hat{F}(\lambda)=e^{\frac{1}{2}\lambda^2[\,\hat{X},\hat{Y}\,]} \tag{2.2.84}$$

である。したがって，

$$e^{\lambda\hat{X}}e^{\lambda\hat{Y}}=e^{\lambda(\hat{X}+\hat{Y})+\frac{1}{2}\lambda^2[\,\hat{X},\hat{Y}\,]} \tag{2.2.85}$$

を得る。 ■

==========

2.2.3 射影・完全性関係・直和

任意のベクトル $|a\rangle$ に対して，線形変換 $|e_i\rangle\langle\varepsilon_i|$ を

$$(\,|e_i\rangle\langle\varepsilon_i|)\,|a\rangle=\,|e_i\rangle\,(\,\langle\varepsilon_i|a\rangle) \tag{2.2.86}$$

によって定義する[33]。$|e_i\rangle\langle\varepsilon_i|$ を $\mathrm{span}(\,|e_1\rangle\,,\overset{\text{no }|e_i\rangle}{\cdots\cdots},\,|e_n\rangle)$ に沿う e_i 軸への**射影**という[34]。$|a\rangle=a_1\,|e_1\rangle+\cdots+a_n\,|e_n\rangle$ とすると，$\langle\varepsilon_i|a\rangle=a_i$ であるから，

$$|e_i\rangle\langle\varepsilon_i|a\rangle=a_i\,|e_i\rangle \tag{2.2.87}$$

と書ける[35]。つまり，$|e_i\rangle\langle\varepsilon_i|$ は $|a\rangle$ を基底 e によって表したときに $a_i\,|e_i\rangle$ を取り出す線形変換である。射影の性質として，

$$(\,|e_i\rangle\langle\varepsilon_i|)^2=\,|e_i\rangle\langle\varepsilon_i| \qquad |e_i\rangle\langle\varepsilon_i|\cdot|e_j\rangle\langle\varepsilon_j|=\hat{0}\quad(i\neq j) \tag{2.2.88}$$

[33] (2.2.86) は (2.2.16) で定義したダイアドの特別な場合です。
[34] ここでの記述のように，厳密にはどの部分空間に沿う射影なのかを明示すべきですが，文脈から明らかな場合は省略することにします。
[35] スカラーはベクトルの後ろに書くのが自然なのですが，慣例にしたがってベクトルの前に書くことにします。

が基本的である。

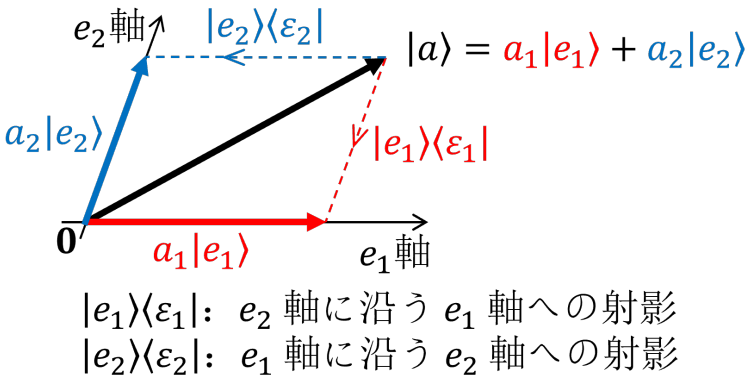


図 2.3: 射影

射影の組 $|e_1\rangle\langle\varepsilon_1|, \cdots, |e_n\rangle\langle\varepsilon_n|$ について，$|a\rangle = |e_1\rangle\langle\varepsilon_1|a\rangle + \cdots + |e_n\rangle\langle\varepsilon_n|a\rangle$，つまり，

$$\hat{I} = |e_1\rangle\langle\varepsilon_1| + \cdots + |e_n\rangle\langle\varepsilon_n| \tag{2.2.89}$$

が成り立つ。これを**完全性関係**という[36]。完全性関係は行列記法を用いて

$$\hat{I} = |\,e\,][\,\varepsilon\,| \tag{2.2.90}$$

と表せる。(2.2.90) を詳しく書けば，

$$\hat{I} = |\,e\,][\,\varepsilon\,| = [\,|e_1\rangle \cdots |e_n\rangle\,] \begin{bmatrix} \langle\varepsilon_1| \\ \vdots \\ \langle\varepsilon_n| \end{bmatrix} = |e_1\rangle\langle\varepsilon_1| + \cdots + |e_n\rangle\langle\varepsilon_n| \tag{2.2.91}$$

である。

$|e_1\rangle, \cdots, |e_n\rangle$ を r 組に分けて，それぞれの組が張る部分空間を $W_{(1)}, \cdots, W_{(r)}$ とするとき，$k = 1, \cdots, r$ について，

$$\hat{P}_{(k)} = \sum_{|e_i\rangle \in W_{(k)}} |e_i\rangle\langle\varepsilon_i| \tag{2.2.92}$$

[36]図 2.3 からもわかるように，完全性関係は「ベクトルをすべての軸に射影したものをすべて加えると元のベクトルに戻る」という幾何学的な意味をもちます。

を $W_{(1)}+\overset{\text{no } W_{(k)}}{\cdots\cdots}+W_{(r)}$ に沿う $W_{(k)}$ への射影という[37]。ここで, $W_{(1)}+\overset{\text{no } W_{(k)}}{\cdots\cdots}+W_{(r)}=\ker\hat{P}_{(k)}$ および $W_{(k)}=\operatorname{im}\hat{P}_{(k)}$ である。射影の性質として,

$$\hat{P}_{(k)}^2=\hat{P}_{(k)} \qquad \hat{P}_{(k)}\hat{P}_{(l)}=\hat{0} \quad (k\neq l) \tag{2.2.93}$$

が基本的である。(2.2.88) は (2.2.93) の特別な場合である。射影の組 $\hat{P}_{(1)},\cdots,\hat{P}_{(r)}$ を用いると，完全性関係は

$$\hat{I}=\hat{P}_{(1)}+\cdots+\hat{P}_{(r)} \tag{2.2.94}$$

と表される。このとき,

$$V=W_{(1)}\dot{+}\cdots\dot{+}W_{(r)} \tag{2.2.95}$$

と表し，V は $W_{(1)},\cdots,W_{(r)}$ の**直和**である，あるいは，V は $W_{(1)},\cdots,W_{(r)}$ によって**直和分解**されるという。V の任意のベクトル $|a\rangle$ は，$|a_{(k)}\rangle=\hat{P}_{(k)}|a\rangle\in W_{(k)}$ とおくと,

$$|a\rangle=|a_{(1)}\rangle+\cdots+|a_{(r)}\rangle \tag{2.2.96}$$

と一意的に表される。射影の性質 $\hat{P}_{(k)}\hat{P}_{(l)}=\hat{0}\ (k\neq l)$ より,

$$\hat{P}_{(k)}\left(\hat{P}_{(1)}+\overset{\text{no } \hat{P}_{(k)}}{\cdots\cdots}+\hat{P}_{(r)}\right)=\hat{0} \quad (k=1,\cdots,r) \tag{2.2.97}$$

が成り立つ。これは,

$$W_{(k)}\cap\left(W_{(1)}+\overset{\text{no } W_{(k)}}{\cdots\cdots}+W_{(r)}\right)=\{\mathbf{0}\} \quad (k=1,\cdots,r) \tag{2.2.98}$$

を意味する。(2.2.98) を**直和条件**という。$V=W_{(1)}+\cdots+W_{(r)}$ であるとき，直和条件 (2.2.98) は

$$\dim V=\dim W_{(1)}+\cdots+\dim W_{(r)} \tag{2.2.99}$$

と同値である[38]。

==========

補足・計算例 20.

[37]一般に $\hat{P}^2=\hat{P}$ を満たす線形変換 $\hat{P}$ を射影といいます。

[38]部分空間と直和に関連する基本的性質については参考文献 [3] の第 4 章 §4 と参考文献 [8] の第 2 章 §2.2 を参照してください。

射影・完全性関係・直和
例 1：高々 2 次の多項式 $a(x) = a_0 + a_1 x + a_2 x^2$ 全体のなす線形空間を V とする。V の基底を $e = \{1, x, x^2\}$，e の双対基底を $\varepsilon = \{\varepsilon_0(\,\cdot\,), \varepsilon_1(\,\cdot\,), \varepsilon_2(\,\cdot\,)\}$ とすると，$\varepsilon_0(a(x)) = a_0$，$\varepsilon_1(a(x)) = a_1$，$\varepsilon_2(a(x)) = a_2$ であるから，

$$1 \cdot \varepsilon_0(a(x)) = a_0 \qquad x \cdot \varepsilon_1(a(x)) = a_1 x \qquad x^2 \cdot \varepsilon_2(a(x)) = a_2 x^2 \tag{2.2.100}$$

である。つまり，$1 \cdot \varepsilon_0(\,\cdot\,)$，$x \cdot \varepsilon_1(\,\cdot\,)$，$x^2 \cdot \varepsilon_2(\,\cdot\,)$ は部分空間 $\mathrm{span}(1)$，$\mathrm{span}(x)$，$\mathrm{span}(x^2)$ への射影である。これらについて射影の基本的性質である (2.2.88) が成り立つことも容易にわかる。射影をすべて加えると，

$$(1 \cdot \varepsilon_0 + x \cdot \varepsilon_1 + x^2 \cdot \varepsilon_2)(a(x)) = a_0 + a_1 x + a_2 x^2 \tag{2.2.101}$$

を得る。つまり，V の恒等変換を $\mathrm{id}(\,\cdot\,)$ とすると，完全性関係

$$1 \cdot \varepsilon_0(\,\cdot\,) + x \cdot \varepsilon_1(\,\cdot\,) + x^2 \cdot \varepsilon_2(\,\cdot\,) = \mathrm{id}(\,\cdot\,) \tag{2.2.102}$$

が成り立つ。

例 2：$P_{(1)}(\,\cdot\,) = 1 \cdot \varepsilon_0(\,\cdot\,) + x \cdot \varepsilon_1(\,\cdot\,)$，$P_{(2)}(\,\cdot\,) = x^2 \cdot \varepsilon_2(\,\cdot\,)$ とおくと，$P_{(1)}(\,\cdot\,)$，$P_{(2)}(\,\cdot\,)$ は部分空間 $W_{(1)} = \mathrm{span}(1, x)$，$W_{(2)} = \mathrm{span}(x^2)$ への射影となる。つまり，

$$P_{(1)}(a(x)) = a_0 + a_1 x \qquad P_{(2)}(a(x)) = a_2 x^2 \tag{2.2.103}$$

である。これらについて射影の基本的性質である (2.2.93) が成り立つことも容易にわかる。したがって，直和条件

$$W_{(1)} \cap W_{(2)} = 0 \tag{2.2.104}$$

が成り立ち，V は $W_{(1)}$ と $W_{(2)}$ の直和となる。つまり，

$$V = W_{(1)} \dot{+} W_{(2)} \tag{2.2.105}$$

である。

==========

2.3 表現

2.3.1 列ベクトル表現と行ベクトル表現

n 次元列ベクトル

$$\boldsymbol{a} = \begin{bmatrix} a_1 \\ \vdots \\ a_n \end{bmatrix} \tag{2.3.1}$$

を用いてベクトル $|a\rangle = a_1 |e_1\rangle + \cdots + a_n |e_n\rangle$ を

$$|a\rangle = [\ |e_1\rangle \ \cdots \ |e_n\rangle\ ]\boldsymbol{a} \tag{2.3.2}$$

あるいは略記して

$$|a\rangle = |\, e\,]\boldsymbol{a} \tag{2.3.3}$$

と表すとき，列ベクトル $\boldsymbol{a}$ を基底 e によるベクトル $|a\rangle$ の**列ベクトル表現**という。$I = [\,\varepsilon\,|\,e\,]$ より，

$$\boldsymbol{a} = [\,\varepsilon\,|a\rangle \tag{2.3.4}$$

と書ける。特に，基底 e による $|e_i\rangle$ の列ベクトル表現は

$$\boldsymbol{e}_i = [\,\varepsilon\,|e_i\rangle = \begin{bmatrix} 0 \\ \vdots \\ 0 \\ 1 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{bmatrix} \leftarrow \text{第 } i \text{ 成分} \tag{2.3.5}$$

である[39]。同様に，n 次元行ベクトル

$$\boldsymbol{\alpha} = [\ \ \alpha_1 \ \ \cdots \ \ \alpha_n\ \ ] \tag{2.3.6}$$

を用いて線形形式 $\langle\alpha| = \alpha_1 \langle\varepsilon_1| + \cdots + \alpha_n \langle\varepsilon_n|$ を

$$\langle\alpha| = \boldsymbol{\alpha}\begin{bmatrix} \langle\varepsilon_1| \\ \vdots \\ \langle\varepsilon_n| \end{bmatrix} \tag{2.3.7}$$

あるいは略記して

$$\langle\alpha| = \boldsymbol{\alpha}[\,\varepsilon\,| \tag{2.3.8}$$

と表すとき，行ベクトル $\boldsymbol{\alpha}$ を双対基底 ε による線形形式 $\langle\alpha|$ の**行ベクトル表現**という。$I = [\,\varepsilon\,|\,e\,]$ より，

$$\boldsymbol{\alpha} = \langle\alpha|\, e\,] \tag{2.3.9}$$

[39]基底 e による基底 e 自身の列ベクトル表現が §1.3.1 で扱った標準基底です。

と書ける。特に，双対基底 ε による $\langle\varepsilon_i|$ の行ベクトル表現は

$$\boldsymbol{\varepsilon}_i = \langle\varepsilon_i|\, e\,] = [\,0\ \cdots\ 0\ 1\ 0\ \cdots\ 0\,] \qquad \uparrow \text{第 } i \text{ 成分} \tag{2.3.10}$$

である[40]。列ベクトル表現と行ベクトル表現を**数ベクトル表現**という。(2.3.3) と (2.3.8)，あるいは，(2.3.4) と (2.3.9) より，$\langle\alpha|$ と $|a\rangle$ のペアリングは

$$\langle\alpha|a\rangle = \boldsymbol{\alpha}\boldsymbol{a} \tag{2.3.11}$$

と書ける。

==========

補足・計算例 21.

数ベクトル表現

高々 2 次の多項式 $a(x) = a_0 + a_1x + a_2x^2$ 全体のなす線形空間を V とする。V の基底を $e = \{1, x, x^2\}$，e の双対基底を $\varepsilon = \{\varepsilon_0(\,\cdot\,), \varepsilon_1(\,\cdot\,), \varepsilon_2(\,\cdot\,)\}$ とする。

・基底 e による $a(x) = a_0 + a_1x + a_2x^2$ の列ベクトル表現 $\boldsymbol{a}$

$$a_0 + a_1x + a_2x^2 = [\ 1\ \ x\ \ x^2\ ]\begin{bmatrix} a_0 \\ a_1 \\ a_2 \end{bmatrix} \qquad \therefore \boldsymbol{a} = \begin{bmatrix} a_0 \\ a_1 \\ a_2 \end{bmatrix} \tag{2.3.12}$$

・双対基底 ε による $\alpha(\,\cdot\,) = \alpha_0\varepsilon_0(\,\cdot\,) + \alpha_1\varepsilon_1(\,\cdot\,) + \alpha_2\varepsilon_2(\,\cdot\,)$ の行ベクトル表現 $\boldsymbol{\alpha}$

$$\alpha(\,\cdot\,) = \alpha_0\varepsilon_0(\,\cdot\,) + \alpha_1\varepsilon_1(\,\cdot\,) + \alpha_2\varepsilon_2(\,\cdot\,) = [\ \alpha_0\ \ \alpha_1\ \ \alpha_2\ ]\begin{bmatrix} \varepsilon_0(\,\cdot\,) \\ \varepsilon_1(\,\cdot\,) \\ \varepsilon_2(\,\cdot\,) \end{bmatrix} \qquad \therefore \boldsymbol{\alpha} = [\ \alpha_0\ \ \alpha_1\ \ \alpha_2\ ] \tag{2.3.13}$$

・$\alpha(\,\cdot\,)$ と $a(x)$ のペアリング $\alpha(a(x))$

$$\alpha(a(x)) = \boldsymbol{\alpha}\boldsymbol{a} = [\ \alpha_0\ \ \alpha_1\ \ \alpha_2\ ]\begin{bmatrix} a_0 \\ a_1 \\ a_2 \end{bmatrix} = \alpha_0a_0 + \alpha_1a_1 + \alpha_2a_2 \tag{2.3.14}$$

==========

2.3.2 行列表現

n 次正方行列

$$X = \begin{bmatrix} X_{11} & \cdots & X_{1n} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ X_{n1} & \cdots & X_{nn} \end{bmatrix} \tag{2.3.15}$$

[40] 双対基底 ε による双対基底 ε 自身の行ベクトル表現が §1.3.1 で扱った標準双対基底です。

を用いて

$$\hat{X}[\,|e_1\rangle\,\cdots\,|e_n\rangle\,] = [\,|e_1\rangle\,\cdots\,|e_n\rangle\,]X \tag{2.3.16}$$

あるいは略記して

$$\hat{X}|\,e\,] = |\,e\,]X \tag{2.3.17}$$

と表すとき，行列 X を基底 e による線形変換 $\hat{X}$ の**行列表現**という。混乱の生じない限り，(2.3.17) は

$$\hat{X} \overset{e}{\mapsto} X \tag{2.3.18}$$

と表してもよい。$I = [\,\varepsilon\,|\,e\,]$ より，

$$X = [\,\varepsilon\,|\hat{X}|\,e\,] \tag{2.3.19}$$

と書ける。つまり，

$$X_{ij} = \langle\varepsilon_i|\hat{X}|e_j\rangle \tag{2.3.20}$$

である。また，$\hat{I} = |\,e\,][\,\varepsilon\,|$ より，

$$\hat{X} = |\,e\,]X[\,\varepsilon\,| \tag{2.3.21}$$

と書ける[41]。(2.3.21) の両辺に左から $[\,\varepsilon\,|$ を掛けると，$I = [\,\varepsilon\,|\,e\,]$ より，

$$[\,\varepsilon\,|\hat{X} = X[\,\varepsilon\,| \tag{2.3.22}$$

を得る[42]。

V が部分空間 W と W' の直和として $V = W \dot{+} W'$ と表されるとし，W, W' への射影を $\hat{P}$, $\hat{Q}(= \hat{I} - \hat{P})$ とする。W が $\hat{X}$ に関する不変部分空間であるとき[43]，つまり，$\hat{X}(W) \subseteq W$ のとき，W の基底 $\{\,|e_1\rangle\,,\cdots,\,|e_s\rangle\}$ と W' の基底 $\{\,|e_{s+1}\rangle\,,\cdots,\,|e_n\rangle\}$ を合わせて V の基底 $e = \{\,|e_1\rangle\,,\cdots,\,|e_s\rangle\,,\,|e_{s+1}\rangle\,,\cdots,\,|e_n\rangle\}$ とすると，基底 e による $\hat{X}$ の行列表現 X は

$$X = \begin{bmatrix} X_W & * \\ O & X_{W'} \end{bmatrix} \tag{2.3.23}$$

[41] (2.3.21) の形に表せるという意味で，線形変換はダイアドの線形結合であるダイアディックと本質的に同じです。

[42] (2.3.19) の両辺に右から $[\,\varepsilon\,|$ を掛けても同じ結果が得られます。

[43] 不変部分空間については §2.2.1 を参照してください。

となる。ここで，X_W は s 次正方行列，$X_{W'}$ は $n-s$ 次正方行列であり，$*$ は適当な数を成分とする $(s, n-s)$ 行列を表す。このとき，$\hat{X}$ は $\hat{P}$，$\hat{Q}$ によって

$$\hat{X} = \hat{P}\hat{X}\hat{P} + \hat{P}\hat{X}\hat{Q} + \hat{Q}\hat{X}\hat{Q} \tag{2.3.24}$$

と表せる。さらに, W' も $\hat{X}$ に関する不変部分空間であるとき, つまり, $\hat{X}(W') \subseteq W'$ のとき，X は

$$X = \begin{bmatrix} X_W & O \\ O & X_{W'} \end{bmatrix} \tag{2.3.25}$$

の形に表される。このとき，$\hat{X}$ は $\hat{P}$，$\hat{Q}$ によって

$$\hat{X} = \hat{P}\hat{X}\hat{P} + \hat{Q}\hat{X}\hat{Q} \tag{2.3.26}$$

と表せる。(2.3.26) から明らかなように，$\hat{X}$ は $\hat{P}$，$\hat{Q}$ と可換である。逆に，$\hat{X}$ が $\hat{P}$，$\hat{Q}$ と可換であれば，$\hat{P}\hat{X}\hat{Q} = \hat{Q}\hat{X}\hat{P} = \hat{X}\hat{P}\hat{Q} = \hat{0}$ より (2.3.26) が成り立つ。そこで，$\hat{P}\hat{X}\hat{P} = \hat{P}\hat{X}$，$\hat{Q}\hat{X}\hat{Q} = \hat{Q}\hat{X}$ より $\hat{X}_W = \hat{P}\hat{X}$，$\hat{X}_{W'} = \hat{Q}\hat{X}$ とおくと，

$$\hat{X} = \hat{X}_W + \hat{X}_{W'} \tag{2.3.27}$$

と表される。一般に，$V = W_{(1)} \dot{+} \cdots \dot{+} W_{(r)}$，$\hat{X}(W_{(k)}) \subseteq W_{(k)}$ $(k = 1, \cdots, r)$ のとき，$W_{(k)}$ の基底を合わせて V の基底 e とすると，基底 e による $\hat{X}$ の行列表現は

$$X = \begin{bmatrix} X_{(1)} & & O \\ & \ddots & \\ O & & X_{(r)} \end{bmatrix} \tag{2.3.28}$$

となる。このとき，$W_{(1)}, \cdots, W_{(r)}$ に対応する射影の組を $\hat{P}_{(1)}, \cdots, \hat{P}_{(r)}$ とすると，

$$\hat{X} = \hat{P}_{(1)}\hat{X}\hat{P}_{(1)} + \cdots + \hat{P}_{(r)}\hat{X}\hat{P}_{(r)} \tag{2.3.29}$$

と表せる。(2.3.29) から明らかなように, $\hat{X}$ はすべての $\hat{P}_{(k)}$ と可換である。逆に, $\hat{X}$ がすべての $\hat{P}_{(k)}$ と可換であれば, $k \neq l$ のとき $\hat{P}_{(k)}\hat{X}\hat{P}_{(l)} = \hat{P}_{(l)}\hat{X}\hat{P}_{(k)} = \hat{X}\hat{P}_{(k)}\hat{P}_{(l)} = \hat{0}$ より (2.3.29) が成り立つ。つまり，

$$\hat{X} = \hat{P}_{(1)}\hat{X}\hat{P}_{(1)} + \cdots + \hat{P}_{(r)}\hat{X}\hat{P}_{(r)} \quad \Leftrightarrow \quad \hat{X}\hat{P}_{(k)} = \hat{P}_{(k)}\hat{X} \ (k = 1, \cdots, r) \tag{2.3.30}$$

が成り立つ。そこで，$\hat{P}_{(k)}\hat{X}\hat{P}_{(k)} = \hat{P}_{(k)}\hat{X}$ より $\hat{X}_{(k)} = \hat{P}_{(k)}\hat{X}$ とおくと，

$$\hat{X} = \hat{X}_{(1)} + \cdots + \hat{X}_{(r)} \tag{2.3.31}$$

と表される。(2.3.28) の $X_{(k)}$ を**次数** $\dim W_{(k)}$ の**ブロック**といい，(2.3.28) の形の行列を**ブロック対角行列**という。また，行列表現をブロック対角行列にすることを**ブロック対角化**するという[44]。それぞれの $W_{(k)}$ の次元をできる限り小さくとって，ブロック $X_{(k)}$ の次数をこれ以上小さくできない場合，$W_{(k)}$ は $\hat{X}$ に関する**既約**な不変部分空間あるいは**既約不変部分空間**であるといい，$X_{(k)}$ を $W_{(k)}$ における $\hat{X}$ の既約な行列表現という[45]。言い換えると，

$$\begin{array}{l}\hat{X}\text{ に関する不変部分空間 }W_{(k)}\text{に含まれる}\hat{X}\text{ に関する不変部分空間が}\\ \{\mathbf{0}\}\text{ と }W_{(k)}\text{自身に限るとき }W_{(k)}\text{は}\hat{X}\text{ に関する既約不変部分空間である}\end{array} \tag{2.3.32}$$

という[46]。$\hat{X}$ に関する不変部分空間 $W_{(k)}$ が既約でないとき，$W_{(k)}$ は**可約**であるという。特に，$r = n$ とすることが可能なとき，つまり，V を $\hat{X}$ に関する 1 次元の既約不変部分空間による直和として表すことができるとき，X は

$$X = \begin{bmatrix} \xi_1 & & O \\ & \ddots & \\ O & & \xi_n \end{bmatrix} \tag{2.3.33}$$

となる。このとき，$\hat{X}$ は

$$\hat{X} = \xi_1 \left|e_1\right\rangle\!\left\langle\varepsilon_1\right| + \cdots + \xi_n \left|e_n\right\rangle\!\left\langle\varepsilon_n\right| \tag{2.3.34}$$

と表せる[47]。(2.3.33) の形の行列を**対角行列**という。また，行列表現を対角行列にすることを**対角化**するという。行列表現の対角化については §2.4 の固有値問題のところで詳しく述べる。

==========

補足・計算例 22.

行列表現

高々 2 次の多項式 $a(x) = a_0 + a_1 x + a_2 x^2$ 全体のなす線形空間を V とする。V の基底を $e = \{1, x, x^2\}$ とすると，基底 e による微分演算子，並進演算子，反転演算子の行列表現は以下のように与えられる。

---

[44]第 6 章で述べる群の表現を理解するためには，不変部分空間とブロック対角化についてしっかり理解しておく必要があります。

[45]第 6 章で述べる群の表現を理解するためには，既約不変部分空間と既約な行列表現についてしっかり理解しておく必要があります。

[46]$W_{(k)}$ が $\hat{X}$ に関する既約不変部分空間であるとは，$\{\mathbf{0}\} \subsetneq \mathscr{W} \subsetneq W_{(k)}$ であるような $\hat{X}$ に関する不変部分空間 $\mathscr{W}$ がないということです。

[47]一貫性を重視するならば $\hat{X} = \left|e_1\right\rangle \xi_1 \left\langle\varepsilon_1\right| + \cdots + \left|e_n\right\rangle \xi_n \left\langle\varepsilon_n\right|$ と書くべきですが，慣習にしたがってスカラー ξ_i は各項の先頭に置くようにします。

例 1：微分演算子

$$D_x[\ 1\ \ x\ \ x^2\ ] = [\ 0\ \ 1\ \ 2x\ ] = [\ 1\ \ x\ \ x^2\ ]\begin{bmatrix}0 & 1 & 0\\ 0 & 0 & 2\\ 0 & 0 & 0\end{bmatrix} \qquad \therefore D_x \overset{e}{\mapsto} \begin{bmatrix}0 & 1 & 0\\ 0 & 0 & 2\\ 0 & 0 & 0\end{bmatrix} \tag{2.3.35}$$

例 2：並進演算子

$$\begin{aligned}\mathscr{T}_c[\ 1\ \ x\ \ x^2\ ] &= [\ 1\ \ x-c\ \ (x-c)^2\ ] = [\ 1\ \ -c+x\ \ c^2-2cx+x^2\ ]\\ &= [\ 1\ \ x\ \ x^2\ ]\begin{bmatrix}1 & -c & c^2\\ 0 & 1 & -2c\\ 0 & 0 & 1\end{bmatrix} \qquad \therefore \mathscr{T}_c \overset{e}{\mapsto} \begin{bmatrix}1 & -c & c^2\\ 0 & 1 & -2c\\ 0 & 0 & 1\end{bmatrix}\end{aligned} \tag{2.3.36}$$

例 3：反転演算子

$$\begin{aligned}\mathscr{P}[\ 1\ \ x\ \ x^2\ ] &= [\ 1\ \ -x\ \ (-x)^2\ ] = [\ 1\ \ -x\ \ x^2\ ]\\ &= [\ 1\ \ x\ \ x^2\ ]\begin{bmatrix}1 & 0 & 0\\ 0 & -1 & 0\\ 0 & 0 & 1\end{bmatrix} \qquad \therefore \mathscr{P} \overset{e}{\mapsto} \begin{bmatrix}1 & 0 & 0\\ 0 & -1 & 0\\ 0 & 0 & 1\end{bmatrix}\end{aligned} \tag{2.3.37}$$

数ベクトル表現・行列表現についての補足
ベクトル，線形形式，線形変換をそれらの表現によって表すことにより，扱うべき数式の計算を数ベクトルと行列の演算に置き換えて実行することができる。特に，コンピュータによって効率よく計算を行えるという点は重要である。例えば，$\hat{X}\,|a\rangle = |b\rangle$ という数式を扱う際に，これを数ベクトルと行列の式 $[\,\varepsilon\,|\,\hat{X}\,|\,e\,][\,\varepsilon\,|a\rangle = [\,\varepsilon\,|b\rangle$，つまり，$X\boldsymbol{a} = \boldsymbol{b}$ に置き換えて計算を行うといったように使われる。

ブロック対角行列についての補足
線形空間 V が V の線形変換 $\hat{X}$ の不変部分空間 $W_{(1)}, \cdots, W_{(r)}$ の直和として $V = W_{(1)} \dot{+} \cdots \dot{+} W_{(r)}$ と表されるとき，$d_k = \dim W_{(k)}$ として，$W_{(k)}$ の基底を $e_{(k)} = \{\,|e_{1(k)}\rangle\,, \cdots,\, |e_{d_k(k)}\rangle\}$，双対基底を $\varepsilon_{(k)} = \{\,\langle\varepsilon_{1(k)}|\,, \cdots,\, \langle\varepsilon_{d_k(k)}|\}$ とすると，

$$\hat{X} = |\,e_{(1)}\,]X_{(1)}[\,\varepsilon_{(1)}\,| + \cdots + |\,e_{(r)}\,]X_{(r)}[\,\varepsilon_{(r)}\,| \tag{2.3.38}$$

と表せる。ここで，$X_{(k)} = [\,\varepsilon_{(k)}\,|\hat{X}|\,e_{(k)}\,]$ は $W_{(k)}$ における基底 $e_{(k)}$ による $\hat{X}$ の行列表現，つまり，ブロック対角行列の第 k ブロックである。$W_{(1)}, \cdots, W_{(r)}$ に対応する射影の組を $\hat{P}_{(1)} \cdots, \hat{P}_{(r)}$ とすると，$\hat{P}_{(k)} = |\,e_{(k)}][\,\varepsilon_{(k)}|$ であるから，(2.3.38) は (2.3.29) と同じである。

==========

2.3.3 基底変換

正則な n 次正方行列

$$P = \begin{bmatrix}P_{11} & \cdots & P_{1n}\\ \vdots & \ddots & \vdots\\ P_{n1} & \cdots & P_{nn}\end{bmatrix} \tag{2.3.39}$$

により，2 組の基底 $e = \{\,|e_1\rangle\,, \cdots\,, |e_n\rangle\}$ と $e' = \{\,|e'_1\rangle\,, \cdots\,, |e'_n\rangle\}$ が

$$[\,|e'_1\rangle\ \cdots\ |e'_n\rangle\,] = [\,|e_1\rangle\ \cdots\ |e_n\rangle\,]P \tag{2.3.40}$$

あるいは略記して

$$|\,e'\,] = |\,e\,]P \tag{2.3.41}$$

の関係にあるとき，これを基底 e から基底 e' への**基底変換**という。また，正則行列 P を**基底変換の行列**という。このとき，基底 e' から基底 e への基底変換は

$$|\,e\,] = |\,e'\,]P^{-1} \tag{2.3.42}$$

である。$I = [\,\varepsilon\,|\,e\,]$ より，

$$P = [\,\varepsilon\,|\,e'\,] \tag{2.3.43}$$

である。一方，$I = [\,\varepsilon'\,|\,e'\,]$ より，

$$P^{-1} = [\,\varepsilon'\,|\,e\,] \tag{2.3.44}$$

である。(2.3.44) の両辺に右から $[\,\varepsilon\,|$ を掛けると，$\hat{I} = |\,e\,][\,\varepsilon\,|$ より，

$$[\,\varepsilon'\,| = P^{-1}[\,\varepsilon\,| \tag{2.3.45}$$

を得る。(2.3.45) が (2.3.41) に対応する双対基底の基底変換を与える。(2.3.43) は

$$P = \Big[\,[\,\varepsilon\,|e'_1\rangle\ \cdots\ [\,\varepsilon\,|e'_n\rangle\,\Big] = [\,\boldsymbol{e}'_1\ \cdots\ \boldsymbol{e}'_n\,] \tag{2.3.46}$$

と書ける。つまり，P の第 i 列は基底 e による $|e'_i\rangle$ の列ベクトル表現 $\boldsymbol{e}'_i$ である。一方，(2.3.44) は

$$P^{-1} = \begin{bmatrix} \langle\varepsilon'_1|\,e\,] \\ \vdots \\ \langle\varepsilon'_n|\,e\,] \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \boldsymbol{\varepsilon}'_1 \\ \vdots \\ \boldsymbol{\varepsilon}'_n \end{bmatrix} \tag{2.3.47}$$

と書ける。つまり，P^{-1} の第 i 行は双対基底 ε による $\langle\varepsilon'_i|$ の行ベクトル表現 $\boldsymbol{\varepsilon}'_i$ である。$\boldsymbol{e}'_i$ と $\boldsymbol{\varepsilon}'_i$ を用いると，基底 e による射影 $|e'_i\rangle\langle\varepsilon'_i|$ の行列表現は

$$[\,\varepsilon\,|e'_i\rangle\langle\varepsilon'_i|\,e\,] = \boldsymbol{e}'_i\boldsymbol{\varepsilon}'_i \tag{2.3.48}$$

で与えられる。また，完全性関係は

$$I = \boldsymbol{e}'_1\boldsymbol{\varepsilon}'_1 + \cdots + \boldsymbol{e}'_n\boldsymbol{\varepsilon}'_n \tag{2.3.49}$$

と書ける[48]。

==========

補足・計算例 23.

基底変換

高々 2 次の多項式 $a(x) = a_0 + a_1x + a_2x^2$ 全体のなす線形空間を V とする。V の 2 組の基底 $e = \{1, x, x^2\}$ と $e' = \{1, 2x, -2+4x^2\}$ は

$$\begin{bmatrix} 1 & 2x & -2+4x^2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & x & x^2 \end{bmatrix} P \qquad \text{ここで，} P = \begin{bmatrix} 1 & 0 & -2 \\ 0 & 2 & 0 \\ 0 & 0 & 4 \end{bmatrix} \tag{2.3.50}$$

の関係にある。補足・計算例 13 の例 2 で計算した (1.4.17) の逆行列を参照すると，

$$\begin{bmatrix} 1 & x & x^2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 2x & -2+4x^2 \end{bmatrix} P^{-1} \qquad \text{ここで，} P^{-1} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 1/2 \\ 0 & 1/2 & 0 \\ 0 & 0 & 1/4 \end{bmatrix} \tag{2.3.51}$$

である。基底 e の双対基底 $\varepsilon = \{\varepsilon_0(\,\cdot\,), \varepsilon_1(\,\cdot\,), \varepsilon_2(\,\cdot\,)\}$ と基底 e' の双対基底 $\varepsilon' = \{\varepsilon'_0(\,\cdot\,), \varepsilon'_1(\,\cdot\,), \varepsilon'_2(\,\cdot\,)\}$ の間には

$$\begin{bmatrix} \varepsilon'_0(\,\cdot\,) \\ \varepsilon'_1(\,\cdot\,) \\ \varepsilon'_2(\,\cdot\,) \end{bmatrix} = P^{-1} \begin{bmatrix} \varepsilon_0(\,\cdot\,) \\ \varepsilon_1(\,\cdot\,) \\ \varepsilon_2(\,\cdot\,) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \varepsilon_0(\,\cdot\,) + (1/2)\varepsilon_2(\,\cdot\,) \\ (1/2)\varepsilon_1(\,\cdot\,) \\ (1/4)\varepsilon_2(\,\cdot\,) \end{bmatrix} \tag{2.3.52}$$

の関係がある。

射影と完全性関係

基底 e' に関する射影と完全性関係を基底 e によって行列として表現することを考える。基底 e' の基底 e による列ベクトル表現は P の列ベクトルとして与えられるから，

$$1 \overset{e}{\mapsto} \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} \qquad 2x \overset{e}{\mapsto} \begin{bmatrix} 0 \\ 2 \\ 0 \end{bmatrix} \qquad -2+4x^2 \overset{e}{\mapsto} \begin{bmatrix} -2 \\ 0 \\ 4 \end{bmatrix} \tag{2.3.53}$$

である。双対基底 ε' の双対基底 ε による行ベクトル表現は P^{-1} の行ベクトルとして与えられるから，

$$\varepsilon'_0(\,\cdot\,) \overset{\varepsilon}{\mapsto} \begin{bmatrix} 1 & 0 & 1/2 \end{bmatrix} \qquad \varepsilon'_1(\,\cdot\,) \overset{\varepsilon}{\mapsto} \begin{bmatrix} 0 & 1/2 & 0 \end{bmatrix} \qquad \varepsilon'_2(\,\cdot\,) \overset{\varepsilon}{\mapsto} \begin{bmatrix} 0 & 0 & 1/4 \end{bmatrix} \tag{2.3.54}$$

[48] (2.3.46)-(2.3.49) での $\boldsymbol{e}'_1, \cdots, \boldsymbol{e}'_n$ と $\boldsymbol{\varepsilon}'_1, \cdots, \boldsymbol{\varepsilon}'_n$ は，§1.3.4, §1.3.5 での $\boldsymbol{p}_1, \cdots, \boldsymbol{p}_n$ と $\boldsymbol{\pi}_1, \cdots, \boldsymbol{\pi}_n$ に対応しています。

である。したがって，基底 e' に関する射影を基底 e によって行列として表現すると，

$$
\begin{aligned}
1\cdot\varepsilon'_0(\,\cdot\,) &\overset{e}{\mapsto} \begin{bmatrix}1\\0\\0\end{bmatrix}\begin{bmatrix}\ 1 & 0 & 1/2\ \end{bmatrix} = \begin{bmatrix}1 & 0 & 1/2\\0 & 0 & 0\\0 & 0 & 0\end{bmatrix}\\
2x\cdot\varepsilon'_1(\,\cdot\,) &\overset{e}{\mapsto} \begin{bmatrix}0\\2\\0\end{bmatrix}\begin{bmatrix}\ 0 & 1/2 & 0\ \end{bmatrix} = \begin{bmatrix}0 & 0 & 0\\0 & 1 & 0\\0 & 0 & 0\end{bmatrix}\\
(-2+4x^2)\cdot\varepsilon'_2(\,\cdot\,) &\overset{e}{\mapsto} \begin{bmatrix}-2\\0\\4\end{bmatrix}\begin{bmatrix}\ 0 & 0 & 1/4\ \end{bmatrix} = \begin{bmatrix}0 & 0 & -1/2\\0 & 0 & 0\\0 & 0 & 1\end{bmatrix}
\end{aligned}
\tag{2.3.55}
$$

となる。これら射影の行列表現をすべて加えると，

$$
\begin{bmatrix}1 & 0 & 1/2\\0 & 0 & 0\\0 & 0 & 0\end{bmatrix} + \begin{bmatrix}0 & 0 & 0\\0 & 1 & 0\\0 & 0 & 0\end{bmatrix} + \begin{bmatrix}0 & 0 & -1/2\\0 & 0 & 0\\0 & 0 & 1\end{bmatrix} = \begin{bmatrix}1 & 0 & 0\\0 & 1 & 0\\0 & 0 & 1\end{bmatrix}
\tag{2.3.56}
$$

を得る。(2.3.56) が基底 e' に関する完全性関係を基底 e によって行列として表現したものである。

==========

2.3.4 表現の変換則

基底 $e = \{\,|e_1\rangle\,,\cdots,\,|e_n\rangle\}$ から基底 $e' = \{\,|e'_1\rangle\,,\cdots,\,|e'_n\rangle\}$ への基底変換 $|\,e'\,] = |\,e\,]P$ に伴い，ベクトル，線形形式，線形変換の表現は変更を受ける。ベクトルの列ベクトル表現の変換則は，(2.3.45) より $[\,\varepsilon'\,|a\rangle = P^{-1}[\,\varepsilon\,|a\rangle$ であるから，

$$
\boldsymbol{a'} = P^{-1}\boldsymbol{a}
\tag{2.3.57}
$$

となる。線形形式の行ベクトル表現の変換則は，(2.3.41) より $\langle\alpha|\,e'\,] = \langle\alpha|\,e\,]P$ であるから，

$$
\boldsymbol{\alpha'} = \boldsymbol{\alpha}P
\tag{2.3.58}
$$

となる。(2.3.57) と (2.3.58) より，ペアリング $\langle\alpha|a\rangle$ は

$$
\boldsymbol{\alpha'}\boldsymbol{a'} = \boldsymbol{\alpha}\boldsymbol{a}
\tag{2.3.59}
$$

を満たす。つまり，ペアリングは表現に用いた基底によらない。線形変換の行列表現の変換則は，(2.3.41)，(2.3.45) より $[\,\varepsilon'\,|\hat{X}|\,e'\,] = P^{-1}[\,\varepsilon\,|\hat{X}|\,e\,]P$ であるから，

$$
X' = P^{-1}XP
\tag{2.3.60}
$$

となる。(2.3.60) の関係にある X と X' は互いに**相似**であるという。(2.3.60) およびトレースの性質 (1.1.29), 行列式の性質 (1.5.19) より, $\mathrm{tr}\, X' = \mathrm{tr}\, X$, $\det X' = \det X$, つまり, $\hat{X}$ の行列表現のトレース, 行列式の値は表現に用いた基底によらない。そこで, 今後はその値を $\mathrm{tr}\, \hat{X}$, $\det \hat{X}$ と表し, $\hat{X}$ の**トレース**, $\hat{X}$ の**行列式**ということにする[49]。

==========

補足・計算例 24.

数ベクトル表現の変換則

高々 2 次の多項式 $a(x) = a_0 + a_1 x + a_2 x^2$ 全体のなす線形空間を V とし, V の基底 $e = \{1, x, x^2\}$ から V のもう一つの基底 $e' = \{1, 2x, -2 + 4x^2\}$ への基底変換を考える。これを表す基底変換の行列 P は (2.3.50) であり, また, P^{-1} は (2.3.51) である。

・列ベクトル表現の変換則 $\boldsymbol{a}' = P^{-1}\boldsymbol{a}$

$$\begin{bmatrix} a'_0 \\ a'_1 \\ a'_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 1/2 \\ 0 & 1/2 & 0 \\ 0 & 0 & 1/4 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a_0 \\ a_1 \\ a_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} a_0 + a_2/2 \\ a_1/2 \\ a_2/4 \end{bmatrix} \tag{2.3.61}$$

・行ベクトル表現の変換則 $\boldsymbol{\alpha}' = \boldsymbol{\alpha} P$

$$[\ \alpha'_0\ \ \alpha'_1\ \ \alpha'_2\ ] = [\ \alpha_0\ \ \alpha_1\ \ \alpha_2\ ] \begin{bmatrix} 1 & 0 & -2 \\ 0 & 2 & 0 \\ 0 & 0 & 4 \end{bmatrix} = [\ \alpha_0\ \ 2\alpha_1\ \ -2\alpha_0 + 4\alpha_2\ ] \tag{2.3.62}$$

・ペアリング $\boldsymbol{\alpha}'\boldsymbol{a}' = \boldsymbol{\alpha}\boldsymbol{a}$

$$\alpha'_0 a'_0 + \alpha'_1 a'_1 + \alpha'_2 a'_2 = \alpha_0 \cdot (a_0 + a_2/2) + 2\alpha_1 \cdot a_1/2 + (-2\alpha_0 + 4\alpha_2) \cdot a_2/4 = \alpha_0 a_0 + \alpha_1 a_1 + \alpha_2 a_2 \tag{2.3.63}$$

行列表現の変換則

$X' = P^{-1} X P$

例 1：微分演算子

(2.3.35) より,

$$D_x \overset{e}{\mapsto} \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 2 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \qquad D_x \overset{e'}{\mapsto} \begin{bmatrix} 1 & 0 & 1/2 \\ 0 & 1/2 & 0 \\ 0 & 0 & 1/4 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 2 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & 0 & -2 \\ 0 & 2 & 0 \\ 0 & 0 & 4 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 & 2 & 0 \\ 0 & 0 & 4 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \tag{2.3.64}$$

例 2：並進演算子

(2.3.36) より,

$$\mathscr{T}_c \overset{e}{\mapsto} \begin{bmatrix} 1 & -c & c^2 \\ 0 & 1 & -2c \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \qquad \mathscr{T}_c \overset{e'}{\mapsto} \begin{bmatrix} 1 & 0 & 1/2 \\ 0 & 1/2 & 0 \\ 0 & 0 & 1/4 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & -c & c^2 \\ 0 & 1 & -2c \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & 0 & -2 \\ 0 & 2 & 0 \\ 0 & 0 & 4 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & -2c & 4c^2 \\ 0 & 1 & -4c \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \tag{2.3.65}$$

[49] トレースは, 任意のダイアド $|a\rangle\langle\alpha|$ に対して $\mathrm{tr}(\,|a\rangle\langle\alpha|) = \langle\alpha|a\rangle$ を満たす線形変換全体のなす線形空間から $\mathbb{C}$ への線形写像として, 行列表現によらずに定義することもできます。

例 3：反転演算子
(2.3.37) より，

$$\mathscr{P} \overset{e}{\mapsto} \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \qquad \mathscr{P} \overset{e'}{\mapsto} \begin{bmatrix} 1 & 0 & 1/2 \\ 0 & 1/2 & 0 \\ 0 & 0 & 1/4 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & 0 & -2 \\ 0 & 2 & 0 \\ 0 & 0 & 4 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \tag{2.3.66}$$

==========

2.4 固有値問題

2.4.1 固有値・固有ベクトル・固有空間

線形空間 V における線形変換 $\hat{X}$ について，

$$\hat{X}\,|p\rangle = \xi\,|p\rangle \tag{2.4.1}$$

を満たす複素数 ξ と $\mathbf{0}$ でないベクトル $|p\rangle$ が存在するとき，ξ を $\hat{X}$ の**固有値**，$|p\rangle$ を $\hat{X}$ の固有値 ξ に属する**固有ベクトル**という[50]。このとき，ある固有値 ξ に属する固有ベクトルの全体と $\mathbf{0}$ を合わせたベクトルの集合は V の部分空間となる。これを $\hat{X}$ の固有値 ξ に対応する**固有空間**といい，$W(\xi)$ と表す[51]。$W(\xi)$ は

$$W(\xi) = \ker(\hat{X} - \xi\hat{I}) \tag{2.4.2}$$

と表すこともできる。また，$W(\xi)$ は明らかに $\hat{X}$ に関する不変部分空間である。つまり，

$$\hat{X}(W(\xi)) \subseteq W(\xi) \tag{2.4.3}$$

である。$\hat{X}$ の固有値, 固有ベクトル, 固有空間を決定する問題を**固有値問題**という。

$\hat{X}$ の固有ベクトルからなる基底をとれるとき，$\hat{X}$ は**対角化可能**であるという[52]。つまり，$\hat{X}\,|p_i\rangle = \xi_i\,|p_i\rangle$ を満たす $|p_i\rangle$ からなる基底 $p = \{\,|p_1\rangle\,, \cdots\,, |p_n\rangle\}$ をとれる

[50] ここで「属する」という用語を使っているのは，1 つの固有値に対して無限個の固有ベクトルが (2.4.1) を満たすからです。つまり，固有値を 1 つ決めても固有ベクトルは 1 つには決まらないことに注意が必要です。

[51] ここで「対応する」という用語を使っているのは，1 つの固有値に対して 1 つの固有空間が決まるからです。

[52] 線形変換が対角化可能でない場合もあり，そのときはジョルダン標準形の理論が必要となります。ジョルダン標準形の理論はかなり難しいという理由と，物理の問題にはあまり現れないという理由から，本書では扱わないことにします。

とすると，基底 p の双対基底を $\pi = \{\langle\pi_1|, \cdots, \langle\pi_n|\}$ として，基底 p による $\hat{X}$ の行列表現 Ξ は,

$$\Xi = [\,\pi\,|\hat{X}|\,p\,] = \begin{bmatrix} \xi_1 & & O \\ & \ddots & \\ O & & \xi_n \end{bmatrix} \tag{2.4.4}$$

と対角行列となる。したがって, 基底 $e = \{|e_1\rangle, \cdots, |e_n\rangle\}$ から基底 $p = \{|p_1\rangle, \cdots, |p_n\rangle\}$ への基底変換の行列を P とする，つまり，$P = [\,\varepsilon\,|\,p\,] = [\,\boldsymbol{p}_1 \cdots \boldsymbol{p}_n\,]$ とすると,

$$\Xi = P^{-1}XP \tag{2.4.5}$$

である。すなわち，基底 e による $\hat{X}$ の行列表現 X が必ずしも対角行列ではなくても，これを変換して得られる基底 p による $\hat{X}$ の行列表現 Ξ は対角行列となる。(2.3.30) のところで述べたように，$\hat{X}$ が対角化可能であることは V を $\hat{X}$ に関する 1 次元不変部分空間による直和として表すことができると言い換えてもよい。つまり,

$$V = W(\xi_1)\dot{+}\cdots\dot{+}W(\xi_n) \tag{2.4.6}$$

である。

2.4.2 スペクトル分解と固有射影

線形変換 $\hat{X}$ が対角化可能であるとき，$\hat{X}$ の固有ベクトルからなる基底を $p = \{|p_1\rangle, \cdots, |p_n\rangle\}$，その双対基底を $\pi = \{\langle\pi_1|, \cdots, \langle\pi_n|\}$ とすると，基底 p に関する完全性関係は

$$\hat{I} = |p_1\rangle\langle\pi_1| + \cdots + |p_n\rangle\langle\pi_n| \tag{2.4.7}$$

である。したがって，(2.4.7) の左から $\hat{X}$ を掛けて，$\hat{X}\,|p_i\rangle = \xi_i\,|p_i\rangle$ とすると,

$$\hat{X} = \xi_1\,|p_1\rangle\langle\pi_1| + \cdots + \xi_n\,|p_n\rangle\langle\pi_n| \tag{2.4.8}$$

と表せる。このとき,

$$\begin{aligned} \hat{X}^k &= \xi_1^k\,|p_1\rangle\langle\pi_1| + \cdots + \xi_n^k\,|p_n\rangle\langle\pi_n| \quad (k\text{ は正の整数}) \\ \hat{X}^{-1} &= \frac{1}{\xi_1}\,|p_1\rangle\langle\pi_1| + \cdots + \frac{1}{\xi_n}\,|p_n\rangle\langle\pi_n| \quad (\xi_i\text{はすべて零でない}) \end{aligned} \tag{2.4.9}$$

である。また，$\langle \pi_i | p_j \rangle = \delta_{ij}$ より，(2.4.8) の左から $\langle \pi_i |$ を掛けると，

$$\langle \pi_i | \hat{X} = \xi_i \langle \pi_i | \tag{2.4.10}$$

を得る。

$\hat{X}$ の相異なる固有値を $\xi_{(1)}, \cdots, \xi_{(r)}$，これらに対応する固有空間を $W_{(1)}, \cdots, W_{(r)}$ とし，$k = 1, \cdots, r$ について $W_{(k)}$ への**固有射影** $\hat{P}_{(k)}$ を

$$\hat{P}_{(k)} = \sum_{|p_i\rangle \in W_{(k)}} |p_i\rangle\langle \pi_i| \tag{2.4.11}$$

とおくと，

$$\hat{X}\hat{P}_{(k)} = \hat{P}_{(k)}\hat{X} = \xi_{(k)}\hat{P}_{(k)} \tag{2.4.12}$$

が成り立つ。$\hat{P}_{(k)}$ を用いると，(2.4.7) および (2.4.8) は

$$\hat{I} = \hat{P}_{(1)} + \cdots + \hat{P}_{(r)} \tag{2.4.13}$$

および

$$\hat{X} = \xi_{(1)}\hat{P}_{(1)} + \cdots + \xi_{(r)}\hat{P}_{(r)} \tag{2.4.14}$$

と表せる。(2.4.8) あるいは (2.4.14) を $\hat{X}$ の**スペクトル分解**という。また，$\hat{P}_{(k)}$ について**固有射影公式**

$$\hat{P}_{(k)} = \frac{(\hat{X} - \xi_{(1)}\hat{I}) \cdots (\hat{X} - \xi_{(k-1)}\hat{I})(\hat{X} - \xi_{(k+1)}\hat{I}) \cdots (\hat{X} - \xi_{(r)}\hat{I})}{(\xi_{(k)} - \xi_{(1)}) \cdots (\xi_{(k)} - \xi_{(k-1)})(\xi_{(k)} - \xi_{(k+1)}) \cdots (\xi_{(k)} - \xi_{(r)})} \tag{2.4.15}$$

が成り立つ[53]。(2.4.15) より，$\hat{P}_{(k)}$ は $\hat{X}$ の $r-1$ 次の多項式であることがわかる[54]。

[(2.4.15) の証明] (2.4.15) の右辺の分子は $\hat{X} - \xi_{(k)}\hat{I}$ を除く $r-1$ 個の $\hat{X} - \xi_{(l)}\hat{I}$ の積である。また，(2.4.13) と (2.4.14) より，$\hat{X} - \xi_{(l)}\hat{I}$ は $\hat{P}_{(l)}$ を除く $r-1$ 個の固有射影のスカラー倍の和である。したがって，(2.4.15) の右辺の分子を展開したとき，異なる固有射影の積を含む項はすべて消え，$\hat{P}_{(k)}$ の項だけが残る。この項の係数は (2.4.15) の右辺の分母と一致するから，約分すると $\hat{P}_{(k)}$ が残る。 ■

[53] 本書では (2.4.15) を固有射影公式とよぶことにします。

[54] $\hat{X}$ が対角化可能でない場合でも，広義固有空間による直和分解とそれに対応する射影の組を考えると，広義固有空間への射影は $\hat{X}$ の多項式であることを示せます。これについては参考文献 [4] の第 10 章を参照してください。

2.4.3　同時対角化

線形変換 $\hat{X}$，$\hat{Y}$ がともに対角化可能であるとき，これらのスペクトル分解を

$$\begin{aligned}\hat{X} &= \xi_{(1)}\hat{P}_{(1)} + \cdots + \xi_{(r)}\hat{P}_{(r)} \\ \hat{Y} &= \eta_{(1)}\hat{Q}_{(1)} + \cdots + \eta_{(s)}\hat{Q}_{(s)}\end{aligned} \tag{2.4.16}$$

とする。ここで，$k = 1, \cdots, r$ として，$\xi_{(k)}$ は $\hat{X}$ の相異なる固有値であり，$\hat{P}_{(k)}$ は固有値 $\xi_{(k)}$ に対応する固有空間 $W_X(\xi_{(k)})$ への固有射影である。$l = 1, \cdots, s$ として，$\hat{Y}$ の固有値 $\eta_{(l)}$，固有射影 $\hat{Q}_{(l)}$，固有空間 $W_Y(\eta_{(l)})$ についても同様に定義する。このとき，

$$[\,\hat{X}, \hat{Y}\,] = \hat{0} \quad \Leftrightarrow \quad \hat{X} \text{ と} \hat{Y} \text{ は同時対角化可能} \tag{2.4.17}$$

である。つまり，$\hat{X}$ と $\hat{Y}$ の共通の固有ベクトルからなる基底をとることができ，この基底による $\hat{X}$，$\hat{Y}$ の行列表現はともに対角行列となる。
[(2.4.17) の証明] (2.4.15) より，$\hat{P}_{(k)}$ は $\hat{X}$ の多項式であり，また，$\hat{Q}_{(l)}$ は $\hat{Y}$ の多項式である。したがって，$[\,\hat{X}, \hat{Y}\,] = \hat{0}$ ならば，$[\,\hat{P}_{(k)}, \hat{Q}_{(l)}\,] = \hat{0}$ である。その結果，$\hat{P}_{(k)}\hat{Q}_{(l)}$ は $W_X(\xi_{(k)}) \cap W_Y(\eta_{(l)})$ への射影となる。つまり，

$$\hat{I} = \hat{P}_{(1)}\hat{Q}_{(1)} + \cdots + \hat{P}_{(r)}\hat{Q}_{(s)} \tag{2.4.18}$$

$$V = W_X(\xi_{(1)}) \cap W_Y(\eta_{(1)}) \dot{+} \cdots \dot{+} W_X(\xi_{(r)}) \cap W_Y(\eta_{(s)}) \tag{2.4.19}$$

$$(\hat{P}_{(k)}\hat{Q}_{(l)})^2 = \hat{P}_{(k)}\hat{Q}_{(l)} \qquad (\hat{P}_{(k)}\hat{Q}_{(l)})(\hat{P}_{(k')}\hat{Q}_{(l')}) = \hat{0} \quad (k \neq k' \text{ or } l \neq l') \tag{2.4.20}$$

である。このとき，$\hat{X}$，$\hat{Y}$ のスペクトル分解は

$$\hat{X} = \sum_{k=1}^{r}\sum_{l=1}^{s} \xi_{(k)}\hat{P}_{(k)}\hat{Q}_{(l)} \qquad \hat{Y} = \sum_{k=1}^{r}\sum_{l=1}^{s} \eta_{(l)}\hat{P}_{(k)}\hat{Q}_{(l)} \tag{2.4.21}$$

であり，$W_X(\xi_{(k)}) \cap W_Y(\eta_{(l)})$ から選んだベクトルからなる基底による $\hat{X}$，$\hat{Y}$ の行列表現はともに対角行列となる。 ■

==========

補足・計算例 25.

非可換な線形変換
xy 平面上の点全体のなす線形空間における非可換な線形変換の例として 2 つの鏡映 $\hat{M}_\alpha$ と $\hat{M}_\beta$ を図 2.4 に示す[55]。

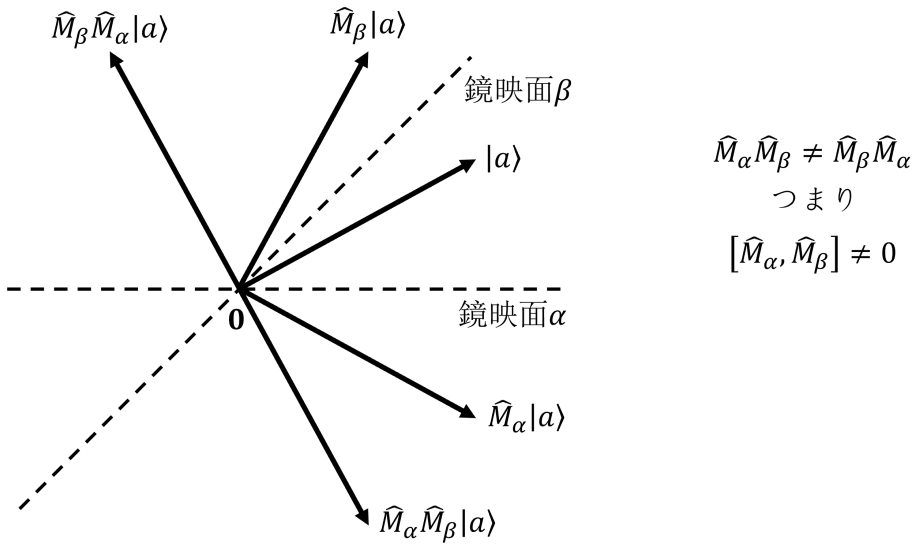


図 2.4: 可換でない 2 つの鏡映

==========

2.4.4 固有多項式

n 次元線形空間 V における線形変換 $\hat{X}$ に対して，ξ の n 次多項式

$$\det(\hat{X} - \xi\hat{I}) \tag{2.4.22}$$

を $\hat{X}$ の**固有多項式**という。また，

$$\det(\hat{X} - \xi\hat{I}) = 0 \tag{2.4.23}$$

を $\hat{X}$ の**固有方程式**という。$\hat{X}$ の固有値は，$(\hat{X} - \xi\hat{I})\,|p\rangle = \mathbf{0}$ が $|p\rangle = \mathbf{0}$ 以外の解をもつ，つまり，$\hat{X} - \xi\hat{I}$ が正則とならないような ξ の値として決まるから，$\hat{X}$ の

[55] この例の $\hat{M}_\alpha$ は水平方向の鏡映面 α に関する鏡映で，$\hat{M}_\beta$ は水平に対して反時計回りに $\pi/4$ だけ傾いた鏡映面 β に関する鏡映です。実は，これらの積 $\hat{M}_\alpha\hat{M}_\beta$ はベクトルを時計回りに $\pi/2$ だけ回転する線形変換になっています。一方，$\hat{M}_\beta\hat{M}_\alpha$ はベクトルを反時計回りに $\pi/2$ だけ回転する線形変換です。したがって，$\hat{M}_\alpha\hat{M}_\beta \neq \hat{M}_\beta\hat{M}_\alpha$，つまり，$[\hat{M}_\alpha, \hat{M}_\beta] \neq \hat{0}$ です。

固有方程式 (2.4.23) の根である。$\hat{X}-\xi\hat{I}$ は正則でないから，$\dim\ker(\hat{X}-\xi\hat{I})\geq 1$ である。したがって，

$$\text{任意の線形変換は少なくとも 1 つの固有ベクトルをもつ} \tag{2.4.24}$$

ことがわかる。代数学の基本定理により，固有多項式 (2.4.22) は

$$\det(\hat{X}-\xi\hat{I})=(-1)^n(\xi-\xi_{(1)})^{m_1}\cdots(\xi-\xi_{(r)})^{m_r} \tag{2.4.25}$$

と因数分解できる。ここで，$\xi_{(1)},\cdots,\xi_{(r)}$ は $\hat{X}$ の相異なる固有値である。また，m_k は固有値 $\xi_{(k)}$ の代数的重複度であり，$m_1+\cdots+m_r=n$ を満たす。このとき，$\xi_{(k)}$ に対応する $\hat{X}$ の固有空間を $W(\xi_{(k)})$ とすると，

$$\hat{X}\text{ は対角化可能}\quad\Leftrightarrow\quad\dim W(\xi_{(k)})=m_k\quad(k=1,\cdots,r) \tag{2.4.26}$$

である。つまり，それぞれの $W(\xi_{(k)})$ において m_k 個の線形独立なベクトルを選ぶことができれば，$\hat{X}$ の固有ベクトルからなる V の基底をとれる。(2.4.26) において，$\dim W(\xi_{(k)})=m_k$ が成り立つかどうかをみるには，$W(\xi_{(k)})=\ker(\hat{X}-\xi_{(k)}\hat{I})$ より，

$$\dim W(\xi_{(k)})=\dim\ker(\hat{X}-\xi_{(k)}\hat{I})=n-\mathrm{rank}(\hat{X}-\xi_{(k)}\hat{I}) \tag{2.4.27}$$

であるから，$\mathrm{rank}(\hat{X}-\xi_{(k)}\hat{I})=n-m_k$ が成り立つかどうかを調べればよい。

==========

補足・計算例 26.

固有値問題 (対角化可能な場合)

対角化可能な線形変換についての 4 つの例を示す。例 1 と例 3 は固有値に重根がない場合であり，例 2 と例 4 は固有値に重根がある場合である。表現はある基底 $e=\{|e_1\rangle,\cdots,|e_n\rangle\}$ によるものとする。なお，例 1(2)，例 2(2) の P の逆行列 P^{-1} の計算については補足・計算例 9 の (1.3.37) を，また，例 3(2)，例 4(2) の P の逆行列 P^{-1} の計算については補足・計算例 13 の例 1 (1.4.14)-(1.4.16) を参照せよ。

例 1：固有値に重根がない場合

$$X=\begin{bmatrix}6 & -2\\ 6 & -1\end{bmatrix} \tag{2.4.28}$$

(1) 固有値・固有ベクトル・固有空間

$$\begin{aligned}\det(X-\xi I)&=\det\begin{bmatrix}6-\xi & -2\\ 6 & -1-\xi\end{bmatrix}=(6-\xi)(-1-\xi)-(-2)\cdot 6=\xi^2-5\xi+6\\ &=(\xi-2)(\xi-3)=0\quad\therefore\xi_1=2,\ \xi_2=3\quad\Rightarrow\quad\xi_{(1)}=2,\ \xi_{(2)}=3\end{aligned} \tag{2.4.29}$$

・$\xi = \xi_{(1)}(=2)$ のとき

$$(X - \xi_{(1)}I)\boldsymbol{c} = \begin{bmatrix} 6-2 & -2 \\ 6 & -1-2 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} c_1 \\ c_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 4 & -2 \\ 6 & -3 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} c_1 \\ c_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 4c_1 - 2c_2 \\ 6c_1 - 3c_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \end{bmatrix} \quad \therefore \boldsymbol{p}_1 = \begin{bmatrix} 1 \\ 2 \end{bmatrix} \tag{2.4.30}$$

$$W_{(1)} = \mathrm{span}(\boldsymbol{p}_1) \qquad \dim W_{(1)} = 1 \tag{2.4.31}$$

・$\xi = \xi_{(2)}(=3)$ のとき

$$(X - \xi_{(2)}I)\boldsymbol{c} = \begin{bmatrix} 6-3 & -2 \\ 6 & -1-3 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} c_1 \\ c_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 3 & -2 \\ 6 & -4 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} c_1 \\ c_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 3c_1 - 2c_2 \\ 6c_1 - 4c_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \end{bmatrix} \quad \therefore \boldsymbol{p}_2 = \begin{bmatrix} 2 \\ 3 \end{bmatrix} \tag{2.4.32}$$

$$W_{(2)} = \mathrm{span}(\boldsymbol{p}_2) \qquad \dim W_{(2)} = 1 \tag{2.4.33}$$

(2) スペクトル分解・固有射影

$$P = [\,\boldsymbol{p}_1\,\boldsymbol{p}_2\,] = \begin{bmatrix} 1 & 2 \\ 2 & 3 \end{bmatrix} \quad \Rightarrow \quad P^{-1} = \begin{bmatrix} -3 & 2 \\ 2 & -1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \boldsymbol{\pi}_1 \\ \boldsymbol{\pi}_2 \end{bmatrix} \quad \therefore \begin{cases} \boldsymbol{\pi}_1 = [\ -3\ \ 2\ ] \\ \boldsymbol{\pi}_2 = [\ 2\ \ -1\ ] \end{cases} \tag{2.4.34}$$

$$\begin{aligned} P_{(1)} &= \boldsymbol{p}_1\boldsymbol{\pi}_1 = \begin{bmatrix} 1 \\ 2 \end{bmatrix}[\ -3\ \ 2\ ] = \begin{bmatrix} -3 & 2 \\ -6 & 4 \end{bmatrix} \\ P_{(2)} &= \boldsymbol{p}_2\boldsymbol{\pi}_2 = \begin{bmatrix} 2 \\ 3 \end{bmatrix}[\ 2\ \ -1\ ] = \begin{bmatrix} 4 & -2 \\ 6 & -3 \end{bmatrix} \end{aligned} \tag{2.4.35}$$

$$X = \xi_1\boldsymbol{p}_1\boldsymbol{\pi}_1 + \xi_2\boldsymbol{p}_2\boldsymbol{\pi}_2 = \xi_{(1)}P_{(1)} + \xi_{(2)}P_{(2)} = 2\begin{bmatrix} -3 & 2 \\ -6 & 4 \end{bmatrix} + 3\begin{bmatrix} 4 & -2 \\ 6 & -3 \end{bmatrix} \tag{2.4.36}$$

(3) 固有射影公式

$$\begin{aligned} P_{(1)} &= \frac{X - \xi_{(2)}I}{\xi_{(1)} - \xi_{(2)}} = \frac{1}{2-3}\left(\begin{bmatrix} 6 & -2 \\ 6 & -1 \end{bmatrix} - 3\begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}\right) = \begin{bmatrix} -3 & 2 \\ -6 & 4 \end{bmatrix} \\ P_{(2)} &= \frac{X - \xi_{(1)}I}{\xi_{(2)} - \xi_{(1)}} = \frac{1}{3-2}\left(\begin{bmatrix} 6 & -2 \\ 6 & -1 \end{bmatrix} - 2\begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}\right) = \begin{bmatrix} 4 & -2 \\ 6 & -3 \end{bmatrix} \end{aligned} \tag{2.4.37}$$

例 2：固有値に重根がある場合[56]

$$X = \begin{bmatrix} 2 & 0 \\ 0 & 2 \end{bmatrix} \tag{2.4.38}$$

(1) 固有値・固有ベクトル・固有空間

$$\det(X - \xi I) = \det\begin{bmatrix} 2-\xi & 0 \\ 0 & 2-\xi \end{bmatrix} = (\xi - 2)^2 \quad \therefore \xi_1 = 2,\ \xi_2 = 2 \quad \Rightarrow \quad \xi_{(1)} = 2\,(\text{重根}) \tag{2.4.39}$$

[56]固有値が重根でない場合 (固有空間が 1 次元) に比べて，固有値が重根の場合 (固有空間が 2 次元以上) は固有ベクトルを選ぶ際の自由度が一挙に増えることに注意しましょう。そのことをはっきり認識してもらえるように，例 2 では敢えて固有ベクトルとして標準基底ではないものを選んでいます。

・$\xi = \xi_{(1)}(= 2\,(\text{重根}))$ のとき

$$(X - \xi_{(1)}I)\boldsymbol{c} = \begin{bmatrix} 2-2 & 0 \\ 0 & 2-2 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} c_1 \\ c_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} c_1 \\ c_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \end{bmatrix} \quad \therefore \boldsymbol{p}_1 = \begin{bmatrix} 1 \\ 2 \end{bmatrix} \quad \boldsymbol{p}_2 = \begin{bmatrix} 2 \\ 3 \end{bmatrix} \tag{2.4.40}$$

$$W_{(1)} = \mathrm{span}(\boldsymbol{p}_1, \boldsymbol{p}_2) \qquad \dim W_{(1)} = 2 \tag{2.4.41}$$

(2) スペクトル分解・固有射影

$$P = [\,\boldsymbol{p}_1\,\boldsymbol{p}_2\,] = \begin{bmatrix} 1 & 2 \\ 2 & 3 \end{bmatrix} \quad \Rightarrow \quad P^{-1} = \begin{bmatrix} -3 & 2 \\ 2 & -1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \boldsymbol{\pi}_1 \\ \boldsymbol{\pi}_2 \end{bmatrix} \quad \therefore \begin{cases} \boldsymbol{\pi}_1 = [\ -3\ \ 2\ ] \\ \boldsymbol{\pi}_2 = [\ 2\ \ -1\ ] \end{cases} \tag{2.4.42}$$

$$P_{(1)} = \boldsymbol{p}_1\boldsymbol{\pi}_1 + \boldsymbol{p}_2\boldsymbol{\pi}_2 = \begin{bmatrix} 1 \\ 2 \end{bmatrix}[\ -3\ \ 2\ ] + \begin{bmatrix} 2 \\ 3 \end{bmatrix}[\ 2\ \ -1\ ] = \begin{bmatrix} -3 & 2 \\ -6 & 4 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} 4 & -2 \\ 6 & -3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} \tag{2.4.43}$$

$$X = \xi_1\boldsymbol{p}_1\boldsymbol{\pi}_1 + \xi_2\boldsymbol{p}_2\boldsymbol{\pi}_2 = \xi_{(1)}P_{(1)} = 2\begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} \tag{2.4.44}$$

(3) 固有射影公式の適用なし

例 3：固有値に重根がない場合

$$X = \begin{bmatrix} 2 & 4 & -3 \\ -1 & 9 & -5 \\ -2 & 10 & -5 \end{bmatrix} \tag{2.4.45}$$

(1) 固有値・固有ベクトル・固有空間

$$\begin{aligned} \det(X - \xi I) &= \det\begin{bmatrix} 2-\xi & 4 & -3 \\ -1 & 9-\xi & -5 \\ -2 & 10 & -5-\xi \end{bmatrix} = (2-\xi)(9-\xi)(-5-\xi) + 70 - 48\xi + 26 \\ &= (2-\xi)((9-\xi)(-5-\xi) + 48) = (2-\xi)(\xi^2 - 4\xi + 3) = -(\xi-1)(\xi-2)(\xi-3) = 0 \\ &\therefore \xi_1 = 1,\ \xi_2 = 2,\ \xi_3 = 3 \quad \Rightarrow \quad \xi_{(1)} = 1,\ \xi_{(2)} = 2,\ \xi_{(3)} = 3 \end{aligned} \tag{2.4.46}$$

・$\xi = \xi_{(1)}(= 1)$ のとき

$$\begin{aligned} (X - \xi_{(1)}I)\boldsymbol{c} &= \begin{bmatrix} 2-1 & 4 & -3 \\ -1 & 9-1 & -5 \\ -2 & 10 & -5-1 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} c_1 \\ c_2 \\ c_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 4 & -3 \\ -1 & 8 & -5 \\ -2 & 10 & -6 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} c_1 \\ c_2 \\ c_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} c_1 + 4c_2 - 3c_3 \\ -c_1 + 8c_2 - 5c_3 \\ -2c_1 + 10c_2 - 6c_3 \end{bmatrix} \\ &= \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} \quad \therefore \boldsymbol{p}_1 = \begin{bmatrix} 1 \\ 2 \\ 3 \end{bmatrix} \end{aligned} \tag{2.4.47}$$

$$W_{(1)} = \mathrm{span}(\boldsymbol{p}_1) \qquad \dim W_{(1)} = 1 \tag{2.4.48}$$

・$\xi = \xi_{(2)}(=2)$ のとき

$$
\begin{aligned}
(X-\xi_{(2)}I)\boldsymbol{c} &= \begin{bmatrix} 2-2 & 4 & -3 \\ -1 & 9-2 & -5 \\ -2 & 10 & -5-2 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} c_1 \\ c_2 \\ c_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 & 4 & -3 \\ -1 & 7 & -5 \\ -2 & 10 & -7 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} c_1 \\ c_2 \\ c_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 4c_2-3c_3 \\ -c_1+7c_2-5c_3 \\ -2c_1+10c_2-7c_3 \end{bmatrix} \\
&= \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} \qquad \therefore \boldsymbol{p}_2 = \begin{bmatrix} 1 \\ 3 \\ 4 \end{bmatrix}
\end{aligned}
\tag{2.4.49}
$$

$$
W_{(2)} = \mathrm{span}(\boldsymbol{p}_2) \qquad \dim W_{(2)} = 1 \tag{2.4.50}
$$

・$\xi = \xi_{(3)}(=3)$ のとき

$$
\begin{aligned}
(X-\xi_{(3)}I)\boldsymbol{c} &= \begin{bmatrix} 2-3 & 4 & -3 \\ -1 & 9-3 & -5 \\ -2 & 10 & -5-3 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} c_1 \\ c_2 \\ c_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -1 & 4 & -3 \\ -1 & 6 & -5 \\ -2 & 10 & -8 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} c_1 \\ c_2 \\ c_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -c_1+4c_2-3c_3 \\ -c_1+6c_2-5c_3 \\ -2c_1+10c_2-8c_3 \end{bmatrix} \\
&= \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} \qquad \therefore \boldsymbol{p}_3 = \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \end{bmatrix}
\end{aligned}
\tag{2.4.51}
$$

$$
W_{(3)} = \mathrm{span}(\boldsymbol{p}_3) \qquad \dim W_{(3)} = 1 \tag{2.4.52}
$$

(2) スペクトル分解・固有射影

$$
P = [\,\boldsymbol{p}_1\,\boldsymbol{p}_2\,\boldsymbol{p}_3\,] = \begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 \\ 2 & 3 & 1 \\ 3 & 4 & 1 \end{bmatrix} \quad \Rightarrow \quad P^{-1} = \begin{bmatrix} 1 & -3 & 2 \\ -1 & 2 & -1 \\ 1 & 1 & -1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \boldsymbol{\pi}_1 \\ \boldsymbol{\pi}_2 \\ \boldsymbol{\pi}_3 \end{bmatrix} \quad \therefore \begin{cases} \boldsymbol{\pi}_1 = [\ 1 \ \ -3 \ \ 2\ ] \\ \boldsymbol{\pi}_2 = [\ -1 \ \ 2 \ \ -1\ ] \\ \boldsymbol{\pi}_3 = [\ 1 \ \ 1 \ \ -1\ ] \end{cases}
\tag{2.4.53}
$$

$$
\begin{aligned}
P_{(1)} &= \boldsymbol{p}_1\boldsymbol{\pi}_1 = \begin{bmatrix} 1 \\ 2 \\ 3 \end{bmatrix}[\ 1 \ \ -3 \ \ 2\ ] = \begin{bmatrix} 1 & -3 & 2 \\ 2 & -6 & 4 \\ 3 & -9 & 6 \end{bmatrix} \\
P_{(2)} &= \boldsymbol{p}_2\boldsymbol{\pi}_2 = \begin{bmatrix} 1 \\ 3 \\ 4 \end{bmatrix}[\ -1 \ \ 2 \ \ -1\ ] = \begin{bmatrix} -1 & 2 & -1 \\ -3 & 6 & -3 \\ -4 & 8 & -4 \end{bmatrix} \\
P_{(3)} &= \boldsymbol{p}_3\boldsymbol{\pi}_3 = \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \end{bmatrix}[\ 1 \ \ 1 \ \ -1\ ] = \begin{bmatrix} 1 & 1 & -1 \\ 1 & 1 & -1 \\ 1 & 1 & -1 \end{bmatrix}
\end{aligned}
\tag{2.4.54}
$$

$$
\begin{aligned}
X &= \xi_1\boldsymbol{p}_1\boldsymbol{\pi}_1 + \xi_2\boldsymbol{p}_2\boldsymbol{\pi}_2 + \xi_3\boldsymbol{p}_3\boldsymbol{\pi}_3 = \xi_{(1)}P_{(1)} + \xi_{(2)}P_{(2)} + \xi_{(3)}P_{(3)} \\
&= 1\begin{bmatrix} 1 & -3 & 2 \\ 2 & -6 & 4 \\ 3 & -9 & 6 \end{bmatrix} + 2\begin{bmatrix} -1 & 2 & -1 \\ -3 & 6 & -3 \\ -4 & 8 & -4 \end{bmatrix} + 3\begin{bmatrix} 1 & 1 & -1 \\ 1 & 1 & -1 \\ 1 & 1 & -1 \end{bmatrix}
\end{aligned}
\tag{2.4.55}
$$

(3) 固有射影公式

$$
\begin{aligned}
P_{(1)} &= \frac{(X-\xi_{(2)}I)(X-\xi_{(3)}I)}{(\xi_{(1)}-\xi_{(2)})(\xi_{(1)}-\xi_{(3)})} = \frac{1}{2}\begin{bmatrix} 0 & 4 & -3 \\ -1 & 7 & -5 \\ -2 & 10 & -7 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} -1 & 4 & -3 \\ -1 & 6 & -5 \\ -2 & 10 & -8 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & -3 & 2 \\ 2 & -6 & 4 \\ 3 & -9 & 6 \end{bmatrix} \\
P_{(2)} &= \frac{(X-\xi_{(1)}I)(X-\xi_{(3)}I)}{(\xi_{(2)}-\xi_{(1)})(\xi_{(2)}-\xi_{(3)})} = -\begin{bmatrix} 1 & 4 & -3 \\ -1 & 8 & -5 \\ -2 & 10 & -6 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} -1 & 4 & -3 \\ -1 & 6 & -5 \\ -2 & 10 & -8 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -1 & 2 & -1 \\ -3 & 6 & -3 \\ -4 & 8 & -4 \end{bmatrix} \\
P_{(3)} &= \frac{(X-\xi_{(1)}I)(X-\xi_{(2)}I)}{(\xi_{(3)}-\xi_{(1)})(\xi_{(3)}-\xi_{(2)})} = \frac{1}{2}\begin{bmatrix} 1 & 4 & -3 \\ -1 & 8 & -5 \\ -2 & 10 & -6 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} 0 & 4 & -3 \\ -1 & 7 & -5 \\ -2 & 10 & -7 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 1 & -1 \\ 1 & 1 & -1 \\ 1 & 1 & -1 \end{bmatrix}
\end{aligned}
\tag{2.4.56}
$$

例 4：固有値に重根がある場合

$$
X = \begin{bmatrix} 3 & 1 & -1 \\ 1 & 3 & -1 \\ 1 & 1 & 1 \end{bmatrix} \tag{2.4.57}
$$

(1) 固有値・固有ベクトル・固有空間

$$
\begin{aligned}
\det(X-\xi I) &= \det\begin{bmatrix} 3-\xi & 1 & -1 \\ 1 & 3-\xi & -1 \\ 1 & 1 & 1-\xi \end{bmatrix} = (3-\xi)^2(1-\xi) - 2 + 2(3-\xi) - (1-\xi) \\
&= (3-\xi)^2(1-\xi) + 3 - \xi = (3-\xi)((3-\xi)(1-\xi)+1) = -(\xi-2)^2(\xi-3) = 0 \\
&\therefore \xi_1 = 2,\ \xi_2 = 2,\ \xi_3 = 3 \quad \Rightarrow \quad \xi_{(1)} = 2\,(\text{重根}),\ \xi_{(2)} = 3
\end{aligned}
\tag{2.4.58}
$$

・$\xi = \xi_{(1)}(= 2\,(\text{重根}))$ のとき

$$
\begin{aligned}
(X-\xi_{(1)}I)\boldsymbol{c} &= \begin{bmatrix} 3-2 & 1 & -1 \\ 1 & 3-2 & -1 \\ 1 & 1 & 1-2 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} c_1 \\ c_2 \\ c_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 1 & -1 \\ 1 & 1 & -1 \\ 1 & 1 & -1 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} c_1 \\ c_2 \\ c_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} c_1+c_2-c_3 \\ c_1+c_2-c_3 \\ c_1+c_2-c_3 \end{bmatrix} \\
&= \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} \quad \therefore \boldsymbol{p}_1 = \begin{bmatrix} 1 \\ 2 \\ 3 \end{bmatrix} \quad \boldsymbol{p}_2 = \begin{bmatrix} 1 \\ 3 \\ 4 \end{bmatrix}
\end{aligned}
\tag{2.4.59}
$$

$$
W_{(1)} = \mathrm{span}(\boldsymbol{p}_1, \boldsymbol{p}_2) \qquad \dim W_{(1)} = 2 \tag{2.4.60}
$$

・$\xi = \xi_{(2)}(= 3)$ のとき

$$
\begin{aligned}
(X-\xi_{(2)}I)\boldsymbol{c} &= \begin{bmatrix} 3-3 & 1 & -1 \\ 1 & 3-3 & -1 \\ 1 & 1 & 1-3 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} c_1 \\ c_2 \\ c_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 & 1 & -1 \\ 1 & 0 & -1 \\ 1 & 1 & -2 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} c_1 \\ c_2 \\ c_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} c_2-c_3 \\ c_1-c_3 \\ c_1+c_2-2c_3 \end{bmatrix} \\
&= \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} \quad \therefore \boldsymbol{p}_3 = \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \end{bmatrix}
\end{aligned}
\tag{2.4.61}
$$

$$
W_{(2)} = \mathrm{span}(\boldsymbol{p}_3) \qquad \dim W_{(2)} = 1 \tag{2.4.62}
$$

(2) スペクトル分解・固有射影

$$P = [\,\boldsymbol{p}_1\,\boldsymbol{p}_2\,\boldsymbol{p}_3\,] = \begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 \\ 2 & 3 & 1 \\ 3 & 4 & 1 \end{bmatrix} \quad \Rightarrow \quad P^{-1} = \begin{bmatrix} 1 & -3 & 2 \\ -1 & 2 & -1 \\ 1 & 1 & -1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \boldsymbol{\pi}_1 \\ \boldsymbol{\pi}_2 \\ \boldsymbol{\pi}_3 \end{bmatrix} \quad \therefore \begin{cases} \boldsymbol{\pi}_1 = [\ 1 \ \ -3 \ \ 2\ ] \\ \boldsymbol{\pi}_2 = [\ -1 \ \ 2 \ \ -1\ ] \\ \boldsymbol{\pi}_3 = [\ 1 \ \ 1 \ \ -1\ ] \end{cases} \tag{2.4.63}$$

$$\begin{aligned} P_{(1)} &= \boldsymbol{p}_1\boldsymbol{\pi}_1 + \boldsymbol{p}_2\boldsymbol{\pi}_2 = \begin{bmatrix} 1 \\ 2 \\ 3 \end{bmatrix} [\ 1 \ \ -3 \ \ 2\ ] + \begin{bmatrix} 1 \\ 3 \\ 4 \end{bmatrix} [\ -1 \ \ 2 \ \ -1\ ] \\ &= \begin{bmatrix} 1 & -3 & 2 \\ 2 & -6 & 4 \\ 3 & -9 & 6 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} -1 & 2 & -1 \\ -3 & 6 & -3 \\ -4 & 8 & -4 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 & -1 & 1 \\ -1 & 0 & 1 \\ -1 & -1 & 2 \end{bmatrix} \\ P_{(2)} &= \boldsymbol{p}_3\boldsymbol{\pi}_3 = \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \end{bmatrix} [\ 1 \ \ 1 \ \ -1\ ] = \begin{bmatrix} 1 & 1 & -1 \\ 1 & 1 & -1 \\ 1 & 1 & -1 \end{bmatrix} \end{aligned} \tag{2.4.64}$$

$$\begin{aligned} X &= \xi_1\boldsymbol{p}_1\boldsymbol{\pi}_1 + \xi_2\boldsymbol{p}_2\boldsymbol{\pi}_2 + \xi_3\boldsymbol{p}_3\boldsymbol{\pi}_3 = \xi_{(1)}P_{(1)} + \xi_{(2)}P_{(2)} \\ &= 2\begin{bmatrix} 0 & -1 & 1 \\ -1 & 0 & 1 \\ -1 & -1 & 2 \end{bmatrix} + 3\begin{bmatrix} 1 & 1 & -1 \\ 1 & 1 & -1 \\ 1 & 1 & -1 \end{bmatrix} \end{aligned} \tag{2.4.65}$$

(3) 固有射影公式

$$\begin{aligned} P_{(1)} &= \frac{X - \xi_{(2)}I}{\xi_{(1)} - \xi_{(2)}} = \frac{1}{2-3}\left(\begin{bmatrix} 3 & 1 & -1 \\ 1 & 3 & -1 \\ 1 & 1 & 1 \end{bmatrix} - 3\begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \right) = \begin{bmatrix} 0 & -1 & 1 \\ -1 & 0 & 1 \\ -1 & -1 & 2 \end{bmatrix} \\ P_{(2)} &= \frac{X - \xi_{(1)}I}{\xi_{(2)} - \xi_{(1)}} = \frac{1}{3-2}\left(\begin{bmatrix} 3 & 1 & -1 \\ 1 & 3 & -1 \\ 1 & 1 & 1 \end{bmatrix} - 2\begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \right) = \begin{bmatrix} 1 & 1 & -1 \\ 1 & 1 & -1 \\ 1 & 1 & -1 \end{bmatrix} \end{aligned} \tag{2.4.66}$$

固有値問題 (対角化可能でない場合)
対角化可能でない行列の例を以下に示す。特に，例 5 は最も簡単な対角化可能でない行列の例であり，対角化可能な場合の例 2 との相違に注意せよ。表現はある基底 $e = \{\,|e_1\rangle\,, \cdots\,, |e_n\rangle\}$ によるものとする。

例 5：対角化可能でない 2 次正方行列

$$X = \begin{bmatrix} 2 & 1 \\ 0 & 2 \end{bmatrix} \tag{2.4.67}$$

(1) 固有値・固有ベクトル・固有空間

$$\det(X - \xi I) = \det\begin{bmatrix} 2-\xi & 1 \\ 0 & 2-\xi \end{bmatrix} = (\xi - 2)^2 = 0 \quad \therefore \xi_1 = 2,\ \xi_2 = 2 \quad \Rightarrow \quad \xi_{(1)} = 2\,(\text{重根}) \tag{2.4.68}$$

・$\xi = \xi_{(1)}(= 2\,(\text{重根}))$ のとき

$$(X - \xi_{(1)}I)\boldsymbol{c} = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} c_1 \\ c_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} c_2 \\ 0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \end{bmatrix} \quad \therefore \boldsymbol{p}_1 = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix} \tag{2.4.69}$$

$$W_{(1)} = \mathrm{span}(\boldsymbol{p}_1) \qquad \dim W_{(1)} = 1 \tag{2.4.70}$$

固有値 $\xi_{(1)}$ の代数的重複度 m_1 は $m_1 = 2$ であるのに対し，$\xi_{(1)}$ に対応する固有空間 $W_{(1)}$ の次元は $\dim W_{(1)} = 1$ である。したがって，$\dim W_{(1)} < m_1$ であるから，この例の行列 X は対角化可能でない。

例 6：高々 2 次の多項式全体のなす線形空間における微分演算子の行列表現 (2.3.35)

$$X = \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 2 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \tag{2.4.71}$$

(1) 固有値・固有ベクトル・固有空間

$$\begin{aligned} &\det(X - \xi I) = \det \begin{bmatrix} -\xi & 1 & 0 \\ 0 & -\xi & 2 \\ 0 & 0 & -\xi \end{bmatrix} = -\xi^3 = 0 \\ &\therefore \xi_1 = 0,\ \xi_2 = 0,\ \xi_3 = 0 \quad \Rightarrow \quad \xi_{(1)} = 0\,(3\ \text{重根}) \end{aligned} \tag{2.4.72}$$

・$\xi = \xi_{(1)}(= 0\,(3\ \text{重根}))$ のとき

$$(X - \xi_{(1)}I)\boldsymbol{c} = \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 2 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} c_1 \\ c_2 \\ c_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} c_2 \\ 2c_3 \\ 0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} \quad \therefore \boldsymbol{p}_1 = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} \tag{2.4.73}$$

$$W_{(1)} = \mathrm{span}(\boldsymbol{p}_1) \qquad \dim W_{(1)} = 1 \tag{2.4.74}$$

固有値 $\xi_{(1)}$ の代数的重複度 m_1 は $m_1 = 3$ であるのに対し，$\xi_{(1)}$ に対応する固有空間 $W_{(1)}$ の次元は $\dim W_{(1)} = 1$ である。したがって，$\dim W_{(1)} < m_1$ であるから，この例の行列 X は対角化可能でない[57]。

例 7：高々 2 次の多項式全体のなす線形空間における並進演算子の行列表現 (2.3.36)($c \neq 0$ とする)

$$X = \begin{bmatrix} 1 & -c & c^2 \\ 0 & 1 & -2c \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \tag{2.4.75}$$

(1) 固有値・固有ベクトル・固有空間

$$\begin{aligned} &\det(X - \xi I) = \det \begin{bmatrix} 1-\xi & -c & c^2 \\ 0 & 1-\xi & -2c \\ 0 & 0 & 1-\xi \end{bmatrix} = (1-\xi)^3 = 0 \\ &\therefore \xi_1 = 1,\ \xi_2 = 1,\ \xi_3 = 1 \quad \Rightarrow \quad \xi_{(1)} = 1\,(3\ \text{重根}) \end{aligned} \tag{2.4.76}$$

[57]微分演算子に $-i\hbar$ を掛けたもの ($\hbar$ はプランク定数 h を 2π で割った定数) は量子力学で運動量を表す演算子として重要な役割を果たしますが，どのような関数のなす線形空間で考えているかによって対角化可能となることもならないこともあります。

・$\xi = \xi_{(1)}(= 1\,(3\text{ 重根}))$ のとき

$$(X - \xi_{(1)}I)\boldsymbol{c} = \begin{bmatrix} 0 & -c & c^2 \\ 0 & 0 & -2c \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} c_1 \\ c_2 \\ c_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -cc_2 + c^2c_3 \\ -2cc_3 \\ 0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} \quad \therefore \boldsymbol{p}_1 = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} \tag{2.4.77}$$

$$W_{(1)} = \mathrm{span}(\boldsymbol{p}_1) \qquad \dim W_{(1)} = 1 \tag{2.4.78}$$

固有値 $\xi_{(1)}$ の代数的重複度 m_1 は $m_1 = 3$ であるのに対し，$\xi_{(1)}$ に対応する固有空間 $W_{(1)}$ の次元は $\dim W_{(1)} = 1$ である。したがって，$\dim W_{(1)} < m_1$ であるから，この例の行列 X は対角化可能でない。

同時対角化

対角化可能な 2 つの線形変換の同時対角化についての例を示す。例 8 は同時対角化可能な場合についての, 例 9 は同時対角化可能でない場合についてのものである。表現はある基底 $e = \{\,|e_1\rangle\,, \cdots\,, |e_n\rangle\}$ によるものとする。

例 8：同時対角化可能な場合

$$X = \begin{bmatrix} 6 & -2 \\ 6 & -1 \end{bmatrix} \qquad Y = \begin{bmatrix} 7 & -2 \\ 6 & 0 \end{bmatrix} \tag{2.4.79}$$

$$\begin{aligned} [\,X, Y\,] = XY - YX &= \begin{bmatrix} 6 & -2 \\ 6 & -1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 7 & -2 \\ 6 & 0 \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} 7 & -2 \\ 6 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 6 & -2 \\ 6 & -1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 30 & -12 \\ 36 & -12 \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} 30 & -12 \\ 36 & -12 \end{bmatrix} \\ &= \begin{bmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix} \qquad \therefore X \text{ と } Y \text{ は可換} \end{aligned} \tag{2.4.80}$$

$$\boldsymbol{p}_1 = \begin{bmatrix} 1 \\ 2 \end{bmatrix} \quad \boldsymbol{p}_2 = \begin{bmatrix} 2 \\ 3 \end{bmatrix} \quad \Rightarrow \quad X\boldsymbol{p}_1 = 2\boldsymbol{p}_1 \quad X\boldsymbol{p}_2 = 3\boldsymbol{p}_2 \qquad Y\boldsymbol{p}_1 = 3\boldsymbol{p}_1 \quad Y\boldsymbol{p}_2 = 4\boldsymbol{p}_2 \tag{2.4.81}$$

この例の X と Y は可換であるため，X と Y の共通の固有ベクトルからなる基底 $p = \{\boldsymbol{p}_1, \boldsymbol{p}_2\}$ をとれる[58]。

例 9：同時対角化可能でない場合

$$X = \begin{bmatrix} 6 & -2 \\ 6 & -1 \end{bmatrix} \qquad Y = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 2 \end{bmatrix} \tag{2.4.82}$$

$$\begin{aligned} [\,X, Y\,] = XY - YX &= \begin{bmatrix} 6 & -2 \\ 6 & -1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 2 \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 6 & -2 \\ 6 & -1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 6 & -4 \\ 6 & -2 \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} 6 & -2 \\ 12 & -2 \end{bmatrix} \\ &= \begin{bmatrix} 0 & -2 \\ -6 & 0 \end{bmatrix} \neq \begin{bmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix} \qquad \therefore X \text{ と } Y \text{ は可換でない} \end{aligned} \tag{2.4.83}$$

$$\boldsymbol{p}_1 = \begin{bmatrix} 1 \\ 2 \end{bmatrix} \quad \boldsymbol{p}_2 = \begin{bmatrix} 2 \\ 3 \end{bmatrix} \quad \Rightarrow \quad X\boldsymbol{p}_1 = 2\boldsymbol{p}_1 \quad X\boldsymbol{p}_2 = 3\boldsymbol{p}_2 \qquad Y\boldsymbol{p}_1 = 5\boldsymbol{p}_1 - 2\boldsymbol{p}_2 \quad Y\boldsymbol{p}_2 = 6\boldsymbol{p}_1 - 2\boldsymbol{p}_2 \tag{2.4.84}$$

[58] したがって，基底 p による線形変換 $\hat{X}$，$\hat{Y}$ の行列表現はともに対角行列になります。

$$\boldsymbol{q}_1 = \begin{bmatrix}1\\0\end{bmatrix} \quad \boldsymbol{q}_2 = \begin{bmatrix}0\\1\end{bmatrix} \quad \Rightarrow \quad X\boldsymbol{q}_1 = 6\boldsymbol{q}_1 + 6\boldsymbol{q}_2 \quad X\boldsymbol{q}_2 = -2\boldsymbol{q}_1 - \boldsymbol{q}_2 \qquad Y\boldsymbol{q}_1 = \boldsymbol{q}_1 \quad Y\boldsymbol{q}_2 = 2\boldsymbol{q}_2 \tag{2.4.85}$$

この例の X と Y は可換でないため，X と Y の共通の固有ベクトルからなる基底をとれない。

射影の和

射影の和が射影となるための必要十分条件について述べる。線形変換 $\hat{X}$ が射影のとき，つまり，$\hat{X}^2 = \hat{X}$ のとき，その固有値は 0 と 1 である。固有値 0 に対応する固有空間は $\ker \hat{X}$ である。固有値 1 に対応する固有空間は $\operatorname{im} \hat{X}$ であり，$\dim \operatorname{im} \hat{X} = \operatorname{tr} \hat{X}$ である。これら射影の固有値・固有空間についての性質と部分空間の直和についての性質から，射影の和について以下の定理が成り立つ。$\hat{P}_{(1)}, \cdots, \hat{P}_{(s)}$ を射影とするとき，

$$(1)\ \hat{P}_{(1)} + \cdots + \hat{P}_{(s)}\text{は射影} \quad \Leftrightarrow \quad (2)\ \hat{P}_{(k)}\hat{P}_{(l)} = \hat{0} \quad (k \neq l) \tag{2.4.86}$$

が成り立つ。

[(2.4.86) の証明] まず，(1) $\Rightarrow$ (2) を示す。$\hat{P} = \hat{P}_{(1)} + \cdots + \hat{P}_{(s)}$，$W = \operatorname{im} \hat{P}$，$W_{(k)} = \operatorname{im} \hat{P}_{(k)}$ $(k = 1, \cdots, s)$ とおく。$\dim W = \operatorname{tr} \hat{P}$，$\dim W_{(k)} = \operatorname{tr} \hat{P}_{(k)}$ である。一方，$\operatorname{tr} \hat{P} = \operatorname{tr} \hat{P}_{(1)} + \cdots + \operatorname{tr} \hat{P}_{(s)}$ より，$\dim W = \dim W_{(1)} + \cdots + \dim W_{(s)}$ となるから，$W = W_{(1)} \dot{+} \cdots \dot{+} W_{(s)}$ である。したがって，$W_{(k)} \cap W_{(l)} = \{\boldsymbol{0}\}$ $(k \neq l)$，つまり，$\hat{P}_{(k)}\hat{P}_{(l)} = \hat{0}$ $(k \neq l)$ である[59]。次に，(2) $\Rightarrow$ (1) を示す。$\hat{P}_{(k)}^2 = \hat{P}_{(k)}$ および $\hat{P}_{(k)}\hat{P}_{(l)} = \hat{0}$ $(k \neq l)$ より $(\hat{P}_{(1)} + \cdots + \hat{P}_{(s)})^2 = \hat{P}_{(1)} + \cdots + \hat{P}_{(s)}$ は明らかに成り立つ。 ■

==========

2.5 線形写像

2.5.1 線形写像とその行列表現

n 次元線形空間 V から m 次元線形空間 W への写像 $\hat{X}$ が，V のベクトル $|a\rangle$，$|b\rangle$，スカラー λ に対し，

$$\hat{X}(\,|a\rangle + |b\rangle) = \hat{X}\,|a\rangle + \hat{X}\,|b\rangle \qquad \hat{X}(\lambda\,|a\rangle) = \lambda\hat{X}(\,|a\rangle) \tag{2.5.1}$$

を満たすとき，$\hat{X}$ を**線形写像**という。$\hat{X}\,|a\rangle$ の全体は W の部分空間をなす。これを $\hat{X}$ の**像**といい，$\operatorname{im} \hat{X}$ あるいは $\hat{X}(V)$ と表す。一方，$\hat{X}\,|a\rangle = \boldsymbol{0}$ となる $|a\rangle$ の全体は V の部分空間をなす。これを $\hat{X}$ の**核**といい，$\ker \hat{X}$ と表す。$\dim \operatorname{im} \hat{X}$ を $\hat{X}$ の**階数**といい，$\operatorname{rank} \hat{X}$ と表す。像と核の次元について，$\dim V = \dim \operatorname{im} \hat{X} + \dim \ker \hat{X}$

[59] この証明は W の次元 $\dim W = \operatorname{tr} \hat{P}$ が有限であることを用いているため，W が無限次元の場合には使えません。

が成り立つ。これを**次元定理**という。$\dim V = \dim W = \operatorname{rank}\hat{X}$ のとき $\hat{X}$ は V から W への全単射であり，$\hat{X}$ には逆写像 $\hat{X}^{-1}$ が存在する。つまり，$\hat{X}^{-1}\hat{X} = \hat{I}_V$，$\hat{X}\hat{X}^{-1} = \hat{I}_W$ である。このとき，$\hat{X}$ は**可逆**あるいは**可逆写像**であるという。V の基底，双対基底を $e = \{\,|e_1\rangle\,,\cdots,\,|e_n\rangle\}$，$\varepsilon = \{\,\langle\varepsilon_1|\,,\cdots,\,\langle\varepsilon_n|\}$ とし，W の基底，双対基底を $f = \{\,|f_1\rangle\,,\cdots,\,|f_m\rangle\}$，$\varphi = \{\,\langle\varphi_1|\,,\cdots,\,\langle\varphi_m|\}$ とすると，

$$I_n = [\,\varepsilon\,|\,e\,] \qquad \hat{I}_V = |\,e\,][\,\varepsilon\,| \qquad I_m = [\,\varphi\,|\,f\,] \qquad \hat{I}_W = |\,f\,][\,\varphi\,| \tag{2.5.2}$$

が成り立つ。ここで，I_n，I_m は n 次，m 次の単位行列であり，$\hat{I}_V$，$\hat{I}_W$ は V，W の恒等変換である。また，基底 e，f による $\hat{X}$ の行列表現 X とすると，

$$X = [\,\varphi\,|\hat{X}|\,e\,] \qquad \hat{X} = |\,f\,]X[\,\varepsilon\,| \tag{2.5.3}$$

が成り立つ。

2.5.2 線形写像の行列表現の標準形

V，W において基底変換 $|\,e'\,] = |\,e\,]P$，$|\,f'\,] = |\,f\,]Q$ を行うと，$[\,\varepsilon'\,| = P^{-1}[\,\varepsilon\,|$，$[\,\varphi'\,| = Q^{-1}[\,\varphi\,|$ より $[\,\varphi'\,|\hat{X}|\,e'\,] = Q^{-1}[\,\varphi\,|\hat{X}|\,e\,]P$ であるから，$\hat{X}$ の行列表現の変換則は

$$X' = Q^{-1}XP \tag{2.5.4}$$

となる。P を適当に選ぶことにより，X' が列簡約階段形になるように変換できる。また，Q を適当に選ぶことにより，X' が行簡約階段形になるように変換できる。したがって，P と Q を適当に選ぶことにより，X' が**標準形**になるように変換できる[60]。ここで，標準形とは列簡約階段形かつ行簡約階段形のことであり，r を $\hat{X}$ の階数，つまり，$r = \operatorname{rank}\hat{X}$ として，

$$\begin{bmatrix} I_r & O_{r,n-r} \\ O_{m-r,r} & O_{m-r,n-r} \end{bmatrix} \tag{2.5.5}$$

のような行列の形をいう。X' が標準形となるようにするには，以下のような手続きで基底 e'，f' を選ぶ。まず，V の基底 e' については，$n-r$ 個のベクトル

[60]線形変換の場合，$P = Q$ という制限があるため，行列表現を標準形どころか対角形に変換することさえいつも可能というわけではありません。一方，線形写像の場合，P と Q を独立に選べるならば，行列表現を標準形に変換することはいつでも可能です。なお，例 1，例 2 で示されているように，P，Q は一意的には決まらないことに注意しましょう。

$|e'_{r+1}\rangle, \cdots, |e'_n\rangle$ を $\ker \hat{X}$ から選び，これに r 個のベクトル $|e'_1\rangle, \cdots, |e'_r\rangle$ を付け加えて V の基底となるようにする。次に，W の基底 f' については，はじめの r 個のベクトルを $|f'_i\rangle = \hat{X}\,|e'_i\rangle$ $(i = 1, \cdots, r)$ とおき，これに $m - r$ 個のベクトル $|f'_{r+1}\rangle, \cdots, |f'_m\rangle$ を付け加えて W の基底となるようにする。このように選んだ基底 e'，f' による $\hat{X}$ の行列表現 X' は標準形となる。

==========

補足・計算例 27.

行列表現の標準形[61]

4 次元線形空間 V から 3 次元線形空間 W への線形写像 $\hat{X}$ が V の基底 $e = \{\,|e_1\rangle, |e_2\rangle, |e_3\rangle, |e_4\rangle\}$，$W$ の基底 $f = \{\,|f_1\rangle, |f_2\rangle, |f_3\rangle\}$ によって

$$X = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & -5 \\ -2 & 1 & 4 & 10 \\ 0 & 6 & 24 & 0 \end{bmatrix} \tag{2.5.6}$$

と表現されているとする。X を標準形にする基底変換 $|\,e'\,] = |\,e\,]P$，$|\,f'\,] = |\,f\,]Q$ を求める計算の例を 2 通りの場合について以下に示す。例 1 は行基本変形，列基本変形の順で変形を行った場合で，例 2 は列基本変形，行基本変形の順で変形を行った場合である。なお，例 1(1)，例 2(2) の Q^{-1} から Q を求める計算については，補足・計算例 13 の例 3 (1.4.20)，例 4 (1.4.23) の逆行列の計算を参照せよ。

例 1：行基本変形 → 列基本変形

(1) 行基本変形による Q の計算 ($Q^{-1}X$ が行簡約階段形になるように変形)[62]

$$\begin{aligned} [\,X\,|\,I_3\,] &= \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & -5 & 1 & 0 & 0 \\ -2 & 1 & 4 & 10 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 6 & 24 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \xrightarrow{②+=2\times①} \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & -5 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 4 & 0 & 2 & 1 & 0 \\ 0 & 6 & 24 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \\ &\xrightarrow{③+=-6\times②} \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & -5 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 4 & 0 & 2 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & -12 & -6 & 1 \end{bmatrix} = [\,Q^{-1}X\,|\,Q^{-1}\,] \qquad \therefore \operatorname{rank}\hat{X} = 2 \end{aligned} \tag{2.5.7}$$

$$\therefore Q^{-1} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 2 & 1 & 0 \\ -12 & -6 & 1 \end{bmatrix} \quad \Rightarrow \quad Q = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ -2 & 1 & 0 \\ 0 & 6 & 1 \end{bmatrix} \tag{2.5.8}$$

[61] 行列表現の標準形と基底変換の行列 P，Q を求める計算については，参考文献 [5] の第 3 章例題 3(p.35) と第 5 章例題 14(p.88) が参考になります。

[62] 例 1(1) の計算は，$Q^{-1}[\,X\,|\,I_3\,] = [\,Q^{-1}X\,|\,Q^{-1}I_3\,] = [\,Q^{-1}X\,|\,Q^{-1}\,]$ と書けばわかるように，ブロック分割を用いているとして理解することができます。例 1(2) の計算も同様にブロック分割を用いているとして理解できます。

(2) 列基本変形による P の計算

$$\begin{bmatrix} Q^{-1}X \\ \hline I_4 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & -5 \\ 0 & 1 & 4 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \xrightarrow{④+=5\times①} \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 4 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 5 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$$
$$\xrightarrow{③+=-4\times②} \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 5 \\ 0 & 1 & -4 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} Q^{-1}XP \\ \hline P \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} X' \\ \hline P \end{bmatrix} \tag{2.5.9}$$

$$\therefore P = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 5 \\ 0 & 1 & -4 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \tag{2.5.10}$$

(3) X を標準形 X' にする基底変換 $|\,e'\,] = |\,e\,]P,\ |\,f'\,] = |\,f\,]Q$

$$[\ |e_1'\rangle\ \ |e_2'\rangle\ \ |e_3'\rangle\ \ |e_4'\rangle\,] = [\ |e_1\rangle\ \ |e_2\rangle\ \ |e_3\rangle\ \ |e_4\rangle\,]P \quad \Rightarrow \quad \begin{cases} |e_1'\rangle = |e_1\rangle \\ |e_2'\rangle = |e_2\rangle \\ |e_3'\rangle = -4\,|e_2\rangle + |e_3\rangle \\ |e_4'\rangle = 5\,|e_1\rangle + |e_4\rangle \end{cases} \tag{2.5.11}$$

$$\hat{X}\,|e_3'\rangle = \hat{X}\,|e_4'\rangle = \mathbf{0} \qquad \mathrm{span}(\,|e_3'\rangle\,,\,|e_4'\rangle) = \ker \hat{X} \tag{2.5.12}$$

$$[\ |f_1'\rangle\ \ |f_2'\rangle\ \ |f_3'\rangle\,] = [\ |f_1\rangle\ \ |f_2\rangle\ \ |f_3\rangle\,]Q \quad \Rightarrow \quad \begin{cases} |f_1'\rangle = |f_1\rangle - 2\,|f_2\rangle \\ |f_2'\rangle = |f_2\rangle + 6\,|f_3\rangle \\ |f_3'\rangle = |f_3\rangle \end{cases} \tag{2.5.13}$$

$$|f_1'\rangle = \hat{X}\,|e_1'\rangle \quad |f_2'\rangle = \hat{X}\,|e_2'\rangle \qquad \mathrm{span}(\,|f_1'\rangle\,,\,|f_2'\rangle) = \mathrm{im}\,\hat{X} \tag{2.5.14}$$

$$\begin{aligned} X' = Q^{-1}XP &= \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 2 & 1 & 0 \\ -12 & -6 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & -5 \\ -2 & 1 & 4 & 10 \\ 0 & 6 & 24 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 5 \\ 0 & 1 & -4 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \\ &= \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & -5 \\ 0 & 1 & 4 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 5 \\ 0 & 1 & -4 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \end{aligned} \tag{2.5.15}$$

例 2：列基本変形 → 行基本変形
(1) 列基本変形による P の計算 (XP が列簡約階段形になるように変形)

$$\begin{bmatrix} X \\ \hline I_4 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & -5 \\ -2 & 1 & 4 & 10 \\ 0 & 6 & 24 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \xrightarrow{④+=5\times①} \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ -2 & 1 & 4 & 0 \\ 0 & 6 & 24 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 5 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$$
$$\xrightarrow{①+=2\times②} \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 4 & 0 \\ 12 & 6 & 24 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 5 \\ 2 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} = \xrightarrow{③+=-4\times②} \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 12 & 6 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 5 \\ 2 & 1 & -4 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} XP \\ \hline P \end{bmatrix} \qquad \therefore \operatorname{rank} \hat{X} = 2 \tag{2.5.16}$$

$$\therefore P = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 5 \\ 2 & 1 & -4 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \tag{2.5.17}$$

(2) 行基本変形による Q の計算

$$[\, XP \,|\, I_3 \,] = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 12 & 6 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \xrightarrow{③+=-12\times①} \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 6 & 0 & 0 & -12 & 0 & 1 \end{bmatrix}$$
$$\xrightarrow{③+=-6\times②} \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & -12 & -6 & 1 \end{bmatrix} = [\, Q^{-1}XP \,|\, Q^{-1} \,] \tag{2.5.18}$$

$$\therefore Q^{-1} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ -12 & -6 & 1 \end{bmatrix} \quad \Rightarrow \quad Q = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 12 & 6 & 1 \end{bmatrix} \tag{2.5.19}$$

(3) X を標準形 X' にする基底変換 $|\, e' \,] = |\, e \,]P,\ \ |\, f' \,] = |\, f \,]Q$

$$[\, |e_1'\rangle\ \ |e_2'\rangle\ \ |e_3'\rangle\ \ |e_4'\rangle \,] = [\, |e_1\rangle\ \ |e_2\rangle\ \ |e_3\rangle\ \ |e_4\rangle \,]P \quad \Rightarrow \quad \begin{cases} |e_1'\rangle = |e_1\rangle + 2\,|e_2\rangle \\ |e_2'\rangle = |e_2\rangle \\ |e_3'\rangle = -4\,|e_2\rangle + |e_3\rangle \\ |e_4'\rangle = 5\,|e_1\rangle + |e_4\rangle \end{cases} \tag{2.5.20}$$

$$\hat{X}\,|e_3'\rangle = \hat{X}\,|e_4'\rangle = \mathbf{0} \qquad \operatorname{span}(\,|e_3'\rangle\,,\,|e_4'\rangle) = \ker \hat{X} \tag{2.5.21}$$

$$[\,|f_1'\rangle\ |f_2'\rangle\ |f_3'\rangle\,] = [\,|f_1\rangle\ |f_2\rangle\ |f_3\rangle\,]Q \quad \Rightarrow \quad \begin{cases} |f_1'\rangle = |f_1\rangle + 12\,|f_3\rangle \\ |f_2'\rangle = |f_2\rangle + 6\,|f_3\rangle \\ |f_3'\rangle = |f_3\rangle \end{cases} \tag{2.5.22}$$

$$|f_1'\rangle = \hat{X}\,|e_1'\rangle \quad |f_2'\rangle = \hat{X}\,|e_2'\rangle \qquad \mathrm{span}(\,|f_1'\rangle\,,\,|f_2'\rangle) = \mathrm{im}\,\hat{X} \tag{2.5.23}$$

$$\begin{aligned} X' = Q^{-1}XP &= \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ -12 & -6 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & -5 \\ -2 & 1 & 4 & 10 \\ 0 & 6 & 24 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 5 \\ 2 & 1 & -4 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \\ &= \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ -12 & -6 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 12 & 6 & 0 & 0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \end{aligned} \tag{2.5.24}$$

==========

2.6 同時ブロック対角化

2.6.1 同時ブロック対角化と既約不変部分空間

§2.4.3 では，2 つの対角化可能な線形変換が互いに可換ならばこれらは同時対角化可能であることを述べた。ここでは，必ずしも可換とは限らない複数の線形変換を同じ型のブロック対角行列として表現することについて述べる[63]。

線形空間 V の 2 つの線形変換 $\hat{X}$，$\hat{Y}$ を考える[64]。$\hat{X}$，$\hat{Y}$ に関する共通の不変部分空間の組 $W_{(1)}, \cdots, W_{(r)}$ によって $V = W_{(1)} \dot{+} \cdots \dot{+} W_{(r)}$ と直和分解できるならば，

$$X = \begin{bmatrix} X_{(1)} & & O \\ & \ddots & \\ O & & X_{(r)} \end{bmatrix} \qquad Y = \begin{bmatrix} Y_{(1)} & & O \\ & \ddots & \\ O & & Y_{(r)} \end{bmatrix} \tag{2.6.1}$$

と表せる[65]。つまり，$\hat{X}$，$\hat{Y}$ の行列表現は**同時ブロック対角化可能**である。それぞれの $W_{(k)}$ の次元をできる限り小さくとって，ブロック $X_{(k)}$，$Y_{(k)}$ の次数をこれ以上小さくできない場合，$W_{(k)}$ は $\hat{X}$，$\hat{Y}$ に関する既約な不変部分空間あるいは既約

[63] ブロック対角行列については §2.3.2 を参照してください。なお，ブロックの次数を考えている線形空間の次元に一致させれば線形変換の行列表現はすでに単一のブロックからなるブロック対角行列だといえなくはないですが，個々のブロックの次数をできる限り小さくとることが重要です。

[64] $\hat{X}$，$\hat{Y}$ は対角化可能でない線形変換でも構いません。その場合は広義固有空間による直和分解とそれに対応する射影の組を考えます。広義固有空間については参考文献を参照してください。

[65] 不変部分空間については §2.2.1 を参照してください。

不変部分空間であるといい，$X_{(k)}$，$Y_{(k)}$ を $W_{(k)}$ における $\hat{X}$，$\hat{Y}$ の既約な行列表現という[66]。言い換えると，

$$\begin{aligned}&\hat{X},\hat{Y}\text{ に関する不変部分空間 }W_{(k)}\text{に含まれる}\hat{X},\hat{Y}\text{ に関する不変部分空間が}\\&\{\mathbf{0}\}\text{ と }W_{(k)}\text{自身に限るとき }W_{(k)}\text{は}\hat{X},\hat{Y}\text{ に関する既約不変部分空間である}\end{aligned} \tag{2.6.2}$$

という[67]。$\hat{X}$，$\hat{Y}$ に関する不変部分空間 $W_{(k)}$ が既約でないとき，$W_{(k)}$ は可約であるという。直和分解 $V = W_{(1)}\dot{+}\cdots\dot{+}W_{(r)}$ に対応する射影の組を $\hat{P}_{(1)},\cdots,\hat{P}_{(r)}$ とし，$\hat{X}_{(k)} = \hat{P}_{(k)}\hat{X}$，$\hat{Y}_{(k)} = \hat{P}_{(k)}\hat{Y}$ とおく[68]。このとき，$\hat{X}$，$\hat{Y}$ に関する不変部分空間 $W_{(k)}$ が可約ならば，$W_{(k)}$ において $\hat{P}_{(k)}$ のスカラー倍以外に $\hat{X}_{(k)}$，$\hat{Y}_{(k)}$ と可換な線形変換が存在する[69]。あるいは，λ を複素数として，

$$\begin{aligned}&W_{(k)}\text{において}\hat{X}_{(k)},\hat{Y}_{(k)}\text{と可換な線形変換は}\lambda\hat{P}_{(k)}\text{に限る}\\&\Rightarrow W_{(k)}\text{は}\hat{X},\hat{Y}\text{ に関する既約不変部分空間である}\end{aligned} \tag{2.6.3}$$

が成り立つ[70]。より一般に，q 個の線形変換の組 $\mathscr{X} = \{\hat{X}_1,\cdots,\hat{X}_q\}$ に関する共通の不変部分空間の組 $W_{(1)},\cdots,W_{(r)}$ によって $V = W_{(1)}\dot{+}\cdots\dot{+}W_{(r)}$ と直和分解できるならば，

$$X_1 = \begin{bmatrix} X_{1(1)} & & O \\ & \ddots & \\ O & & X_{1(r)} \end{bmatrix} \quad \cdots \quad X_q = \begin{bmatrix} X_{q(1)} & & O \\ & \ddots & \\ O & & X_{q(r)} \end{bmatrix} \tag{2.6.4}$$

と表せる。それぞれの $W_{(k)}$ の次元をできる限り小さくとって，ブロックの次数をこれ以上小さくできない場合，$W_{(k)}$ は $\mathscr{X}$ に関する既約な不変部分空間あるいは既約不変部分空間であるといい，$X_{1(k)},\cdots,X_{q(k)}$ を $W_{(k)}$ における $\hat{X}_1,\cdots,\hat{X}_q$ の既約な行列表現という。言い換えると，

$$\begin{aligned}&\mathscr{X}\text{ に関する不変部分空間 }W_{(k)}\text{に含まれる }\mathscr{X}\text{ に関する不変部分空間が}\\&\{\mathbf{0}\}\text{ と }W_{(k)}\text{自身に限るとき }W_{(k)}\text{は }\mathscr{X}\text{ に関する既約不変部分空間である}\end{aligned} \tag{2.6.5}$$

---

[66]第 6 章で述べる群の表現を理解するためには，既約不変部分空間と既約な行列表現についてしっかり理解しておく必要があります。

[67]$W_{(k)}$ が $\hat{X}$，$\hat{Y}$ に関する既約不変部分空間であるとは，$\{\mathbf{0}\} \subsetneq \mathscr{W} \subsetneq W_{(k)}$ であるような $\hat{X}$，$\hat{Y}$ に関する不変部分空間 $\mathscr{W}$ がないということです。

[68]$\hat{P}_{(1)},\cdots,\hat{P}_{(r)}$ は $\hat{X}$，$\hat{Y}$ と可換です。つまり，$k = 1,\cdots,r$ のすべてに対し $\hat{P}_{(k)}\hat{X} = \hat{X}\hat{P}_{(k)}$，$\hat{P}_{(k)}\hat{Y} = \hat{Y}\hat{P}_{(k)}$ です。

[69]もし $\hat{P}_{(k)} = \hat{P}'_{(k)} + \hat{P}''_{(k)}$ と分解できるならば，$\lambda'\hat{P}'_{(k)} + \lambda''\hat{P}''_{(k)}$ は $\hat{X}_{(k)}$，$\hat{Y}_{(k)}$ の両方と可換ですが，これは $\lambda' \neq \lambda''$ のとき $\hat{P}_{(k)}$ のスカラー倍ではありません。

[70]正確には $\hat{X}_{(k)}$，$\hat{Y}_{(k)}$ は $\hat{X}$，$\hat{Y}$ の $W_{(k)}$ への制限とするべきですが，「$W_{(k)}$ における線形変換」という表現のほうが理解しやすいと思います。なお，$\hat{P}_{(k)}$ の $W_{(k)}$ への制限は $W_{(k)}$ の恒等変換 $\hat{I}_{(k)}$ のことです。

という[71]。$\mathscr{X}$ に関する不変部分空間 $W_{(k)}$ が既約でないとき，$W_{(k)}$ は可約であるという。直和分解 $V = W_{(1)} \dot{+} \cdots \dot{+} W_{(r)}$ に対応する射影の組を $\hat{P}_{(1)}, \cdots, \hat{P}_{(r)}$ とし，$\hat{X}_{1(k)} = \hat{P}_{(k)}\hat{X}_1, \cdots, \hat{X}_{q(k)} = \hat{P}_{(k)}\hat{X}_q$ とおく[72]。このとき，$\mathscr{X}$ に関する不変部分空間 $W_{(k)}$ が可約ならば，$W_{(k)}$ において $\hat{P}_{(k)}$ のスカラー倍以外に $\hat{X}_{1(k)}, \cdots, \hat{X}_{q(k)}$ すべての線形変換と可換な線形変換が存在する。あるいは，λ を複素数として，

$$\begin{aligned} &W_{(k)}\text{において}\hat{X}_{1(k)}, \cdots, \hat{X}_{q(k)}\text{すべてと可換な線形変換は}\lambda\hat{P}_{(k)}\text{に限る} \\ &\Rightarrow W_{(k)}\text{は}\mathscr{X} = \{\hat{X}_1, \cdots, \hat{X}_q\}\text{に関する既約不変部分空間である} \end{aligned} \tag{2.6.6}$$

が成り立つ。

2.6.2 シューアの補題

ここでは同時ブロック対角化に関する基本的な定理である**シューアの補題** (2.6.7), (2.6.8) について述べる。シューアの補題は第 6 章で述べる群の表現において重要な役割を果たす[73]。

(2.6.3) の逆，あるいは，より一般に (2.6.6) の逆

$$\begin{aligned} &W_{(k)}\text{は}\mathscr{X} = \{\hat{X}_1, \cdots, \hat{X}_q\}\text{に関する既約不変部分空間である} \\ &\Rightarrow W_{(k)}\text{において}\hat{X}_{1(k)}, \cdots, \hat{X}_{q(k)}\text{すべてと可換な線形変換は}\lambda\hat{P}_{(k)}\text{に限る} \end{aligned} \tag{2.6.7}$$

が成り立つ[74]。

[(2.6.7) の証明] $W_{(k)}$ を不変部分空間とする線形変換 $\hat{A}_{(k)}$ が $W_{(k)}$ において $\hat{X}_{1(k)}, \cdots, \hat{X}_{q(k)}$ すべてと可換であるとする。これらの線形変換を $W_{(k)}$ を全空間として考え，簡単のために $W_{(k)}$ を W，$\hat{A}_{(k)}$ を $\hat{A}$，$\hat{X}_{1(k)}, \cdots, \hat{X}_{q(k)}$ を $\hat{X}_1, \cdots, \hat{X}_q$ と表す。また，$\hat{P}_{(k)}$ は W においては恒等変換 $\hat{I}_W$ であることに注意せよ。$\hat{X}_p\hat{A} = \hat{A}\hat{X}_p$ より $\hat{X}_p(\ker \hat{A}) \subseteq \ker \hat{A}$ であるから，$\ker \hat{A}$ は $\hat{X}_1, \cdots, \hat{X}_q$ に関する不変部分空間である。W は $\hat{X}_1, \cdots, \hat{X}_q$ に関する既約不変部分空間であるから，$\ker \hat{A}$ は $\{\mathbf{0}\}$ である

[71] $W_{(k)}$ が $\mathscr{X}$ に関する既約不変部分空間であるとは，$\{\mathbf{0}\} \subsetneq \mathscr{W} \subsetneq W_{(k)}$ であるような $\mathscr{X}$ に関する不変部分空間 $\mathscr{W}$ がないということです。

[72] $\hat{P}_{(1)}, \cdots, \hat{P}_{(r)}$ はすべての $\hat{X}_p$ と可換です。つまり，任意の k，p について $\hat{P}_{(k)}\hat{X}_p = \hat{X}_p\hat{P}_{(k)}$ です。

[73] 通常は $\hat{X}_1, \cdots, \hat{X}_q$ が群をなす場合に (2.6.7)，(2.6.8) をシューアの補題とよぶことが多いようですが，本書では $\hat{X}_1, \cdots, \hat{X}_q$ は複数の線形変換の組であるという以外は特に限定せずに (2.6.7), (2.6.8) をシューアの補題とよぶことにします。参考文献 [24] の第 3 章 §3.1 でも同じように述べてあります。

[74] (2.6.7) は次に述べる (2.6.8) を用いて証明するほうが論理的にはすっきりするのですが，(2.6.8) を理解するには線形写像についてある程度理解していることが必要ですので，ここでは線形変換の知識のみで (2.6.7) を理解できるように説明することにします。

か W 自身であるかのいずれかである。$\ker \hat{A} = W$ ならば $\hat{A} = \hat{0}$ である。一方，$\ker \hat{A} = \{\mathbf{0}\}$ ならば，$\hat{A}$ は W において正則である。そこで，$\hat{A}$ の固有値の 1 つを λ として，$\hat{A} - \lambda \hat{I}_W$ について同様に考える。$\hat{A} - \lambda \hat{I}_W$ は $\hat{X}_1, \cdots, \hat{X}_q$ すべてと可換であるから，$\hat{A} - \lambda \hat{I}_W = \hat{0}$ であるか，または，$\hat{A} - \lambda \hat{I}_W$ は正則であるかのいずれかである。しかし，λ は $\hat{A}$ の固有値であるから，$\hat{A} - \lambda \hat{I}_W$ は正則ではない。したがって，$\hat{A} - \lambda \hat{I}_W = \hat{0}$，つまり，$\hat{A}_{(k)} = \lambda \hat{P}_{(k)}$ でなければならない。 ■

$W_{(k)}$, $W_{(l)}$ を $\mathscr{X} = \{\hat{X}_1, \cdots, \hat{X}_q\}$ に関する 2 つの既約不変部分空間であるとする。簡単のために, $W_{(k)}$ を W, $W_{(l)}$ を W', $\hat{X}_{1(k)}, \cdots, \hat{X}_{q(k)}$ を $\hat{X}_1, \cdots, \hat{X}_q$, $\hat{X}_{1(l)}, \cdots, \hat{X}_{q(l)}$ を $\hat{X}'_1, \cdots, \hat{X}'_q$ と表す。$\hat{M}$ を W から W' への線形写像とするとき,

$$\hat{M}\hat{X}_p = \hat{X}'_p\hat{M}\ (p = 1, \cdots, q) \Rightarrow \hat{M} = \hat{0} \text{ または} \hat{M} \text{ は可逆} \tag{2.6.8}$$

が成り立つ。

[(2.6.8) の証明] $\hat{M} \neq \hat{0}$ とする。$|a\rangle \in \ker \hat{M}$ に対して $\hat{X}'_p\hat{M}\,|a\rangle = \mathbf{0}$ より $\hat{M}\hat{X}_p\,|a\rangle = \mathbf{0}$ である。したがって, $\hat{X}_p\,|a\rangle \in \ker \hat{M}$ であるから, $\ker \hat{M}$ は $\hat{X}_1, \cdots, \hat{X}_q$ に関する不変部分空間である。一方，W は $\hat{X}_1, \cdots, \hat{X}_q$ に関する既約不変部分空間であるから，$\ker \hat{M}$ は $\{\mathbf{0}\}$ であるか W 自身であるかのいずれかである。しかし，$\hat{M} \neq \hat{0}$ のとき $\ker \hat{M} \neq W$ であるから，$\ker \hat{M} = \{\mathbf{0}\}$ のみが可能である。また，任意の $|a\rangle \in W$ に対して $\hat{X}'_p\hat{M}\,|a\rangle = \hat{M}\hat{X}_p\,|a\rangle$ より $\hat{X}'_p(\mathrm{im}\,\hat{M}) \subseteq \mathrm{im}\,\hat{M}$ であるから, $\mathrm{im}\,\hat{M}$ は $\hat{X}'_1, \cdots, \hat{X}'_q$ に関する不変部分空間である。一方, W' は $\hat{X}'_1, \cdots, \hat{X}'_q$ に関する既約不変部分空間であるから, $\mathrm{im}\,\hat{M}$ は $\{\mathbf{0}\}$ であるか W' 自身であるかのいずれかである。しかし, $\hat{M} \neq \hat{0}$ のとき $\mathrm{im}\,\hat{M} \neq \{\mathbf{0}\}$ であるから, $\mathrm{im}\,\hat{M} = W'$ のみが可能である。以上より，$\hat{M} \neq \hat{0}$ ならば $\ker \hat{M} = \{\mathbf{0}\}$，$\mathrm{im}\,\hat{M} = W'$ より，$\dim W = \dim W'$ であって，$\hat{M}$ は W から W' への全単射であることがわかる。このとき，$\hat{M}$ は可逆であり，逆写像 $\hat{M}^{-1}$ が存在する。また，W，W' の基底による $\hat{X}_p$，$\hat{X}'_p$，$\hat{M}$ の行列表現を X_p，X'_p，M とすると $X_p = M^{-1}X'_pM$ であり，X_p と X'_p は互いに相似である。 ■

第 3 章　内積空間

本章では，内積の与えられた線形空間である内積空間について述べ，内積によって定義されるエルミート共役について説明する。また，正規直交基底と正射影について述べる。これらの準備の下に，正規変換とよばれる特別な線形変換の固有値問題について述べる。

3.1　内積とエルミート共役

3.1.1　内積・ノルム・計量

線形空間 V の任意の 2 つのベクトル $|a\rangle$ と $|b\rangle$ に対して 1 つの複素数 $(\,|a\rangle\,,\,|b\rangle)$ を対応させる演算 $(\,\cdot\,,\,\cdot\,)$ が与えられており，この演算が

$$\begin{aligned}
&(1)\quad (\,|b\rangle\,,\,|a\rangle) = (\,|a\rangle\,,\,|b\rangle)^* \\
&(2)\quad (\,|a\rangle\,,\,|b\rangle + |b'\rangle) = (\,|a\rangle\,,\,|b\rangle) + (\,|a\rangle\,,\,|b'\rangle) \\
&(3)\quad (\,|a\rangle\,,\lambda\,|b\rangle) = \lambda(\,|a\rangle\,,\,|b\rangle) \\
&(4)\quad (\,|a\rangle\,,\,|a\rangle) \geq 0 \quad (\text{等号は}\,|a\rangle = \mathbf{0}\,\text{のときに限る})
\end{aligned} \tag{3.1.1}$$

の 4 つの性質を満たすとき，$(\,\cdot\,,\,\cdot\,)$ を V の**内積**という。線形空間が V であることを明示する場合は $(\,\cdot\,,\,\cdot\,)_V$ と表すことにする。$(\,|a\rangle\,,\,|b\rangle) = 0$ のとき $|a\rangle$ と $|b\rangle$ は**直交する**という。内積の与えられた線形空間を**内積空間**あるいは**計量線形空間**という。

内積を用いてベクトルの**ノルム**を

$$||\ |a\rangle\ || = \sqrt{(\,|a\rangle\,,\,|a\rangle)} \tag{3.1.2}$$

によって定義する[1]。ノルムについて

$$
\begin{aligned}
&(1)\quad |a\rangle \neq \mathbf{0} \Leftrightarrow \|\ |a\rangle\ \| > 0 \\
&(2)\quad \|\ \lambda\,|a\rangle\ \| = |\lambda|\ \|\ |a\rangle\ \| \\
&(3)\quad |(\,|a\rangle\,,\,|b\rangle)| \leq \|\ |a\rangle\ \|\ \|\ |b\rangle\ \| \qquad \text{(シュワルツの不等式)} \\
&(4)\quad \|\ |a\rangle + |b\rangle\ \| \leq \|\ |a\rangle\ \| + \|\ |b\rangle\ \| \qquad \text{(三角不等式)}
\end{aligned}
\tag{3.1.3}
$$

が成り立つ[2]。

V の基底 $e = \{\,|e_1\rangle\,,\cdots,\,|e_n\rangle\}$ に対して，**計量** G を n 次正方行列

$$
G = \begin{bmatrix} (\,|e_1\rangle\,,\,|e_1\rangle) & \cdots & (\,|e_1\rangle\,,\,|e_n\rangle) \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ (\,|e_n\rangle\,,\,|e_1\rangle) & \cdots & (\,|e_n\rangle\,,\,|e_n\rangle) \end{bmatrix} \tag{3.1.4}
$$

によって定義する[3]。G の (i,j) 成分は

$$
g_{ij} = (\,|e_i\rangle\,,\,|e_j\rangle) \tag{3.1.5}
$$

である。内積の性質 (3.1.1) の (1) より $g_{ij}^* = g_{ji}$ であるから，

$$
G^\dagger = G \tag{3.1.6}
$$

が成り立つ。つまり，G はエルミート行列である。G を用いると，$|a\rangle = |\,e\,]\boldsymbol{a}$ と $|b\rangle = |\,e\,]\boldsymbol{b}$ の内積は，$(\,|a\rangle\,,\,|b\rangle) = \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n a_i^* g_{ij} b_j$ より，

$$
(\,|a\rangle\,,\,|b\rangle) = \boldsymbol{a}^\dagger G \boldsymbol{b} \tag{3.1.7}
$$

と表せる。G の性質として，

$$
G \text{ は正則行列である} \tag{3.1.8}
$$

ことは基本的である。

[(3.1.8) の証明] 零ベクトルでない任意のベクトル $|a\rangle$ に対して $(\,|a\rangle\,,\,|a\rangle) > 0$ であるから，$|a\rangle = |\,e\,]\boldsymbol{a}$ $(\boldsymbol{a} \neq \mathbf{0})$ とすると，

$$
(\,|a\rangle\,,\,|a\rangle) = \boldsymbol{a}^\dagger G \boldsymbol{a} > 0 \tag{3.1.9}
$$

[1] ノルムはベクトルの長さを一般化したものです。

[2] シュワルツの不等式と三角不等式は §3.2.4 で証明します。

[3] n 個のベクトル $|a_1\rangle\,,\cdots,\,|a_n\rangle$ に対して (i,j) 成分が $(\,|a_i\rangle\,,\,|a_j\rangle)$ で与えられる n 次正方行列を**グラム行列**といいます。

である。よって，零ベクトルでない $\boldsymbol{a}$ に対して $G\boldsymbol{a} \neq \boldsymbol{0}$ である。したがって，G を n 次元列ベクトル空間の線形変換としてみたとき $\ker G = \{\boldsymbol{0}\}$，つまり，$\operatorname{rank} G = n$ であるから，G は正則行列である。 ■

基底 $e = \{\,|e_1\rangle\,, \cdots\,, |e_n\rangle\}$ から基底 $e' = \{\,|e'_1\rangle\,, \cdots\,, |e'_n\rangle\}$ への基底変換 $|\,e'\,] = |\,e\,]P$ に伴う列ベクトル表現の変換則 (2.3.57) より，$\boldsymbol{a} = P\boldsymbol{a}'$ である。したがって，(3.1.7) を $(\,|a\rangle\,, |b\rangle) = \boldsymbol{a}'^{\dagger} G' \boldsymbol{b}'$ と比べると，$\boldsymbol{a}^{\dagger} = \boldsymbol{a}'^{\dagger} P^{\dagger}$ より，この基底変換に伴う計量の変換則

$$G' = P^{\dagger} G P \tag{3.1.10}$$

を得る[4]。

3.1.2 ベクトルと線形形式のエルミート共役

ベクトル $|a\rangle = |\,e\,]\boldsymbol{a}$ の**エルミート共役** $|a\rangle^{\dagger}$ を $\langle a|$ と表し，

$$\langle a| = \boldsymbol{a}^{\dagger} G [\,\varepsilon\,| \tag{3.1.11}$$

によって定義する[5]。(3.1.11) は双対基底 ε による行ベクトル表現が $\boldsymbol{a}^{\dagger} G$ となるような線形形式を $\langle a|$ とおくことを意味する。このとき，$\langle a|b\rangle = \boldsymbol{a}^{\dagger} G [\,\varepsilon\,|b\rangle = \boldsymbol{a}^{\dagger} G \boldsymbol{b}$ であるから，

$$(\,|a\rangle\,, |b\rangle) = \langle a|b\rangle \tag{3.1.12}$$

が成り立つ。つまり，任意の $|b\rangle$ に対し $\langle a|$ と $|b\rangle$ のペアリング $\langle a|b\rangle$ が $|a\rangle$ と $|b\rangle$ の内積 $(\,|a\rangle\,, |b\rangle)$ と一致するような線形形式を $\langle a|$ と定義するのである[6]。(3.1.11) により，

$$\langle e_i| = \boldsymbol{e}_i^{\dagger} G [\,\varepsilon\,| \tag{3.1.13}$$

である。$\boldsymbol{e}_i^{\dagger} = \boldsymbol{\varepsilon}_i$ であるから，(3.1.13) の両辺に左から $\boldsymbol{e}_i$ を掛けて i について和をとると，標準基底に関する完全性関係 (1.3.21) より，

$$[\,e\,| = G [\,\varepsilon\,| \tag{3.1.14}$$

[4] (3.1.10) はこの後で示す (3.1.24) から導くほうが直接的でわかりやすいと思います。

[5] $|a\rangle$ を $\mathbb{C}$ から V への線形写像とみて，$(\,|a\rangle\, z, |b\rangle)_V = (z, |a\rangle^{\dagger}\, |b\rangle)_{\mathbb{C}}$ によって $|a\rangle^{\dagger}$ を定義するのが統一的かもしれませんが，本書ではわかりやすさを優先して (3.1.11) によって定義することにします。

[6] (3.1.12) からわかるように，$\langle a|$ の定義は基底に依存しません。

を得る。ここで,

$$[\,e\,| = \begin{bmatrix} \langle e_1| \\ \vdots \\ \langle e_n| \end{bmatrix} \tag{3.1.15}$$

である。線形形式 $\langle\alpha| = \boldsymbol{\alpha}[\,\varepsilon\,|$ の**エルミート共役** $\langle\alpha|^\dagger$ を $|\alpha\rangle$ と表し,

$$|\alpha\rangle = |\,e\,]G^{-1}\boldsymbol{\alpha}^\dagger \tag{3.1.16}$$

によって定義する[7]。(3.1.16) は基底 e による列ベクトル表現が $G^{-1}\boldsymbol{\alpha}^\dagger$ となるようなベクトルを $|\alpha\rangle$ とおくことを意味する。このとき, (3.1.11) より, $\langle a|\alpha\rangle = \boldsymbol{a}^\dagger\boldsymbol{\alpha}^\dagger = (\boldsymbol{\alpha}\boldsymbol{a})^* = \langle\alpha|a\rangle^*$ であるから,

$$\langle\alpha|a\rangle = (\,|\alpha\rangle\,,\,|a\rangle) \tag{3.1.17}$$

が成り立つ。つまり, 任意の $|a\rangle$ に対し $|\alpha\rangle$ と $|a\rangle$ の内積 $(\,|\alpha\rangle\,,\,|a\rangle)$ が $\langle\alpha|$ と $|a\rangle$ のペアリング $\langle\alpha|a\rangle$ と一致するようなベクトルを $|\alpha\rangle$ と定義するのである[8]。(3.1.16) により,

$$|\varepsilon_i\rangle = |\,e\,]G^{-1}\boldsymbol{\varepsilon}_i^\dagger \tag{3.1.18}$$

である。$\boldsymbol{\varepsilon}_i^\dagger = \boldsymbol{e}_i$ であるから, (3.1.18) の両辺に右から $\boldsymbol{\varepsilon}_i$ を掛けて i について和をとると, 標準基底に関する完全性関係 (1.3.21) より,

$$|\,\varepsilon\,] = |\,e\,]G^{-1} \tag{3.1.19}$$

を得る。ここで,

$$|\,\varepsilon\,] = [\,|\varepsilon_1\rangle\,\cdots\,|\varepsilon_n\rangle\,] \tag{3.1.20}$$

である。$[\,e\,|$, $|\,\varepsilon\,]$ を用いると, (3.1.11), (3.1.16) は

$$\langle a| = \boldsymbol{a}^\dagger[\,e\,| \qquad\qquad |\alpha\rangle = |\,\varepsilon\,]\boldsymbol{\alpha}^\dagger \tag{3.1.21}$$

と表せる。(1.1.42) に対応する行列記法を用いると,

$$|\,e\,]^\dagger = [\,e\,| \qquad\qquad [\,\varepsilon\,|^\dagger = |\,\varepsilon\,] \tag{3.1.22}$$

[7] $\langle\alpha|$ を V から $\mathbb{C}$ への線形写像とみて, $(\,\langle\alpha|a\rangle\,,z)_{\mathbb{C}} = (\,|a\rangle\,,\langle\alpha|^\dagger\,z)_V$ によって $\langle\alpha|^\dagger$ を定義するのが統一的かもしれませんが, 本書ではわかりやすさを優先して (3.1.16) によって定義することにします。

[8] (3.1.17) からわかるように, $|\alpha\rangle$ の定義は基底に依存しません。

と書ける。$|a\rangle = |\,e\,]\boldsymbol{a}$，$\langle\alpha| = \boldsymbol{\alpha}[\,\varepsilon\,|$ であるから，(3.1.22) を用いると (3.1.21) が容易に得られ，計算の際に有用である。

G^{-1} を基底変換の行列とみると，(3.1.19) は基底 e からもう一つの基底 $\varepsilon^\dagger = \{\,|\varepsilon_1\rangle\,,\cdots,\,|\varepsilon_n\rangle\}$ への基底変換を与える。基底 $\varepsilon^\dagger$ を基底 e の**相反基底**という[9]。これら 2 組の基底 e と $\varepsilon^\dagger$ の間の内積について，

$$(\,|e_i\rangle\,,\,|\varepsilon_j\rangle) = \delta_{ij} \tag{3.1.23}$$

が成り立つ。

[(3.1.23) の証明] (3.1.23) の左辺を計算すると $\sum_{k=1}^{n}(\,|e_i\rangle\,,\,|e_k\rangle\,g_{kj}^{-1}) = \sum_{k=1}^{n}(\,|e_i\rangle\,,\,|e_k\rangle)g_{kj}^{-1}$ $= \sum_{k=1}^{n} g_{ik}g_{kj}^{-1} = (GG^{-1})_{ij} = \delta_{ij}$ を得る。 ■

基底変換の性質 (2.3.45) により，基底 $\varepsilon^\dagger$ の双対基底は $(G^{-1})^{-1}[\,\varepsilon\,| = G[\,\varepsilon\,| = [\,e\,|$ である。この双対基底を $e^\dagger = \{\,\langle e_1|\,,\cdots,\,\langle e_n|\}$ と表す。$I = [\,\varepsilon\,|\,e\,]$，$\hat{I} = |\,e\,][\,\varepsilon\,|$，および，基底変換の行列の性質 (2.3.43)，(2.3.44)，あるいは，(3.1.14)，(3.1.19) より，

$$G = [\,e\,|\,e\,] \qquad\qquad G^{-1} = [\,\varepsilon\,|\,\varepsilon\,] \tag{3.1.24}$$

および

$$I = [\,e\,|\,\varepsilon\,] \qquad\qquad \hat{I} = |\,\varepsilon\,][\,e\,| \tag{3.1.25}$$

が成り立つ。

3.1.3 線形変換のエルミート共役

内積空間 V の線形変換 $\hat{X}$ の**エルミート共役** $\hat{X}^\dagger$ を

$$(\hat{X}\,|a\rangle\,,\,|b\rangle) = (\,|a\rangle\,,\hat{X}^\dagger\,|b\rangle) \tag{3.1.26}$$

によって定義する[10]。ここで，$|a\rangle$，$|b\rangle$ は V の任意のベクトルである。(3.1.26) は

$$\langle b|\hat{X}|a\rangle^* = \langle a|\hat{X}^\dagger|b\rangle \tag{3.1.27}$$

と表すこともできる。$\hat{X} = |\,e\,]X[\,\varepsilon\,|$ より，

$$\hat{X}^\dagger = |\,\varepsilon\,]X^\dagger[\,e\,| = |\,e\,]G^{-1}X^\dagger G[\,\varepsilon\,| \tag{3.1.28}$$

[9] 相対性理論などでは基底を $\{\boldsymbol{e}_1,\cdots,\boldsymbol{e}_n\}$ とするとき相反基底を $\{\boldsymbol{e}^1,\cdots,\boldsymbol{e}^n\}$ と表して用います。

[10] 線形変換のエルミート共役は**随伴**とよばれることもあります。

である。したがって，基底 e による $\hat{X}^\dagger$ の行列表現は

$$[\,\varepsilon\,|\hat{X}^\dagger|\,e\,] = G^{-1}X^\dagger G \tag{3.1.29}$$

である[11]。線形変換の和とスカラー倍について

$$(\hat{X}+\hat{Y})^\dagger = \hat{X}^\dagger + \hat{Y}^\dagger \qquad (\lambda\hat{X})^\dagger = \lambda^*\hat{X}^\dagger \tag{3.1.30}$$

である。線形変換の積のエルミート共役はそれぞれのエルミート共役の逆順の積となる。例えば，(3.1.26) より $(\hat{X}\hat{Y}\hat{Z}\,|a\rangle\,,\,|b\rangle) = (\,|a\rangle\,,(\hat{X}\hat{Y}\hat{Z})^\dagger\,|b\rangle)$ であるが，一方，$(\hat{X}\hat{Y}\hat{Z}\,|a\rangle\,,\,|b\rangle) = (\hat{Y}\hat{Z}\,|a\rangle\,,\hat{X}^\dagger\,|b\rangle) = (\hat{Z}\,|a\rangle\,,\hat{Y}^\dagger\hat{X}^\dagger\,|b\rangle) = (\,|a\rangle\,,\hat{Z}^\dagger\hat{Y}^\dagger\hat{X}^\dagger\,|b\rangle)$ であるから，$\hat{X}\hat{Y}\hat{Z}$ のエルミート共役は

$$(\hat{X}\hat{Y}\hat{Z})^\dagger = \hat{Z}^\dagger\hat{Y}^\dagger\hat{X}^\dagger \tag{3.1.31}$$

である。また，任意の $|b\rangle$，$|b'\rangle$ に対して $(\,\langle b'|a\rangle\langle\alpha|b\rangle)^* = \langle b|\alpha\rangle\langle a|b'\rangle$ であるから，ダイアド $|a\rangle\langle\alpha|$ のエルミート共役は (3.1.27) より

$$(\,|a\rangle\langle\alpha|)^\dagger = |\alpha\rangle\langle a| \tag{3.1.32}$$

である。

3.1.4 正規変換

線形変換 $\hat{X}$ が $\hat{X}\hat{X}^\dagger = \hat{X}^\dagger\hat{X}$，つまり，

$$[\,\hat{X},\hat{X}^\dagger\,] = \hat{0} \tag{3.1.33}$$

を満たすとき，$\hat{X}$ を**正規変換**という。このとき，任意のベクトル $|a\rangle$ に対して $\langle a|\hat{X}^\dagger\hat{X}|a\rangle = \langle a|\hat{X}\hat{X}^\dagger|a\rangle$ であるから，$(\hat{X}\,|a\rangle\,,\hat{X}\,|a\rangle) = (\hat{X}^\dagger\,|a\rangle\,,\hat{X}^\dagger\,|a\rangle)$，つまり，

$$||\hat{X}\,|a\rangle\,|| = ||\hat{X}^\dagger\,|a\rangle\,|| \tag{3.1.34}$$

が成り立つ。$\hat{X}$ が

$$\hat{X}^\dagger = \hat{X} \tag{3.1.35}$$

[11] $X^\dagger$ は相反基底 $\varepsilon^\dagger$ による $\hat{X}$ の行列表現であり，基底 e によるものとは必ずしも一致しないので注意が必要です。

を満たすとき，$\hat{X}$ を**エルミート変換**という。(3.1.27) より，エルミート変換 $\hat{X}$ に対し，$|a\rangle$ を任意のベクトルとすると，$\langle a|\hat{X}|a\rangle$ は実数となる。$\hat{X}$ が

$$\hat{X}^\dagger = -\hat{X} \tag{3.1.36}$$

を満たすとき，$\hat{X}$ を**歪エルミート変換**という。(3.1.27) より，歪エルミート変換 $\hat{X}$ に対し，$|a\rangle$ を任意のベクトルとすると，$\langle a|\hat{X}|a\rangle$ は純虚数となる。$\hat{X}$ が

$$\hat{X}^\dagger = \hat{X}^{-1} \tag{3.1.37}$$

を満たすとき，$\hat{X}$ を**ユニタリ変換**という。エルミート変換，歪エルミート変換，ユニタリ変換は正規変換である。

==========

補足・計算例 28.

内積空間

区間 $[a,b]$ における高々 2 次の多項式 $f(x) = f_0 + f_1 x + f_2 x^2$ 全体のなす線形空間を V とする。

例 1：区間を $[-1,1]$ ととり，V の内積を

$$(f,g) = \int_{-1}^{1} dx\, f(x)^* g(x) \tag{3.1.38}$$

によって定義する。(3.1.38) は内積の定義 (3.1.1) を満たす。V の基底を $e = \{1, x, x^2\}$ とすると，$(1,1) = 2$，$(1,x) = 0$，$(1,x^2) = 2/3$，$(x,x) = 2/3$，$(x,x^2) = 0$，$(x^2,x^2) = 2/5$ より，計量 G とその逆行列 G^{-1} は

$$G = \begin{bmatrix} 2 & 0 & 2/3 \\ 0 & 2/3 & 0 \\ 2/3 & 0 & 2/5 \end{bmatrix} \qquad G^{-1} = \begin{bmatrix} 9/8 & 0 & -15/8 \\ 0 & 3/2 & 0 \\ -15/8 & 0 & 45/8 \end{bmatrix} \tag{3.1.39}$$

となる。これを用いると，$f(x) = f_0 + f_1 x + f_2 x^2$ と $g(x) = g_0 + g_1 x + g_2 x^2$ の内積は

$$(f,g) = [\, f_0^* \; f_1^* \; f_2^* \,] \begin{bmatrix} 2 & 0 & 2/3 \\ 0 & 2/3 & 0 \\ 2/3 & 0 & 2/5 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} g_0 \\ g_1 \\ g_2 \end{bmatrix} \tag{3.1.40}$$

と表せる。また，基底 e の相反基底 $\varepsilon^\dagger$ は，

$$|\,\varepsilon\,] = |\,e\,]G^{-1} = [\;1 \;\; x \;\; x^2\;] \begin{bmatrix} 9/8 & 0 & -15/8 \\ 0 & 3/2 & 0 \\ -15/8 & 0 & 45/8 \end{bmatrix} \tag{3.1.41}$$

より，$\varepsilon^\dagger = \{9/8 - 15x^2/8, 3x/2, -15/8 + 45x^2/8\}$ となる。容易にわかるように，2 組の基底 e と $\varepsilon^\dagger$ の間の内積について (3.1.23) が成り立つ。(3.1.29) より，微分演算子 D_x，並進演算子 $\mathscr{T}_c$，反転演算子 $\mathscr{P}$ のエルミート共役 $D_x^\dagger$，$\mathscr{T}_c^\dagger$，$\mathscr{P}^\dagger$ を基底 e によって表現すると以下のようになる。

・微分演算子 ($[\,D_x, D_x^\dagger\,] \neq 0$，$D_x$ は正規変換でない)

$$D_x \overset{e}{\mapsto} \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 2 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \qquad D_x^\dagger \overset{e}{\mapsto} G^{-1} \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 2 & 0 \end{bmatrix} G = \begin{bmatrix} 0 & -5/2 & 0 \\ 3 & 0 & 1 \\ 0 & 15 & 0 \end{bmatrix} \tag{3.1.42}$$

・並進演算子 ($[\,\mathscr{T}_c, \mathscr{T}_c^\dagger\,] \neq 0$，$\mathscr{T}_c$ は正規変換でない)

$$\mathscr{T}_c \overset{e}{\mapsto} \begin{bmatrix} 1 & -c & c^2 \\ 0 & 1 & -2c \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \qquad \mathscr{T}_c^\dagger \overset{e}{\mapsto} G^{-1} \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ -c & 1 & 0 \\ c^2 & -2c & 1 \end{bmatrix} G = \begin{bmatrix} 1-15c^2/4 & 5c/2 & -5c^2/4 \\ -3c & 1 & -c \\ 45c^2/4 & -15c/2 & 1+15c^2/4 \end{bmatrix} \tag{3.1.43}$$

・反転演算子 ($[\,\mathscr{P}, \mathscr{P}^\dagger\,] = 0$，$\mathscr{P} = \mathscr{P}^\dagger$，$\mathscr{P}$ はエルミート変換)

$$\mathscr{P} \overset{e}{\mapsto} \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \qquad \mathscr{P}^\dagger \overset{e}{\mapsto} G^{-1} \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} G = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \tag{3.1.44}$$

例 2：区間を $(-\infty, \infty)$ ととり，V の内積を

$$(f, g) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} dx\, e^{-x^2} f(x)^* g(x) \tag{3.1.45}$$

によって定義する。(3.1.45) は内積の定義 (3.1.1) を満たす。V の基底を $e = \{1, x, x^2\}$ とすると，$(1,1) = 1$，$(1,x) = 0$，$(1,x^2) = 1/2$，$(x,x) = 1/2$，$(x,x^2) = 0$，$(x^2,x^2) = 3/4$ より，計量 G とその逆行列 G^{-1} は

$$G = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 1/2 \\ 0 & 1/2 & 0 \\ 1/2 & 0 & 3/4 \end{bmatrix} \qquad G^{-1} = \begin{bmatrix} 3/2 & 0 & -1 \\ 0 & 2 & 0 \\ -1 & 0 & 2 \end{bmatrix} \tag{3.1.46}$$

となる。これを用いると，$f(x) = f_0 + f_1 x + f_2 x^2$ と $g(x) = g_0 + g_1 x + g_2 x^2$ の内積は

$$(f, g) = [\, f_0^* \; f_1^* \; f_2^* \,] \begin{bmatrix} 1 & 0 & 1/2 \\ 0 & 1/2 & 0 \\ 1/2 & 0 & 3/4 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} g_0 \\ g_1 \\ g_2 \end{bmatrix} \tag{3.1.47}$$

と表せる。また，基底 e の相反基底 $\varepsilon^\dagger$ は，

$$|\,\varepsilon\,] = |\,e\,]G^{-1} = [\;1 \;\; x \;\; x^2\;] \begin{bmatrix} 3/2 & 0 & -1 \\ 0 & 2 & 0 \\ -1 & 0 & 2 \end{bmatrix} \tag{3.1.48}$$

より，$\varepsilon^\dagger = \{3/2 - x^2, 2x, -1 + 2x^2\}$ となる。容易にわかるように，2 組の基底 e と $\varepsilon^\dagger$ の間の内積について (3.1.23) が成り立つ。(3.1.29) より，微分演算子 D_x，並進演算子 $\mathscr{T}_c$，反転演算子 $\mathscr{P}$ のエルミート共役 $D_x^\dagger$，$\mathscr{T}_c^\dagger$，$\mathscr{P}^\dagger$ を基底 e によって表現すると以下のようになる。

・微分演算子 ($[\,D_x, D_x^\dagger\,] \neq 0$，$D_x$ は正規変換でない)

$$D_x \overset{e}{\mapsto} \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 2 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \qquad D_x^\dagger \overset{e}{\mapsto} G^{-1} \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 2 & 0 \end{bmatrix} G = \begin{bmatrix} 0 & -1 & 0 \\ 2 & 0 & 1 \\ 0 & 2 & 0 \end{bmatrix} \tag{3.1.49}$$

・並進演算子 ($[\mathscr{T}_c, \mathscr{T}_c^\dagger] \neq 0$，$\mathscr{T}_c$ は正規変換でない)

$$\mathscr{T}_c \overset{e}{\mapsto} \begin{bmatrix} 1 & -c & c^2 \\ 0 & 1 & -2c \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \qquad \mathscr{T}_c^\dagger \overset{e}{\mapsto} G^{-1} \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ -c & 1 & 0 \\ c^2 & -2c & 1 \end{bmatrix} G = \begin{bmatrix} 1-c^2 & c & -c^2/2 \\ -2c & 1 & -c \\ 2c^2 & -2c & 1+c^2 \end{bmatrix} \tag{3.1.50}$$

・反転演算子 ($[\mathscr{P}, \mathscr{P}^\dagger] = 0$，$\mathscr{P} = \mathscr{P}^\dagger$，$\mathscr{P}$ はエルミート変換)

$$\mathscr{P} \overset{e}{\mapsto} \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \qquad \mathscr{P}^\dagger \overset{e}{\mapsto} G^{-1} \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} G = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \tag{3.1.51}$$

軌道角運動量演算子

球面上の関数 $f(\theta, \phi)$ 全体のなす線形空間を V とする。V の内積を

$$(f, g) = \int_0^\pi \sin\theta d\theta \int_0^{2\pi} d\phi\, f(\theta, \phi)^* g(\theta, \phi) \tag{3.1.52}$$

によって定義する。(3.1.52) は内積の定義 (3.1.1) を満たす。補足・計算例 18 の例 8 で与えた軌道角運動量演算子

$$\ell_x = -i\left(-\frac{\cos\phi}{\tan\theta}\frac{\partial}{\partial\phi} - \sin\phi\frac{\partial}{\partial\theta}\right) \qquad \ell_y = -i\left(-\frac{\sin\phi}{\tan\theta}\frac{\partial}{\partial\phi} + \cos\phi\frac{\partial}{\partial\theta}\right) \qquad \ell_z = -i\frac{\partial}{\partial\phi} \tag{3.1.53}$$

は内積 (3.1.52) に関して V のエルミート演算子となる。

$$\begin{aligned}
(f, \ell_x g) &= \int_0^\pi \sin\theta d\theta \int_0^{2\pi} d\phi\, f(\theta, \phi)^* \ell_x g(\theta, \phi) \\
&= \int_0^\pi \sin\theta d\theta \int_0^{2\pi} d\phi\, f(\theta, \phi)^* \left[-i\left(-\frac{\cos\phi}{\tan\theta}\frac{\partial}{\partial\phi} - \sin\phi\frac{\partial}{\partial\theta}\right)\right] g(\theta, \phi) \\
&= -i\int_0^\pi d\theta \int_0^{2\pi} d\phi\, f(\theta, \phi)^* \left(-\cos\theta\cos\phi\frac{\partial}{\partial\phi} - \sin\theta\sin\phi\frac{\partial}{\partial\theta}\right) g(\theta, \phi) \\
&= -i\int_0^\pi d\theta \int_0^{2\pi} d\phi\, g(\theta, \phi) \left[\frac{\partial}{\partial\phi}(\cos\theta\cos\phi f(\theta, \phi)^*) + \frac{\partial}{\partial\theta}(\sin\theta\sin\phi f(\theta, \phi)^*)\right] \\
&= -i\int_0^\pi d\theta \int_0^{2\pi} d\phi\, g(\theta, \phi) \left[\cos\theta\cos\phi\frac{\partial}{\partial\phi} f(\theta, \phi)^* + \sin\theta\sin\phi\frac{\partial}{\partial\theta} f(\theta, \phi)^*\right] \\
&= \left\{\int_0^\pi \sin\theta d\theta \int_0^{2\pi} d\phi\, g(\theta, \phi)^* \left[-i\left(-\frac{\cos\phi}{\tan\theta}\frac{\partial}{\partial\phi} - \sin\phi\frac{\partial}{\partial\theta}\right)\right] f(\theta, \phi)\right\}^* \\
&= \left\{\int_0^\pi \sin\theta d\theta \int_0^{2\pi} d\phi\, g(\theta, \phi)^* \ell_x f(\theta, \phi)\right\}^* = (g, \ell_x f)^* = (\ell_x f, g)
\end{aligned} \tag{3.1.54}$$

$$
\begin{aligned}
(f,\ell_y g) &= \int_0^\pi \sin\theta d\theta \int_0^{2\pi} d\phi\, f(\theta,\phi)^* \ell_y g(\theta,\phi) \\
&= \int_0^\pi \sin\theta d\theta \int_0^{2\pi} d\phi\, f(\theta,\phi)^* \left[-i\left(-\frac{\sin\phi}{\tan\theta}\frac{\partial}{\partial\phi} + \cos\phi\frac{\partial}{\partial\theta} \right) \right] g(\theta,\phi) \\
&= -i\int_0^\pi d\theta \int_0^{2\pi} d\phi\, f(\theta,\phi)^* \left(-\cos\theta\sin\phi\frac{\partial}{\partial\phi} + \sin\theta\cos\phi\frac{\partial}{\partial\theta} \right) g(\theta,\phi) \\
&= -i\int_0^\pi d\theta \int_0^{2\pi} d\phi\, g(\theta,\phi) \left[\frac{\partial}{\partial\phi}(\cos\theta\sin\phi f(\theta,\phi)^*) - \frac{\partial}{\partial\theta}(\sin\theta\cos\phi f(\theta,\phi)^*) \right] \qquad (3.1.55) \\
&= -i\int_0^\pi d\theta \int_0^{2\pi} d\phi\, g(\theta,\phi) \left[\cos\theta\sin\phi\frac{\partial}{\partial\phi} f(\theta,\phi)^* - \sin\theta\cos\phi\frac{\partial}{\partial\theta} f(\theta,\phi)^* \right] \\
&= \left\{ \int_0^\pi \sin\theta d\theta \int_0^{2\pi} d\phi\, g(\theta,\phi)^* \left[-i\left(-\frac{\sin\phi}{\tan\theta}\frac{\partial}{\partial\phi} + \cos\phi\frac{\partial}{\partial\theta} \right) \right] f(\theta,\phi) \right\}^* \\
&= \left\{ \int_0^\pi \sin\theta d\theta \int_0^{2\pi} d\phi\, g(\theta,\phi)^* \ell_y f(\theta,\phi) \right\}^* = (g,\ell_y f)^* = (\ell_y f, g)
\end{aligned}
$$

$$
\begin{aligned}
(f,\ell_z g) &= \int_0^\pi \sin\theta d\theta \int_0^{2\pi} d\phi\, f(\theta,\phi)^* \ell_z g(\theta,\phi) = \int_0^\pi \sin\theta d\theta \int_0^{2\pi} d\phi\, f(\theta,\phi)^* \left(-i\frac{\partial}{\partial\phi} \right) g(\theta,\phi) \\
&= -i\int_0^\pi \sin\theta d\theta \int_0^{2\pi} d\phi\, f(\theta,\phi)^* \frac{\partial}{\partial\phi} g(\theta,\phi) = i\int_0^\pi \sin\theta d\theta \int_0^{2\pi} d\phi\, g(\theta,\phi) \frac{\partial}{\partial\phi} f(\theta,\phi)^* \\
&= \left\{ \int_0^\pi \sin\theta d\theta \int_0^{2\pi} d\phi\, g(\theta,\phi)^* \left(-i\frac{\partial}{\partial\phi} \right) f(\theta,\phi) \right\}^* \\
&= \left\{ \int_0^\pi \sin\theta d\theta \int_0^{2\pi} d\phi\, g(\theta,\phi)^* \ell_z f(\theta,\phi) \right\}^* = (g,\ell_z f)^* = (\ell_z f, g)
\end{aligned}
\qquad (3.1.56)
$$

==========

3.1.5 線形写像のエルミート共役

V を n 次元内積空間とし, その内積, 基底, 双対基底を $(\,\cdot\,,\,\cdot\,)_V$, $e = \{\,|e_1\rangle\,,\cdots,\,|e_n\rangle\}$, $\varepsilon = \{\,\langle\varepsilon_1|\,,\cdots,\,\langle\varepsilon_n|\}$ とする。また，W を m 次元内積空間とし，その内積，基底，双対基底を $(\,\cdot\,,\,\cdot\,)_W$，$f = \{\,|f_1\rangle\,,\cdots,\,|f_m\rangle\}$，$\varphi = \{\,\langle\varphi_1|\,,\cdots,\,\langle\varphi_m|\}$ とする。V，W の計量は

$$
G_V = [\,e\,|\,e\,] \qquad G_V^{-1} = [\,\varepsilon\,|\,\varepsilon\,] \qquad G_W = [\,f\,|\,f\,] \qquad G_W^{-1} = [\,\varphi\,|\,\varphi\,] \quad (3.1.57)
$$

と表せる。ここで,

$$
[\,e\,| = G_V[\,\varepsilon\,| \qquad |\,\varepsilon\,] = |\,e\,]G_V^{-1} \qquad [\,f\,| = G_W[\,\varphi\,| \qquad |\,\varphi\,] = |\,f\,]G_W^{-1} \qquad (3.1.58)
$$

である。

V から W への線形写像 $\hat{X}$ に対して，その**エルミート共役** $\hat{X}^\dagger$ を

$$(\hat{X}\,|a\rangle\,,\,|b\rangle)_W = (\,|a\rangle\,,\hat{X}^\dagger\,|b\rangle)_V \tag{3.1.59}$$

によって定義する[12]。ここで，$|a\rangle$ は V の任意のベクトル，$|b\rangle$ は W の任意のベクトルである。$\hat{X}^\dagger$ は W から V への線形写像であることに注意されたい。(3.1.59) は

$$\langle b|\hat{X}|a\rangle^* = \langle a|\hat{X}^\dagger|b\rangle \tag{3.1.60}$$

と表すこともできる。$\hat{X} = |\,f\,]X[\,\varepsilon\,|$ より，

$$\hat{X}^\dagger = |\,\varepsilon\,]X^\dagger[\,f\,| = |\,e\,]G_V^{-1}X^\dagger G_W[\,\varphi\,| \tag{3.1.61}$$

である。したがって，基底 e，f による $\hat{X}^\dagger$ の行列表現は

$$[\,\varepsilon\,|\hat{X}^\dagger|\,f\,] = G_V^{-1}X^\dagger G_W \tag{3.1.62}$$

である[13]。(3.1.59) より，線形写像の積のエルミート共役はそれぞれのエルミート共役の逆順の積となる。

3.2 正規直交基底・正射影・直交直和

3.2.1 正規直交基底

内積空間 V の基底 $e = \{\,|e_1\rangle\,,\cdots\,,\,|e_n\rangle\}$ について

$$\langle e_i|e_j\rangle = \delta_{ij} \tag{3.2.1}$$

が成り立つとき，基底 e は**正規直交基底**であるという。このとき，計量 G は単位行列となる。つまり，

$$G = I \tag{3.2.2}$$

である。したがって，$|a\rangle = |\,e\,]\boldsymbol{a}$ と $|b\rangle = |\,e\,]\boldsymbol{b}$ の内積は

$$\langle a|b\rangle = a_1^*b_1 + \cdots + a_n^*b_n = \boldsymbol{a}^\dagger\boldsymbol{b} \tag{3.2.3}$$

[12]線形変換の場合と同じく，線形写像のエルミート共役も**随伴**とよばれます。

[13]$X^\dagger$ は相反基底 $\varepsilon^\dagger$，$\varphi^\dagger$ による $\hat{X}$ の行列表現であり，基底 e，f によるものとは必ずしも一致しないので注意が必要です。

と書ける。(3.2.3) を**標準内積**という[14]。また，

$$[\,e\,| = [\,\varepsilon\,| \qquad\qquad |\,\varepsilon\,] = |\,e\,] \tag{3.2.4}$$

であり，基底 e とその相反基底 $\varepsilon^\dagger$ は一致する。(3.2.4) により，

$$I = [\,e\,|\,e\,] \qquad\qquad \hat{I} = |\,e\,][\,e\,| \tag{3.2.5}$$

と表せる。また，線形変換 $\hat{X}$ について

$$X = [\,e\,|\hat{X}|\,e\,] \qquad\qquad \hat{X} = |\,e\,]X[\,e\,| \tag{3.2.6}$$

である。(3.2.6) の第 1 式より，正規直交基底 e による $\hat{X}$ の行列表現 X の (i,j) 成分は

$$X_{ij} = \langle e_i|\hat{X}|e_j\rangle \tag{3.2.7}$$

となる。正規直交基底 e による $\hat{X}^\dagger$ の行列表現は

$$[\,e\,|\hat{X}^\dagger|\,e\,] = X^\dagger \tag{3.2.8}$$

であり，その (i,j) 成分は，$\langle e_i|\hat{X}^\dagger|e_j\rangle = \langle e_j|\hat{X}|e_i\rangle^*$ より，

$$X^\dagger_{ij} = X^*_{ji} \tag{3.2.9}$$

となる。(3.2.8) より，正規直交基底によるエルミート変換，歪エルミート変換，ユニタリ変換の行列表現はエルミート行列，歪エルミート行列，ユニタリ行列となる。

任意の線形変換 $\hat{X}$，$\hat{Y}$ について

$$\begin{aligned}
&(1)\quad \mathrm{tr}(\hat{Y}^\dagger\hat{X}) = \mathrm{tr}(\hat{X}^\dagger\hat{Y})^* \\
&(2)\quad \mathrm{tr}(\hat{X}^\dagger(\hat{Y}+\hat{Y}')) = \mathrm{tr}(\hat{X}^\dagger\hat{Y}) + \mathrm{tr}(\hat{X}^\dagger\hat{Y}') \\
&(3)\quad \mathrm{tr}(\hat{X}^\dagger\lambda\hat{Y}) = \lambda\,\mathrm{tr}(\hat{X}^\dagger\hat{Y}) \\
&(4)\quad \mathrm{tr}(\hat{X}^\dagger\hat{X}) \geq 0 \quad (\text{等号は}\hat{X} = \hat{0}\,\text{のときに限る})
\end{aligned} \tag{3.2.10}$$

が成り立つ。したがって，$(\hat{X},\hat{Y}) = \mathrm{tr}(\hat{X}^\dagger\hat{Y})$ とおくと，$(\hat{X},\hat{Y})$ は内積の満たすべき 4 つの性質 (3.1.1) を満たすことがわかる。これを**ヒルベルト-シュミット内積**または**フロベニウス内積**という。ヒルベルト-シュミット内積によって線形変換全体

[14]内積を標準内積で表せるのは表現に用いた基底が正規直交基底の場合に限ることに注意しましょう。

のなす線形空間は内積空間となる[15]。
[(3.2.10) の証明] (2)，(3) は明らかだから，(1)，(4) を証明する。正規直交基底 $e = \{\, |e_1\rangle\, , \cdots\, , \, |e_n\rangle \}$ を用いると，まず，(1) については，

$$\begin{aligned} \mathrm{tr}(\hat{Y}^\dagger \hat{X}) &= \sum_{i=1}^{n}\sum_{j=1}^{n} \langle e_i|\hat{Y}^\dagger|e_j\rangle \, \langle e_j|\hat{X}|e_i\rangle = \sum_{i=1}^{n}\sum_{j=1}^{n} \langle e_j|\hat{Y}|e_i\rangle^* \, \langle e_i|\hat{X}^\dagger|e_j\rangle^* \\ &= \left(\sum_{i=1}^{n}\sum_{j=1}^{n} \langle e_i|\hat{X}^\dagger|e_j\rangle \, \langle e_j|\hat{Y}|e_i\rangle \right)^* = \mathrm{tr}(\hat{X}^\dagger \hat{Y})^* \end{aligned} \tag{3.2.11}$$

である。次に，(4) については，

$$\begin{aligned} \mathrm{tr}(\hat{X}^\dagger \hat{X}) &= \sum_{i=1}^{n}\sum_{j=1}^{n} \langle e_i|\hat{X}^\dagger|e_j\rangle \, \langle e_j|\hat{X}|e_i\rangle = \sum_{i=1}^{n}\sum_{j=1}^{n} \langle e_j|\hat{X}|e_i\rangle^* \, \langle e_j|\hat{X}|e_i\rangle \\ &= \sum_{i=1}^{n}\sum_{j=1}^{n} |\, \langle e_j|\hat{X}|e_i\rangle \,|^2 \geq 0 \end{aligned} \tag{3.2.12}$$

である。特に, (3.2.12) において等号は行列の成分がすべて 0 のとき, つまり, $\hat{X} = \hat{0}$ のときに限り成り立つ。 ■

2 組の正規直交基底 $e = \{\, |e_1\rangle\, , \cdots\, , \, |e_n\rangle \}$ と $e' = \{\, |e'_1\rangle\, , \cdots\, , \, |e'_n\rangle \}$ の間の基底変換を $|\, e'\,] = |\, e\,]P$ とすると，

$$P = [\, e \,|\, e'\,] \qquad\qquad P^{-1} = [\, e' \,|\, e\,] \tag{3.2.13}$$

と書ける。したがって，

$$P^\dagger = P^{-1} \tag{3.2.14}$$

を得る。つまり，P はユニタリ行列である[16]。このとき，ベクトル，線形形式，線形変換の表現の変換則は

$$\boldsymbol{a}' = P^\dagger \boldsymbol{a} \qquad \boldsymbol{\alpha}' = \boldsymbol{\alpha} P \qquad X' = P^\dagger X P \tag{3.2.15}$$

である。

---

[15]線形変換の内積であるヒルベルト-シュミット内積 $(\hat{X}, \hat{Y})$ はこれらの線形変換が作用する V で定義されたベクトルの内積 $(\, |a\rangle\, , \, |b\rangle)$ から自然に導かれるという点が重要です。なお，ベクトルの内積をドット積 $\boldsymbol{a}\cdot\boldsymbol{b}$ で表す記法に対応して，ヒルベルト-シュミット内積を**ダブルドット積** $X : Y$ で表すことがあります。

[16]正規直交基底の間の基底変換の場合には，基底変換の行列 P の逆行列 P^{-1} は単にそのエルミート共役 $P^\dagger$ で与えられるので，計算という点ではガウスの消去法や余因子による逆行列の計算は必要ありません。

3.2.2　正射影・完全性関係・直交直和

正規直交基底 e について，e_i 軸への射影 $|e_i\rangle\langle e_i|$ は射影の基本的性質

$$(\,|e_i\rangle\langle e_i|)^2 = |e_i\rangle\langle e_i| \qquad |e_i\rangle\langle e_i| \cdot |e_j\rangle\langle e_j| = \hat{0} \quad (i \neq j) \tag{3.2.16}$$

に加えて，

$$(\,|e_i\rangle\langle e_i|)^\dagger = |e_i\rangle\langle e_i| \tag{3.2.17}$$

を満たす。(3.2.17) を満たす射影を**正射影**あるいは**直交射影**という。つまり，正射影とはエルミートな射影のことである[17]。$|e_1\rangle, \cdots, |e_n\rangle$ を r 組に分けて，それぞれの組が張る部分空間を $W_{(1)}, \cdots, W_{(r)}$ とするとき，$k = 1, \cdots, r$ について，

$$\hat{P}_{(k)} = \sum_{|e_i\rangle \in W_{(k)}} |e_i\rangle\langle e_i| \tag{3.2.18}$$

を $W_{(k)}$ への正射影という。$W_{(k)} = \mathrm{im}\,\hat{P}_{(k)}$ である。$\hat{P}_{(k)}$ は射影の基本的性質

$$\hat{P}_{(k)}^2 = \hat{P}_{(k)} \qquad \hat{P}_{(k)}\hat{P}_{(l)} = \hat{0} \quad (k \neq l) \tag{3.2.19}$$

に加えて，

$$\hat{P}_{(k)}^\dagger = \hat{P}_{(k)} \tag{3.2.20}$$

を満たす。(3.2.16)，(3.2.17) は (3.2.19)，(3.2.20) の特別な場合である。正射影の組 $\hat{P}_{(1)}, \cdots, \hat{P}_{(r)}$ を用いると，完全性関係は

$$\hat{I} = \hat{P}_{(1)} + \cdots + \hat{P}_{(r)} \tag{3.2.21}$$

と表される。このとき，

$$V = W_{(1)} \oplus \cdots \oplus W_{(r)} \tag{3.2.22}$$

と表し, V は $W_{(1)}, \cdots, W_{(r)}$ の**直交直和**である, あるいは, V は $W_{(1)}, \cdots, W_{(r)}$ によって**直交直和分解**されるという。V の任意のベクトル $|a\rangle$ は，$|a_{(k)}\rangle = \hat{P}_{(k)}\,|a\rangle \in W_{(k)}$ とおくと，

$$|a\rangle = |a_{(1)}\rangle + \cdots + |a_{(r)}\rangle \tag{3.2.23}$$

[17]一般に $\hat{P}^2 = \hat{P}$ および $\hat{P}^\dagger = \hat{P}$ を満たす線形変換 $\hat{P}$ を正射影といいます。なお，正射影でない射影を斜交射影ということがあります。

と一意的に表される。このとき，$k \neq l$ ならば $|a_{(k)}\rangle$ と $|a_{(l)}\rangle$ は直交する。つまり，

$$\langle a_{(k)}|a_{(l)}\rangle = 0 \quad (k \neq l) \tag{3.2.24}$$

である。また，$W_{(k)}^{\perp} = \ker \hat{P}_{(k)}$，つまり，

$$W_{(k)}^{\perp} = W_{(1)} + \overset{\text{no } W_{(k)}}{\cdots\cdots} + W_{(r)} \tag{3.2.25}$$

とおき，$\hat{P}_{(k)}$，$W_{(k)}$ をあらためて $\hat{P}$，W と書けば，$W = \operatorname{im} \hat{P}$，$W^{\perp} = \ker \hat{P}$ であり，

$$V = W \oplus W^{\perp} \tag{3.2.26}$$

と表せる。$W^{\perp}$ を W の**直交補空間**という。W が線形変換 $\hat{X}$ の不変部分空間のとき，W の任意のベクトル $|a\rangle$ と $W^{\perp}$ の任意のベクトル $|b\rangle$ に対して $(\hat{X}\,|a\rangle\,,\,|b\rangle) = (\,|a\rangle\,,\hat{X}^{\dagger}\,|b\rangle) = 0$ となる。したがって，$\hat{X}(W) \subseteq W \Leftrightarrow \hat{X}^{\dagger}(W^{\perp}) \subseteq W^{\perp}$，つまり，

$$W \text{ は} \hat{X} \text{ の不変部分空間} \quad \Leftrightarrow \quad W^{\perp} \text{は} \hat{X}^{\dagger} \text{の不変部分空間} \tag{3.2.27}$$

が成り立つ。$W^{\perp}$ への正射影を $\hat{Q} = \hat{I} - \hat{P}$ とすると，(3.2.27) は

$$\hat{X} = \hat{P}\hat{X}\hat{P} + \hat{P}\hat{X}\hat{Q} + \hat{Q}\hat{X}\hat{Q} \qquad \hat{X}^{\dagger} = \hat{P}\hat{X}^{\dagger}\hat{P} + \hat{Q}\hat{X}^{\dagger}\hat{P} + \hat{Q}\hat{X}^{\dagger}\hat{Q} \tag{3.2.28}$$

と表せる。さらに，$W^{\perp}$ も $\hat{X}$ の不変部分空間であるならば，

$$\hat{X} = \hat{P}\hat{X}\hat{P} + \hat{Q}\hat{X}\hat{Q} \qquad \hat{X}^{\dagger} = \hat{P}\hat{X}^{\dagger}\hat{P} + \hat{Q}\hat{X}^{\dagger}\hat{Q} \tag{3.2.29}$$

である。したがって，W および $W^{\perp}$ がともに $\hat{X}$ の不変部分空間であるとき，$\hat{X}$，$\hat{X}^{\dagger}$ は $\hat{P}$，$\hat{Q}$ と可換であることがわかる。

==========

補足・計算例 29.

正射影の和

$\hat{P}_{(1)}, \cdots, \hat{P}_{(s)}$ を正射影とする。つまり，$\hat{P}_{(k)}^2 = \hat{P}_{(k)}$，$\hat{P}_{(k)}^{\dagger} = \hat{P}_{(k)}\,(k = 1, \cdots, s)$ とする。このとき，

$$(1)\,\hat{P}_{(1)} + \cdots + \hat{P}_{(s)} \text{は正射影} \quad \Leftrightarrow \quad (2)\,\hat{P}_{(k)}\hat{P}_{(l)} = \hat{0} \quad (k \neq l) \tag{3.2.30}$$

が成り立つ[18]。

[18] この定理をはじめとする正射影についての詳細は参考文献 [15] を参照してください。

[(3.2.30) の証明] まず，(1) ⇒ (2) を示す。任意のベクトル $|a\rangle$ に対して，

$$
\begin{aligned}
(\,|a\rangle\,,|a\rangle) &\geq ((\hat{P}_{(1)}+\cdots+\hat{P}_{(s)})\,|a\rangle\,,(\hat{P}_{(1)}+\cdots+\hat{P}_{(s)})\,|a\rangle) \\
&= (\,|a\rangle\,,(\hat{P}_{(1)}+\cdots+\hat{P}_{(s)})^{\dagger}(\hat{P}_{(1)}+\cdots+\hat{P}_{(s)})\,|a\rangle) \\
&= (\,|a\rangle\,,(\hat{P}_{(1)}+\cdots+\hat{P}_{(s)})^{2}\,|a\rangle) \\
&= (\,|a\rangle\,,(\hat{P}_{(1)}+\cdots+\hat{P}_{(s)})\,|a\rangle) \\
&= (\,|a\rangle\,,\hat{P}_{(1)}\,|a\rangle)+\cdots+(\,|a\rangle\,,\hat{P}_{(s)}\,|a\rangle) \\
&= (\,|a\rangle\,,\hat{P}^{2}_{(1)}\,|a\rangle)+\cdots+(\,|a\rangle\,,\hat{P}^{2}_{(s)}\,|a\rangle) \\
&= (\,|a\rangle\,,\hat{P}^{\dagger}_{(1)}\hat{P}_{(1)}\,|a\rangle)+\cdots+(\,|a\rangle\,,\hat{P}^{\dagger}_{(s)}\hat{P}_{(s)}\,|a\rangle) \\
&= (\hat{P}_{(1)}\,|a\rangle\,,\hat{P}_{(1)}\,|a\rangle)+\cdots+(\hat{P}_{(s)}\,|a\rangle\,,\hat{P}_{(s)}\,|a\rangle)
\end{aligned}
\tag{3.2.31}
$$

つまり

$$
||\ |a\rangle\ ||^2 \geq ||\ \hat{P}_{(1)}\,|a\rangle\ ||^2+\cdots+||\ \hat{P}_{(s)}\,|a\rangle\ ||^2 \tag{3.2.32}
$$

が成り立つ。(3.2.32) の $|a\rangle$ として $\hat{P}_{(l)}\,|a\rangle$ をとると，$\hat{P}^2_{(l)}=\hat{P}_{(l)}$ より，

$$
\begin{aligned}
||\ \hat{P}_{(l)}\,|a\rangle\ ||^2 &\geq ||\ \hat{P}_{(1)}\hat{P}_{(l)}\,|a\rangle\ ||^2+\cdots+||\ \hat{P}_{(l)}\hat{P}_{(l)}\,|a\rangle\ ||^2+\cdots+||\ \hat{P}_{(s)}\hat{P}_{(l)}\,|a\rangle\ ||^2 \\
&= ||\ \hat{P}_{(1)}\hat{P}_{(l)}\,|a\rangle\ ||^2+\cdots+||\ \hat{P}_{(l)}\,|a\rangle\ ||^2+\cdots+||\ \hat{P}_{(s)}\hat{P}_{(l)}\,|a\rangle\ ||^2
\end{aligned}
\tag{3.2.33}
$$

つまり

$$
0 \geq ||\ \hat{P}_{(1)}\hat{P}_{(l)}\,|a\rangle\ ||^2+\overset{\text{no}\ ||\ \hat{P}_{(l)}\hat{P}_{(l)}|a\rangle\ ||^2}{\cdots\cdots}+||\ \hat{P}_{(s)}\hat{P}_{(l)}\,|a\rangle\ ||^2 \tag{3.2.34}
$$

を得る。したがって，$\hat{P}_{(k)}\hat{P}_{(l)}=\hat{0}\ (k\neq l)$ でなければならない[19]。次に，(2) ⇒ (1) を示す。$(\hat{P}_{(1)}+\cdots+\hat{P}_{(s)})^{\dagger}=\hat{P}_{(1)}+\cdots+\hat{P}_{(s)}$ は明らかである。また，$(\hat{P}_{(1)}+\cdots+\hat{P}_{(s)})^2=\hat{P}_{(1)}+\cdots+\hat{P}_{(s)}$ についても，$\hat{P}^2_{(k)}=\hat{P}_{(k)}$ および $\hat{P}_{(k)}\hat{P}_{(l)}=\hat{0}\ (k\neq l)$ より明らかに成り立つ。 ■

正規直交基底

例 1：区間を $[-\pi,\pi]$ とし，線形空間 $V=\mathrm{span}(e^{ix},e^{-ix})$ の内積を

$$
(f,g)=\int_{-\pi}^{\pi}dx\,f(x)^{*}g(x) \tag{3.2.35}
$$

によって定義する。この内積の下で，基底 $e=\{\frac{1}{\sqrt{2\pi}}e^{ix},\frac{1}{\sqrt{2\pi}}e^{-ix}\}$ は正規直交基底となる。

・微分演算子 ($[\,D_x,D_x^{\dagger}\,]=0$，$D_x^{\dagger}=-D_x$，$D_x$ は歪エルミート変換)

$$
\begin{gathered}
D_x[\ \frac{1}{\sqrt{2\pi}}e^{ix}\ \ \frac{1}{\sqrt{2\pi}}e^{-ix}\ ]=[\ \frac{i}{\sqrt{2\pi}}e^{ix}\ \ -\frac{i}{\sqrt{2\pi}}e^{-ix}\ ]=[\ \frac{1}{\sqrt{2\pi}}e^{ix}\ \ \frac{1}{\sqrt{2\pi}}e^{-ix}\ ]\begin{bmatrix} i & 0 \\ 0 & -i \end{bmatrix} \\
D_x \overset{e}{\mapsto} \begin{bmatrix} i & 0 \\ 0 & -i \end{bmatrix} \qquad\qquad D_x^{\dagger} \overset{e}{\mapsto} \begin{bmatrix} -i & 0 \\ 0 & i \end{bmatrix}
\end{gathered}
\tag{3.2.36}
$$

[19] この証明は次元を用いていないため，無限次元の場合にも適用できます。

・並進演算子 ($[\mathscr{T}_c, \mathscr{T}_c^\dagger] = 0$，$\mathscr{T}_c^\dagger = \mathscr{T}_c^{-1}$，$\mathscr{T}_c$ はユニタリ変換)

$$\mathscr{T}_c[\ \frac{1}{\sqrt{2\pi}}e^{ix}\ \ \frac{1}{\sqrt{2\pi}}e^{-ix}\ ] = [\ \frac{1}{\sqrt{2\pi}}e^{i(x-c)}\ \ \frac{1}{\sqrt{2\pi}}e^{-i(x-c)}\ ] = [\ \frac{1}{\sqrt{2\pi}}e^{ix}\ \ \frac{1}{\sqrt{2\pi}}e^{-ix}\ ]\begin{bmatrix} e^{-ic} & 0 \\ 0 & e^{ic} \end{bmatrix}$$

$$\mathscr{T}_c \overset{e}{\mapsto} \begin{bmatrix} e^{-ic} & 0 \\ 0 & e^{ic} \end{bmatrix} \qquad \mathscr{T}_c^\dagger \overset{e}{\mapsto} \begin{bmatrix} e^{ic} & 0 \\ 0 & e^{-ic} \end{bmatrix} \tag{3.2.37}$$

・反転演算子 ($[\mathscr{P}, \mathscr{P}^\dagger] = 0$，$\mathscr{P}^\dagger = \mathscr{P}$，$\mathscr{P}$ はエルミート変換)

$$\mathscr{P}[\ \frac{1}{\sqrt{2\pi}}e^{ix}\ \ \frac{1}{\sqrt{2\pi}}e^{-ix}\ ] = [\ \frac{1}{\sqrt{2\pi}}e^{i(-x)}\ \ \frac{1}{\sqrt{2\pi}}e^{-i(-x)}\ ] = [\ \frac{1}{\sqrt{2\pi}}e^{ix}\ \ \frac{1}{\sqrt{2\pi}}e^{-ix}\ ]\begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}$$

$$\mathscr{P} \overset{e}{\mapsto} \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix} \qquad \mathscr{P}^\dagger \overset{e}{\mapsto} \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix} \tag{3.2.38}$$

例 2：区間を $[-\pi, \pi]$ とし，線形空間 $V = \mathrm{span}(\cos x, \sin x)$ の内積を

$$(f, g) = \int_{-\pi}^{\pi} dx\, f(x)^* g(x) \tag{3.2.39}$$

によって定義する。この内積の下で，基底 $e' = \{\frac{1}{\sqrt{\pi}}\cos x, \frac{1}{\sqrt{\pi}}\sin x\}$ は正規直交基底となる。

・微分演算子 ($[D_x, D_x^\dagger] = 0$，$D_x^\dagger = -D_x$，D_x は歪エルミート変換)

$$D_x[\ \frac{1}{\sqrt{\pi}}\cos x\ \ \frac{1}{\sqrt{\pi}}\sin x\ ] = [\ -\frac{1}{\sqrt{\pi}}\sin x\ \ \frac{1}{\sqrt{\pi}}\cos x\ ] = [\ \frac{1}{\sqrt{\pi}}\cos x\ \ \frac{1}{\sqrt{\pi}}\sin x\ ]\begin{bmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{bmatrix}$$

$$D_x \overset{e'}{\mapsto} \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{bmatrix} \qquad D_x^\dagger \overset{e'}{\mapsto} \begin{bmatrix} 0 & -1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix} \tag{3.2.40}$$

・並進演算子 ($[\mathscr{T}_c, \mathscr{T}_c^\dagger] = 0$，$\mathscr{T}_c^\dagger = \mathscr{T}_c^{-1}$，$\mathscr{T}_c$ はユニタリ変換)

$$\begin{aligned} \mathscr{T}_c[\ \frac{1}{\sqrt{\pi}}\cos x\ \ \frac{1}{\sqrt{\pi}}\sin x\ ] &= [\ \frac{1}{\sqrt{\pi}}\cos(x-c)\ \ \frac{1}{\sqrt{\pi}}\sin(x-c)\ ] \\ &= [\ \frac{1}{\sqrt{\pi}}\cos x\ \ \frac{1}{\sqrt{\pi}}\sin x\ ]\begin{bmatrix} \cos c & -\sin c \\ \sin c & \cos c \end{bmatrix} \end{aligned}$$

$$\mathscr{T}_c \overset{e'}{\mapsto} \begin{bmatrix} \cos c & -\sin c \\ \sin c & \cos c \end{bmatrix} \qquad \mathscr{T}_c^\dagger \overset{e'}{\mapsto} \begin{bmatrix} \cos c & \sin c \\ -\sin c & \cos c \end{bmatrix} \tag{3.2.41}$$

・反転演算子 ($[\mathscr{P}, \mathscr{P}^\dagger] = 0$，$\mathscr{P}^\dagger = \mathscr{P}$，$\mathscr{P}$ はエルミート変換)

$$\mathscr{P}[\ \frac{1}{\sqrt{\pi}}\cos x\ \ \frac{1}{\sqrt{\pi}}\sin x\ ] = [\ \frac{1}{\sqrt{\pi}}\cos(-x)\ \ \frac{1}{\sqrt{\pi}}\sin(-x)\ ] = [\ \frac{1}{\sqrt{\pi}}\cos x\ \ \frac{1}{\sqrt{\pi}}\sin x\ ]\begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix}$$

$$\mathscr{P} \overset{e'}{\mapsto} \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix} \qquad \mathscr{P}^\dagger \overset{e'}{\mapsto} \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix} \tag{3.2.42}$$

例 3：区間を $[-\pi, \pi]$ とし，線形空間 $V = \mathrm{span}(e^{ix}, e^{-ix}) = \mathrm{span}(\cos x, \sin x)$ の内積を

$$(f, g) = \int_{-\pi}^{\pi} dx\, f(x)^* g(x) \tag{3.2.43}$$

によって定義する。この内積の下で，基底 $e = \{e_1, e_2\} = \{\frac{1}{\sqrt{2\pi}}e^{ix}, \frac{1}{\sqrt{2\pi}}e^{-ix}\}$ および基底 $e' = \{e'_1, e'_2\} = \{\frac{1}{\sqrt{\pi}}\cos x, \frac{1}{\sqrt{\pi}}\sin x\}$ はともに正規直交基底となる。これら 2 組の正規直交基底の間の基底変換を $[\,e'_1\,e'_2\,] = [\,e_1\,e_2\,]P$ とする。

・基底変換の行列

$$[\ \frac{1}{\sqrt{\pi}}\cos x\ \ \frac{1}{\sqrt{\pi}}\sin x\ ] = [\ \frac{1}{\sqrt{2\pi}}e^{ix}\ \ \frac{1}{\sqrt{2\pi}}e^{-ix}\ ]\begin{bmatrix}\frac{1}{\sqrt{2}} & -\frac{i}{\sqrt{2}}\\ \frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{i}{\sqrt{2}}\end{bmatrix}$$

$$P = \begin{bmatrix}\frac{1}{\sqrt{2}} & -\frac{i}{\sqrt{2}}\\ \frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{i}{\sqrt{2}}\end{bmatrix} = [\,\boldsymbol{p}_1\,\boldsymbol{p}_2\,] \qquad P^{-1} = P^\dagger = \begin{bmatrix}\frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}}\\ \frac{i}{\sqrt{2}} & -\frac{i}{\sqrt{2}}\end{bmatrix} = \begin{bmatrix}\boldsymbol{p}_1^\dagger\\ \boldsymbol{p}_2^\dagger\end{bmatrix}$$

$$I = P^\dagger P = \begin{bmatrix}\boldsymbol{p}_1^\dagger\\ \boldsymbol{p}_2^\dagger\end{bmatrix}[\,\boldsymbol{p}_1\,\boldsymbol{p}_2\,] = \begin{bmatrix}\boldsymbol{p}_1^\dagger\boldsymbol{p}_1 & \boldsymbol{p}_1^\dagger\boldsymbol{p}_2\\ \boldsymbol{p}_2^\dagger\boldsymbol{p}_1 & \boldsymbol{p}_2^\dagger\boldsymbol{p}_2\end{bmatrix} = \begin{bmatrix}1 & 0\\ 0 & 1\end{bmatrix} \tag{3.2.44}$$

・行列表現の変換 ($X' = P^{-1}XP$)

$$\text{微分演算子 } D_x : \begin{bmatrix}0 & 1\\ -1 & 0\end{bmatrix} = \begin{bmatrix}\frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}}\\ \frac{i}{\sqrt{2}} & -\frac{i}{\sqrt{2}}\end{bmatrix}\begin{bmatrix}i & 0\\ 0 & -i\end{bmatrix}\begin{bmatrix}\frac{1}{\sqrt{2}} & -\frac{i}{\sqrt{2}}\\ \frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{i}{\sqrt{2}}\end{bmatrix} \tag{3.2.45}$$

$$\text{並進演算子 } \mathscr{T}_c : \begin{bmatrix}\cos c & -\sin c\\ \sin c & \cos c\end{bmatrix} = \begin{bmatrix}\frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}}\\ \frac{i}{\sqrt{2}} & -\frac{i}{\sqrt{2}}\end{bmatrix}\begin{bmatrix}e^{-ic} & 0\\ 0 & e^{ic}\end{bmatrix}\begin{bmatrix}\frac{1}{\sqrt{2}} & -\frac{i}{\sqrt{2}}\\ \frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{i}{\sqrt{2}}\end{bmatrix} \tag{3.2.46}$$

$$\text{反転演算子 } \mathscr{P} : \begin{bmatrix}1 & 0\\ 0 & -1\end{bmatrix} = \begin{bmatrix}\frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}}\\ \frac{i}{\sqrt{2}} & -\frac{i}{\sqrt{2}}\end{bmatrix}\begin{bmatrix}0 & 1\\ 1 & 0\end{bmatrix}\begin{bmatrix}\frac{1}{\sqrt{2}} & -\frac{i}{\sqrt{2}}\\ \frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{i}{\sqrt{2}}\end{bmatrix} \tag{3.2.47}$$

・基底 e' に関する正射影と完全性関係 (表現はすべて基底 e によるものとする)

$$e'_1\text{軸への正射影} : \boldsymbol{p}_1\boldsymbol{p}_1^\dagger = \begin{bmatrix}\frac{1}{\sqrt{2}}\\ \frac{1}{\sqrt{2}}\end{bmatrix}[\,\frac{1}{\sqrt{2}}\ \frac{1}{\sqrt{2}}\,] = \begin{bmatrix}\frac{1}{2} & \frac{1}{2}\\ \frac{1}{2} & \frac{1}{2}\end{bmatrix}$$

$$e'_2\text{軸への正射影} : \boldsymbol{p}_2\boldsymbol{p}_2^\dagger = \begin{bmatrix}-\frac{i}{\sqrt{2}}\\ \frac{i}{\sqrt{2}}\end{bmatrix}[\,\frac{i}{\sqrt{2}}\ -\frac{i}{\sqrt{2}}\,] = \begin{bmatrix}\frac{1}{2} & -\frac{1}{2}\\ -\frac{1}{2} & \frac{1}{2}\end{bmatrix}$$

$$\text{正射影の基本的性質} : (\boldsymbol{p}_1\boldsymbol{p}_1^\dagger)^2 = \boldsymbol{p}_1\boldsymbol{p}_1^\dagger \qquad (\boldsymbol{p}_2\boldsymbol{p}_2^\dagger)^2 = \boldsymbol{p}_2\boldsymbol{p}_2^\dagger \qquad (\boldsymbol{p}_1\boldsymbol{p}_1^\dagger)(\boldsymbol{p}_2\boldsymbol{p}_2^\dagger) = O$$
$$(\boldsymbol{p}_1\boldsymbol{p}_1^\dagger)^\dagger = \boldsymbol{p}_1\boldsymbol{p}_1^\dagger \qquad (\boldsymbol{p}_2\boldsymbol{p}_2^\dagger)^\dagger = \boldsymbol{p}_2\boldsymbol{p}_2^\dagger \tag{3.2.48}$$

$$\text{完全性関係} : I = PP^\dagger = [\,\boldsymbol{p}_1\,\boldsymbol{p}_2\,]\begin{bmatrix}\boldsymbol{p}_1^\dagger\\ \boldsymbol{p}_2^\dagger\end{bmatrix} = \boldsymbol{p}_1\boldsymbol{p}_1^\dagger + \boldsymbol{p}_2\boldsymbol{p}_2^\dagger$$
$$= \begin{bmatrix}\frac{1}{2} & \frac{1}{2}\\ \frac{1}{2} & \frac{1}{2}\end{bmatrix} + \begin{bmatrix}\frac{1}{2} & -\frac{1}{2}\\ -\frac{1}{2} & \frac{1}{2}\end{bmatrix} = \begin{bmatrix}1 & 0\\ 0 & 1\end{bmatrix}$$

スピン角運動量演算子

正規直交基底 $e = \{\,|\uparrow\rangle\,,\,|\downarrow\rangle\}$ をもつ内積空間 $V = \mathrm{span}(\,|\uparrow\rangle\,,\,|\downarrow\rangle)$ を考える。補足・計算例 18 の例 9 で述べたスピン角運動量演算子を $\hat{\boldsymbol{s}} = \hat{s}_x\,\boldsymbol{e}_x + \hat{s}_y\,\boldsymbol{e}_y + \hat{s}_z\,\boldsymbol{e}_z$ と表すと，$\hat{s}_x$，$\hat{s}_y$，$\hat{s}_z$ は基底 e を用いて

$$\hat{s}_x = \frac{1}{2}|\,e\,]\sigma_x[\,e\,| \qquad \hat{s}_y = \frac{1}{2}|\,e\,]\sigma_y[\,e\,| \qquad \hat{s}_z = \frac{1}{2}|\,e\,]\sigma_z[\,e\,| \tag{3.2.49}$$

と書ける。ここで，σ_x，σ_y，σ_z は

$$\sigma_x = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix} \qquad \sigma_y = \begin{bmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{bmatrix} \qquad \sigma_z = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix} \tag{3.2.50}$$

によって定義されるパウリ行列である。パウリ行列 σ_x，σ_y，σ_z はエルミート行列であり，したがって，$\hat{s}_x$，$\hat{s}_y$，$\hat{s}_z$ はエルミート変換である。このことは (3.2.49) を

$$\begin{aligned}
\hat{s}_x &= \frac{1}{2}|\,e\,]\sigma_x[\,e\,| = \frac{1}{2}[\,|\uparrow\rangle\ \ |\downarrow\rangle\,]\begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} \langle\uparrow| \\ \langle\downarrow| \end{bmatrix} = \frac{1}{2}(\,|\uparrow\rangle\langle\downarrow| + |\downarrow\rangle\langle\uparrow|) \\
\hat{s}_y &= \frac{1}{2}|\,e\,]\sigma_y[\,e\,| = \frac{1}{2}[\,|\uparrow\rangle\ \ |\downarrow\rangle\,]\begin{bmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} \langle\uparrow| \\ \langle\downarrow| \end{bmatrix} = \frac{1}{2i}(\,|\uparrow\rangle\langle\downarrow| - |\downarrow\rangle\langle\uparrow|) \\
\hat{s}_z &= \frac{1}{2}|\,e\,]\sigma_z[\,e\,| = \frac{1}{2}[\,|\uparrow\rangle\ \ |\downarrow\rangle\,]\begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} \langle\uparrow| \\ \langle\downarrow| \end{bmatrix} = \frac{1}{2}(\,|\uparrow\rangle\langle\uparrow| - |\downarrow\rangle\langle\downarrow|)
\end{aligned} \tag{3.2.51}$$

と書けば明らかである。天頂角 θ，方位角 ϕ の方向の単位ベクトルを $\boldsymbol{n}$ とすると，

$$\boldsymbol{n} = n_x\,\boldsymbol{e}_x + n_y\,\boldsymbol{e}_y + n_z\,\boldsymbol{e}_z = \sin\theta\cos\phi\,\boldsymbol{e}_x + \sin\theta\sin\phi\,\boldsymbol{e}_y + \cos\theta\,\boldsymbol{e}_z \tag{3.2.52}$$

である。$\boldsymbol{n}$ の方向への $\hat{\boldsymbol{s}}$ の射影 $\boldsymbol{n}\cdot\hat{\boldsymbol{s}}$ について調べるために，$\boldsymbol{n}$ の方向への $\boldsymbol{\sigma} = \sigma_x\,\boldsymbol{e}_x + \sigma_y\,\boldsymbol{e}_y + \sigma_z\,\boldsymbol{e}_z$ の射影

$$\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{\sigma} = n_x\sigma_x + n_y\sigma_y + n_z\sigma_z = \begin{bmatrix} n_z & n_x - in_y \\ n_x + in_y & -n_z \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \cos\theta & \sin\theta e^{-i\phi} \\ \sin\theta e^{i\phi} & -\cos\theta \end{bmatrix} \tag{3.2.53}$$

の固有値，固有ベクトルを求める。

$$\det\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{\sigma} = \det\begin{bmatrix} \cos\theta - \xi & \sin\theta e^{-i\phi} \\ \sin\theta e^{i\phi} & -\cos\theta - \xi \end{bmatrix} = \xi^2 - 1 = (\xi - 1)(\xi + 1) = 0 \quad \therefore \xi = 1,\ -1 \tag{3.2.54}$$

・$\xi = 1$ のとき

$$\begin{bmatrix} \cos\theta - 1 & \sin\theta e^{-i\phi} \\ \sin\theta e^{i\phi} & -\cos\theta - 1 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} c_1 \\ c_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -2\sin^2(\theta/2) & 2\cos(\theta/2)\sin(\theta/2)e^{-i\phi} \\ 2\cos(\theta/2)\sin(\theta/2)e^{i\phi} & -2\cos^2(\theta/2) \end{bmatrix}\begin{bmatrix} c_1 \\ c_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \end{bmatrix}$$
$$\therefore \boldsymbol{p}_+ = \begin{bmatrix} \cos(\theta/2) \\ \sin(\theta/2)e^{i\phi} \end{bmatrix} \tag{3.2.55}$$

・$\xi = -1$ のとき

$$\begin{bmatrix} \cos\theta + 1 & \sin\theta e^{-i\phi} \\ \sin\theta e^{i\phi} & -\cos\theta + 1 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} c_1 \\ c_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 2\cos^2(\theta/2) & 2\cos(\theta/2)\sin(\theta/2)e^{-i\phi} \\ 2\cos(\theta/2)\sin(\theta/2)e^{i\phi} & 2\sin^2(\theta/2) \end{bmatrix}\begin{bmatrix} c_1 \\ c_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \end{bmatrix}$$
$$\therefore \boldsymbol{p}_- = \begin{bmatrix} -\sin(\theta/2) \\ \cos(\theta/2)e^{i\phi} \end{bmatrix} \tag{3.2.56}$$

以上より，$\boldsymbol{n}\cdot\hat{\boldsymbol{s}}$ の固有値，固有ベクトルは

$$\begin{aligned}
&\text{固有値}\quad \frac{1}{2}\quad \text{のとき，}\quad \text{固有ベクトル}\ |\boldsymbol{n}+\rangle = \cos(\theta/2)\,|\uparrow\rangle + \sin(\theta/2)e^{i\phi/2}\,|\downarrow\rangle \\
&\text{固有値}\ -\frac{1}{2}\quad \text{のとき，}\quad \text{固有ベクトル}\ |\boldsymbol{n}-\rangle = -\sin(\theta/2)\,|\uparrow\rangle + \cos(\theta/2)e^{i\phi/2}\,|\downarrow\rangle
\end{aligned} \tag{3.2.57}$$

である。

==========

3.2.3　グラム–シュミットの直交化法

基底 $\tilde{e} = \{\,|\tilde{e}_1\rangle\,, \cdots\,, |\tilde{e}_n\rangle\}$ が正規直交基底でない場合，正射影を用いることにより基底 $\tilde{e}$ から正規直交基底 $e = \{\,|e_1\rangle\,, \cdots\,, |e_n\rangle\}$ を構成することができる。以下の手続きにより正規直交基底を得る方法を**グラム–シュミットの直交化法** という。

(1) $|e_1\rangle = \dfrac{|\tilde{e}_1\rangle}{||\,|\tilde{e}_1\rangle\,||}$

(2) $\hat{P} = |e_1\rangle\langle e_1|$ とおき，$|e_2\rangle = \dfrac{|\tilde{e}_2\rangle - \hat{P}\,|\tilde{e}_2\rangle}{||\,|\tilde{e}_2\rangle - \hat{P}\,|\tilde{e}_2\rangle\,||}$

(3) $\hat{P} = |e_1\rangle\langle e_1| + |e_2\rangle\langle e_2|$ とおき，$|e_3\rangle = \dfrac{|\tilde{e}_3\rangle - \hat{P}\,|\tilde{e}_3\rangle}{||\,|\tilde{e}_3\rangle - \hat{P}\,|\tilde{e}_3\rangle\,||}$

$$\vdots$$

(k) $\hat{P} = |e_1\rangle\langle e_1| + \cdots + |e_{k-1}\rangle\langle e_{k-1}|$ とおき，$|e_k\rangle = \dfrac{|\tilde{e}_k\rangle - \hat{P}\,|\tilde{e}_k\rangle}{||\,|\tilde{e}_k\rangle - \hat{P}\,|\tilde{e}_k\rangle\,||}$

$$\vdots$$

==========

補足・計算例 30.

グラム–シュミットの直交化法
区間 $[a, b]$ における高々 2 次の多項式 $f(x) = f_0 + f_1 x + f_2 x^2$ 全体のなす線形空間を V とする。

例 1：区間を $[-1, 1]$ ととり，V の内積を

$$(f, g) = \int_{-1}^{1} dx\, f(x)^* g(x) \tag{3.2.58}$$

によって定義する。V の基底を $\tilde{e} = \{1, x, x^2\}$ とすると，$(1, 1) = 2$，$(1, x) = 0$，$(1, x^2) = 2/3$，$(x, x) = 2/3$，$(x, x^2) = 0$，$(x^2, x^2) = 2/5$ であるから，基底 $\tilde{e}$ は正規直交基底でない。そこで，グラム–シュミットの直交化法により基底 $\tilde{e}$ から正規直交基底 e をつくる。

$$\begin{aligned}
&(1)\ e_1 = \frac{1}{||1||} = \frac{1}{\sqrt{(1,1)}} = \sqrt{\frac{1}{2}} \\
&(2)\ e_2 = \frac{x - e_1(e_1, x)}{||x - e_1(e_1, x)||} = \frac{x}{||x||} = \frac{x}{\sqrt{(x,x)}} = \sqrt{\frac{3}{2}}x \\
&(3)\ e_3 = \frac{x^2 - e_1(e_1, x^2) - e_2(e_2, x^2)}{||x^2 - e_1(e_1, x^2) - e_2(e_2, x^2)||} = \frac{x^2 - e_1(e_1, x^2)}{||x^2 - e_1(e_1, x^2)||} = \frac{x^2 - (1, x^2)/2}{||x^2 - (1, x^2)/2||} \\
&\qquad = \frac{x^2 - 1/3}{||x^2 - 1/3||} = \frac{x^2 - 1/3}{\sqrt{(x^2 - 1/3, x^2 - 1/3)}} = \frac{x^2 - 1/3}{\sqrt{2/5 + 2/9 - 4/9}} = \sqrt{\frac{45}{8}}\left(x^2 - \frac{1}{3}\right)
\end{aligned} \tag{3.2.59}$$

以上より，正規直交基底 $e = \{\sqrt{\frac{1}{2}}, \sqrt{\frac{3}{2}}x, \sqrt{\frac{45}{8}}(x^2 - \frac{1}{3})\}$ が得られた[20]。

例 2：区間を $(-\infty, \infty)$ ととり，V の内積を

$$(f, g) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} dx\, e^{-x^2} f(x)^* g(x) \tag{3.2.60}$$

によって定義する。V の基底を $\tilde{e} = \{1, x, x^2\}$ とすると，$(1,1) = 1$，$(1,x) = 0$，$(1,x^2) = 1/2$，$(x,x) = 1/2$，$(x,x^2) = 0$，$(x^2,x^2) = 3/4$ であるから，基底 $\tilde{e}$ は正規直交基底でない。そこで，グラム–シュミットの直交化法により基底 $\tilde{e}$ から正規直交基底 e をつくる。

$$\begin{aligned}
&(1)\ e_1 = \frac{1}{||1||} = \frac{1}{\sqrt{(1,1)}} = 1 \\
&(2)\ e_2 = \frac{x - e_1(e_1,x)}{||x - e_1(e_1,x)||} = \frac{x}{||x||} = \frac{x}{\sqrt{(x,x)}} = \sqrt{2}x \\
&(3)\ e_3 = \frac{x^2 - e_1(e_1,x^2) - e_2(e_2,x^2)}{||x^2 - e_1(e_1,x^2) - e_2(e_2,x^2)||} = \frac{x^2 - e_1(e_1,x^2)}{||x^2 - e_1(e_1,x^2)||} = \frac{x^2 - (1,x^2)}{||x^2 - (1,x^2)||} \\
&\quad = \frac{x^2 - 1/2}{||x^2 - 1/2||} = \frac{x^2 - 1/2}{\sqrt{(x^2 - 1/2, x^2 - 1/2)}} = \frac{x^2 - 1/2}{\sqrt{3/4 + 1/4 - 1/2}} = \sqrt{2}\left(x^2 - \frac{1}{2}\right)
\end{aligned} \tag{3.2.61}$$

以上より，正規直交基底 $e = \{1, \sqrt{2}x, \sqrt{2}(x^2 - \frac{1}{2})\}$ が得られた[21]。

==========

3.2.4 シュワルツの不等式と三角不等式

任意の 2 つのベクトル $|a\rangle$，$|b\rangle$ に対して**シュワルツの不等式**

$$|(\,|a\rangle\,,\,|b\rangle)| \leq ||\ |a\rangle\ ||\ ||\ |b\rangle\ || \tag{3.2.62}$$

が成り立つ。

[(3.2.62) の証明] $|a\rangle$，$|b\rangle$ の少なくとも 1 つが $\mathbf{0}$ のときは明らかに成り立つから，例えば $|b\rangle \neq \mathbf{0}$ として示せばよい。正射影 $\hat{P} = |b\rangle\langle b| \,/\, \langle b|b\rangle$, $\hat{Q} = \hat{I} - \hat{P}$ を用いると，$|a\rangle = \hat{P}\,|a\rangle + \hat{Q}\,|a\rangle$ と書ける。正射影の性質より，$\hat{P}^\dagger\hat{P} = \hat{P}^2 = \hat{P}$, $\hat{Q}^\dagger\hat{Q} = \hat{Q}^2 = \hat{Q}$, $\hat{P}^\dagger\hat{Q} = \hat{P}\hat{Q} = \hat{0}$，$\hat{Q}^\dagger\hat{P} = \hat{Q}\hat{P} = \hat{0}$ であるから，$\langle a|a\rangle = \langle a|\hat{P}|a\rangle + \langle a|\hat{Q}|a\rangle \geq \langle a|\hat{P}|a\rangle = \langle a|b\rangle\langle b|a\rangle \,/\, \langle b|b\rangle$ となる。したがって，

$$\langle a|b\rangle\langle b|a\rangle \leq \langle a|a\rangle\langle b|b\rangle \tag{3.2.63}$$

[20] これらは定数倍の違いを除いて**ルジャンドル多項式**として知られるものに一致します。
[21] これらは定数倍の違いを除いて**エルミート多項式**として知られるものに一致します。

であり，シュワルツの不等式 (3.2.62) を得る[22]。 ■

任意の 2 つのベクトル $|a\rangle$，$|b\rangle$ に対して**三角不等式**

$$|| \ |a\rangle + |b\rangle \ || \leq || \ |a\rangle \ || + || \ |b\rangle \ || \tag{3.2.64}$$

が成り立つ。
[(3.2.64) の証明] $(|| \ |a\rangle \ || + || \ |b\rangle \ ||)^2 = \langle a|a\rangle + \langle b|b\rangle + 2\sqrt{\langle a|a\rangle\langle b|b\rangle}$ において，シュワルツの不等式 (3.2.62) あるいは (3.2.63) を用いると，

$$\langle a|a\rangle + \langle b|b\rangle + 2\sqrt{\langle a|a\rangle\langle b|b\rangle} \geq \langle a|a\rangle + \langle b|b\rangle + 2\sqrt{\langle a|b\rangle\langle b|a\rangle} \tag{3.2.65}$$

となる。ここで，任意の複素数 z について $2|z| \geq z + z^*$ であるから，$z = \langle a|b\rangle$ と考えると，

$$\langle a|a\rangle + \langle b|b\rangle + 2\sqrt{\langle a|b\rangle\langle b|a\rangle} \geq \langle a|a\rangle + \langle b|b\rangle + \langle a|b\rangle + \langle b|a\rangle \tag{3.2.66}$$

である。(3.2.66) の右辺は $|| \, |a\rangle + |b\rangle \, ||^2$ であるから，三角不等式 (3.2.64) を得る。■

==========

補足・計算例 31.

不確定性原理
エルミート変換 $\hat{X}$，$\hat{Y}$ について

$$\Delta X \Delta Y \geq \frac{1}{2} | \, \langle\psi|[\,\hat{X}, \hat{Y}\,]|\psi\rangle \, | \tag{3.2.67}$$

が成り立つ。ここで，$|\psi\rangle$ は $\langle\psi|\psi\rangle = 1$ を満たす任意のベクトルである。また，エルミート変換 $\hat{Z}$ に対して $\Delta Z = \sqrt{\langle\psi|\hat{Z}^2|\psi\rangle - \langle\psi|\hat{Z}|\psi\rangle^2}$ とおいた。
[(3.2.67) の証明] $\hat{A} = \hat{X} - \langle\psi|\hat{X}|\psi\rangle \, \hat{I}$，$\hat{B} = \hat{Y} - \langle\psi|\hat{Y}|\psi\rangle \, \hat{I}$ とおくと，$\hat{A}$，$\hat{B}$ は $\langle\psi|\hat{A}|\psi\rangle = 0$，$\langle\psi|\hat{B}|\psi\rangle = 0$ を満たすエルミート変換となる。また，$\Delta A = \Delta X$，$\Delta B = \Delta Y$，$[\,\hat{A}, \hat{B}\,] = [\,\hat{X}, \hat{Y}\,]$ より，$\hat{X}$，$\hat{Y}$ を $\hat{A}$，$\hat{B}$ に置き換えて (3.2.67) を示せばよい。$|a\rangle = \hat{A}\,|\psi\rangle$，$|b\rangle = \hat{B}\,|\psi\rangle$ とおくと，$(\Delta A)^2 = \langle\psi|\hat{A}^2|\psi\rangle = \langle a|a\rangle$，$(\Delta B)^2 = \langle\psi|\hat{B}^2|\psi\rangle = \langle b|b\rangle$ と書ける。したがって，シュワルツの不等式 (3.2.63) より，$(\Delta A)^2(\Delta B)^2 = \langle a|a\rangle\langle b|b\rangle \geq \langle a|b\rangle\langle b|a\rangle = |\,\langle a|b\rangle\,|^2 = |\,\langle\psi|\hat{A}\hat{B}|\psi\rangle\,|^2$ を得る。ここで，$|\,\langle\psi|\hat{A}\hat{B}|\psi\rangle\,|^2 = |\frac{1}{2}\,\langle\psi|(\hat{A}\hat{B} + \hat{B}\hat{A})|\psi\rangle + \frac{1}{2}\,\langle\psi|(\hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A})|\psi\rangle\,|^2$ であるが，$\langle\psi|(\hat{A}\hat{B} + \hat{B}\hat{A})|\psi\rangle$ は実数，$\langle\psi|(\hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A})|\psi\rangle$ は純虚数であるから，$|\frac{1}{2}\,\langle\psi|(\hat{A}\hat{B} + \hat{B}\hat{A})|\psi\rangle + \frac{1}{2}\,\langle\psi|(\hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A})|\psi\rangle\,|^2 = |\frac{1}{2}\,\langle\psi|(\hat{A}\hat{B} + \hat{B}\hat{A})|\psi\rangle\,|^2 + |\frac{1}{2}\,\langle\psi|(\hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A})|\psi\rangle\,|^2 \geq |\frac{1}{2}\,\langle\psi|(\hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A})|\psi\rangle\,|^2 = |\frac{1}{2}\,\langle\psi|[\,\hat{A}, \hat{B}\,]|\psi\rangle\,|^2$ となる。以上より，$\Delta A \Delta B \geq \frac{1}{2}|\,\langle\psi|[\,\hat{A}, \hat{B}\,]|\psi\rangle\,|$，つまり，$\Delta X \Delta Y \geq \frac{1}{2}|\,\langle\psi|[\,\hat{X}, \hat{Y}\,]|\psi\rangle\,|$ が示された。■

==========

[22] (3.2.63) もシュワルツの不等式とよびます。

3.3 正規変換の固有値問題

3.3.1 正規変換の不変部分空間

V を内積空間, W を V の部分空間, $\hat{X}$ を V の正規変換とすると, $\hat{X}(W) \subseteq W \Leftrightarrow \hat{X}^\dagger(W) \subseteq W$, つまり,

$$W \text{ は} \hat{X} \text{ の不変部分空間} \quad \Leftrightarrow \quad W \text{ は} \hat{X}^\dagger \text{の不変部分空間} \tag{3.3.1}$$

が成り立つ。あるいは, (3.2.27) より, $\hat{X}(W) \subseteq W \Leftrightarrow \hat{X}(W^\perp) \subseteq W^\perp$, つまり,

$$W \text{ は} \hat{X} \text{ の不変部分空間} \quad \Leftrightarrow \quad W^\perp \text{は} \hat{X} \text{ の不変部分空間} \tag{3.3.2}$$

である。W への正射影を $\hat{P}$, $W^\perp$ への正射影を $\hat{Q} = \hat{I} - \hat{P}$ とすると, (3.3.1), (3.3.2) は

$$\hat{X} = \hat{P}\hat{X}\hat{P} + \hat{Q}\hat{X}\hat{Q} \qquad \hat{X}^\dagger = \hat{P}\hat{X}^\dagger\hat{P} + \hat{Q}\hat{X}^\dagger\hat{Q} \tag{3.3.3}$$

と表せる。(3.3.3) より, $\hat{X}$, $\hat{X}^\dagger$ は $\hat{P}$, $\hat{Q}$ と可換であることがわかる。
[(3.3.3) の証明] W は $\hat{X}$ の不変部分空間であるから, (3.2.28) より,

$$\begin{aligned} \hat{X} &= \hat{P}\hat{X}\hat{P} + \hat{P}\hat{X}\hat{Q} + \hat{Q}\hat{X}\hat{Q} \\ \hat{X}^\dagger &= \hat{P}\hat{X}^\dagger\hat{P} + \hat{Q}\hat{X}^\dagger\hat{P} + \hat{Q}\hat{X}^\dagger\hat{Q} \end{aligned} \tag{3.3.4}$$

と表せる。したがって, (3.3.3) を示すには $\hat{P}\hat{X}\hat{Q} = \hat{0}$ をいえばよい。(3.3.4) より

$$\begin{aligned} \hat{P}\hat{X}\hat{X}^\dagger\hat{P} &= \hat{P}\hat{X}(\hat{P}+\hat{Q})\hat{X}^\dagger\hat{P} = \hat{P}\hat{X}\hat{P}\hat{X}^\dagger\hat{P} + \hat{P}\hat{X}\hat{Q}\hat{X}^\dagger\hat{P} \\ \hat{P}\hat{X}^\dagger\hat{X}\hat{P} &= \hat{P}\hat{X}^\dagger(\hat{P}+\hat{Q})\hat{X}\hat{P} = \hat{P}\hat{X}^\dagger\hat{P}\hat{X}\hat{P} \end{aligned} \tag{3.3.5}$$

となるが, $\hat{X}\hat{X}^\dagger = \hat{X}^\dagger\hat{X}$ より,

$$\hat{P}\hat{X}\hat{P}\hat{X}^\dagger\hat{P} + \hat{P}\hat{X}\hat{Q}\hat{X}^\dagger\hat{P} = \hat{P}\hat{X}^\dagger\hat{P}\hat{X}\hat{P} \tag{3.3.6}$$

である。トレースの性質 (1.1.29) より, (3.3.6) の両辺のトレースを計算すると, $\mathrm{tr}(\hat{P}\hat{X}\hat{P}\hat{X}^\dagger\hat{P}) + \mathrm{tr}(\hat{P}\hat{X}\hat{Q}\hat{X}^\dagger\hat{P}) = \mathrm{tr}(\hat{P}\hat{X}\hat{P}\hat{X}^\dagger\hat{P})$ となるから, $\mathrm{tr}(\hat{P}\hat{X}\hat{Q}\hat{X}^\dagger\hat{P}) = 0$ である。これを書き換えると,

$$\mathrm{tr}(\hat{P}\hat{X}\hat{Q}\hat{X}^\dagger\hat{P}) = \mathrm{tr}(\hat{P}\hat{X}\hat{Q}\hat{Q}\hat{X}^\dagger\hat{P}) = \mathrm{tr}(\hat{P}\hat{X}\hat{Q}(\hat{P}\hat{X}\hat{Q})^\dagger) = 0 \tag{3.3.7}$$

となるから, (3.2.10) の (4) より,

$$\hat{P}\hat{X}\hat{Q} = \hat{0} \tag{3.3.8}$$

を得る。以上より, (3.3.3) が示された。 ■

3.3.2 正規変換のスペクトル分解

正規変換 $\hat{X}$ は

$$\hat{X} \text{ は正規変換} \quad \Leftrightarrow \quad \hat{X} \text{ の固有ベクトルからなる正規直交基底をとれる} \tag{3.3.9}$$

という重要な性質をもつ。つまり, $\hat{X}$ が正規変換のときに限り, $\hat{X}\,|p_i\rangle = \xi_i\,|p_i\rangle$ $(i = 1, \cdots, n)$ を満たす $|p_i\rangle$ からなる $p = \{\,|p_1\rangle, \cdots, |p_n\rangle\}$ が V の正規直交基底となるようにできる。ここで，n は V の次元である。以下，正規変換の固有値，固有ベクトルに関するいくつかの基本的性質について述べ，それらをもとに (3.3.9) が成り立つことを示す。$\hat{X}$ が正規変換のとき，その固有値の 1 つを ξ とし，また，ξ に属する固有ベクトルを $|p\rangle$ とすると，

$$\hat{X}\,|p\rangle = \xi\,|p\rangle \qquad \Leftrightarrow \qquad \hat{X}^\dagger\,|p\rangle = \xi^*\,|p\rangle \tag{3.3.10}$$

あるいは，(3.3.10) の第 2 式はエルミート共役をとって，

$$\hat{X}\,|p\rangle = \xi\,|p\rangle \qquad \Leftrightarrow \qquad \langle p|\,\hat{X} = \xi\,\langle p| \tag{3.3.11}$$

が成り立つ。

[(3.3.10) の証明] $\hat{X}$ は正規変換だから，任意のベクトル $|a\rangle$ に対して (3.1.34)，つまり，$||\hat{X}\,|a\rangle\,|| = ||\hat{X}^\dagger\,|a\rangle\,||$ が成り立つ。したがって，$\hat{X}$ が正規変換のとき $\hat{X} - \xi\hat{I}$ も正規変換だから，$|a\rangle$ として $|p\rangle$ をとると，

$$||(\hat{X} - \xi\hat{I})\,|p\rangle\,|| = ||(\hat{X}^\dagger - \xi^*\hat{I})\,|p\rangle\,|| \tag{3.3.12}$$

である。一方，$\hat{X}\,|p\rangle = \xi\,|p\rangle$，つまり，$(\hat{X} - \xi\hat{I})\,|p\rangle = \mathbf{0}$ より，(3.3.12) の左辺は 0 である。よって，$(\hat{X}^\dagger - \xi^*\hat{I})\,|p\rangle = \mathbf{0}$，つまり

$$\hat{X}^\dagger\,|p\rangle = \xi^*\,|p\rangle \tag{3.3.13}$$

を得る。 ■

固有ベクトル $|p\rangle$ として正規化されたものをとると，$\hat{P} = |p\rangle\langle p|$ は $W = \mathrm{span}(\,|p\rangle)$ への正射影である。また，$\hat{Q} = \hat{I} - \hat{P}$ は W の直交補空間 $W^\perp = \mathrm{im}\,\hat{Q}$ への正射影である。W は明らかに $\hat{X}$ の不変部分空間であるから，$W^\perp$ も $\hat{X}$ の不変部分空間である。(3.3.3) より，あるいは，(3.3.11) より $\hat{X}\hat{P} = \hat{P}\hat{X} = \xi\hat{P}$ であるから，

$$\hat{X}\hat{P} = \hat{P}\hat{X} \qquad\qquad \hat{X}\hat{Q} = \hat{Q}\hat{X} \tag{3.3.14}$$

が成り立つ。$\hat{X}\hat{X}^\dagger = \hat{X}^\dagger\hat{X}$ および (3.3.14) より，$\hat{X}$，$\hat{X}^\dagger$，$\hat{P}$，$\hat{Q}$ はすべて互いに可換であるから，$\hat{P}\hat{X}$，$\hat{Q}\hat{X}$ も正規変換である。(3.3.10)，(3.3.11)，(3.3.14)，(3.3.15)

より，$\hat{X}$ はその固有ベクトルからなる正規直交基底 $p = \{ |p_1\rangle, \cdots, |p_n\rangle \}$ をとることができ，そのスペクトル分解は

$$\hat{X} = \xi_1 |p_1\rangle\langle p_1| + \cdots + \xi_n |p_n\rangle\langle p_n| \tag{3.3.15}$$

となる。また，(3.3.15) より，

$$\hat{X}^\dagger = \xi_1^* |p_1\rangle\langle p_1| + \cdots + \xi_n^* |p_n\rangle\langle p_n| \tag{3.3.16}$$

である。以上より，(3.3.9) が成り立つ。(3.3.15)，(3.3.16) より，$\hat{X}$ がエルミート変換 $(\hat{X}^\dagger = \hat{X})$ のとき，$\xi_i^* = \xi_i$，つまり，ξ_i は実数である。特に，ξ_i がすべて正のとき，エルミート変換 $\hat{X}$ は**正定値**であるという。$\hat{X}$ が歪エルミート変換 $(\hat{X}^\dagger = -\hat{X})$ のとき，$\xi_i^* = -\xi_i$，つまり，ξ_i は純虚数である。$\hat{X}$ がユニタリ変換 $(\hat{X}^\dagger = \hat{X}^{-1})$ のとき，$\xi_i^* = \xi_i^{-1}$，つまり，ξ_i は絶対値が 1 の複素数である。

[(3.3.15) の証明] まず，$V_1 = V$，$\hat{X}_1 = \hat{X}$ として，$\hat{X}_1$ の固有値の 1 つ ξ_1 を選ぶ。$\dim\ker(\hat{X}_1 - \xi_1 \hat{I}_{V_1}) \geq 1$ より，ξ_1 には少なくとも 1 つの固有ベクトルが属する[23]。これを正規化して $|p_1\rangle$ とし，$W_1 = \mathrm{span}(|p_1\rangle)$ とおくと，W_1 は明らかに $\hat{X}$ の不変部分空間である。したがって，(3.3.2) より $W_1^\perp$ も $\hat{X}_1$ の不変部分空間である。W_1，$W_1^\perp$ への正射影を $\hat{P}_1 (= |p_1\rangle\langle p_1|)$，$\hat{Q}_1 (= \hat{I}_{V_1} - \hat{P}_1)$ とすると，

$$\hat{X}_1 = \hat{P}_1 \hat{X}_1 + \hat{Q}_1 \hat{X}_1 = \xi_1 \hat{P}_1 + \hat{Q}_1 \hat{X}_1 \tag{3.3.17}$$

と表せる。次に，$V_2 = W_1^\perp$，$\hat{X}_2 = \hat{Q}_1 \hat{X}_1$ とおくと，$\hat{X}_2$ は V_2 の正規変換となる。$\hat{X}_2$ の固有値の 1 つ ξ_2 を選ぶ。$\dim\ker(\hat{X}_2 - \xi_2 \hat{I}_{V_2}) \geq 1$ より，ξ_2 には少なくとも 1 つの固有ベクトルが属する。これを正規化して $|p_2\rangle$ とし，$W_2 = \mathrm{span}(|p_2\rangle)$ とおくと，W_2 は明らかに $\hat{X}_2$ の不変部分空間である。したがって，(3.3.2) より，$W_2^\perp$ も $\hat{X}_2$ の不変部分空間である。W_2，$W_2^\perp$ への正射影を $\hat{P}_2 (= |p_2\rangle\langle p_2|)$，$\hat{Q}_2 (= \hat{I}_{V_2} - \hat{P}_2)$ とすると，

$$\hat{X}_2 = \hat{P}_2 \hat{X}_2 + \hat{Q}_2 \hat{X}_2 = \xi_2 \hat{P}_2 + \hat{Q}_2 \hat{X}_2 \tag{3.3.18}$$

と表せる。この手続き以下のように $k = 3, \cdots, n$ に対して繰り返す。$V_k = W_{k-1}^\perp$，$\hat{X}_k = \hat{Q}_{k-1} \hat{X}_{k-1}$ とおくと，$\hat{X}_k$ は V_k の正規変換となる。$\hat{X}_k$ の固有値の 1 つ ξ_k を選ぶ。$\dim\ker(\hat{X}_k - \xi_k \hat{I}_{V_k}) \geq 1$ より，ξ_k には少なくとも 1 つの固有ベクトルが属する。これを正規化して $|p_k\rangle$ とし，$W_k = \mathrm{span}(|p_k\rangle)$ とおくと，W_k は明らかに $\hat{X}_k$ の不変部分空間である。したがって，(3.3.2) より，$W_k^\perp$ も $\hat{X}_k$ の不変部分空間である。W_k，$W_k^\perp$ への正射影を $\hat{P}_k (= |p_k\rangle\langle p_k|)$，$\hat{Q}_k (= \hat{I}_{V_k} - \hat{P}_k)$ とすると，

$$\hat{X}_k = \hat{P}_k \hat{X}_k + \hat{Q}_k \hat{X}_k = \xi_k \hat{P}_k + \hat{Q}_k \hat{X}_k \tag{3.3.19}$$

[23] (2.4.24) で述べたように，任意の線形変換は少なくとも 1 つの固有ベクトルをもちます。

と表せる。$k=n$ のとき $W_n^{\perp}=\{\mathbf{0}\}$，つまり，$\hat{Q}_n=\hat{0}$ となることに注意せよ。以上より，$\hat{X}=\xi_1\hat{P}_1+\cdots+\xi_n\hat{P}_n$，つまり，

$$\hat{X}=\xi_1\left|p_1\right\rangle\!\left\langle p_1\right|+\cdots+\xi_n\left|p_n\right\rangle\!\left\langle p_n\right| \tag{3.3.20}$$

を得る。 ■

3.3.3 正規変換の極分解

正規変換 $\hat{X}$ の固有値を $\xi_i=x_i+iy_i$ と表し，

$$\begin{aligned}\hat{X}_{\mathrm{R}}&=x_1\left|p_1\right\rangle\!\left\langle p_1\right|+\cdots+x_n\left|p_n\right\rangle\!\left\langle p_n\right|\\ \hat{X}_{\mathrm{I}}&=y_1\left|p_1\right\rangle\!\left\langle p_1\right|+\cdots+y_n\left|p_n\right\rangle\!\left\langle p_n\right|\end{aligned} \tag{3.3.21}$$

とおくと，

$$\hat{X}=\hat{X}_{\mathrm{R}}+i\hat{X}_{\mathrm{I}} \tag{3.3.22}$$

と書ける。このとき，$\hat{X}_{\mathrm{R}}^{\dagger}=\hat{X}_{\mathrm{R}}$，$\hat{X}_{\mathrm{I}}^{\dagger}=\hat{X}_{\mathrm{I}}$，$[\,\hat{X}_{\mathrm{R}},\hat{X}_{\mathrm{I}}\,]=\hat{0}$ である。また，ξ_i を極形式により $\xi_i=r_ie^{i\theta_i}$ と表し，

$$\begin{aligned}\hat{R}&=r_1\left|p_1\right\rangle\!\left\langle p_1\right|+\cdots+r_n\left|p_n\right\rangle\!\left\langle p_n\right|\\ \hat{U}&=e^{i\theta_1}\left|p_1\right\rangle\!\left\langle p_1\right|+\cdots+e^{i\theta_n}\left|p_n\right\rangle\!\left\langle p_n\right|\end{aligned} \tag{3.3.23}$$

とおくと，

$$\hat{X}=\hat{R}\hat{U} \tag{3.3.24}$$

と書ける。(3.3.24) を $\hat{X}$ の**極分解**という。このとき，$\hat{R}^{\dagger}=\hat{R}$, $\hat{U}^{\dagger}=\hat{U}^{-1}$, $[\,\hat{R},\hat{U}\,]=\hat{0}$，$\hat{X}^{\dagger}\hat{X}=\hat{R}^2$ である。

3.3.4 正規変換の疑似逆変換

内積空間 V の線形変換 $\hat{X}^{+}$ が

$$\begin{aligned}&(1)\quad \hat{X}\hat{X}^{+}\hat{X}=\hat{X}\\ &(2)\quad \hat{X}^{+}\hat{X}\hat{X}^{+}=\hat{X}^{+}\\ &(3)\quad (\hat{X}\hat{X}^{+})^{\dagger}=\hat{X}\hat{X}^{+}\\ &(4)\quad (\hat{X}^{+}\hat{X})^{\dagger}=\hat{X}^{+}\hat{X}\end{aligned} \tag{3.3.25}$$

の 4 つの性質を満たすとき，$\hat{X}^+$ を $\hat{X}$ の**疑似逆変換**という。$\hat{X}^+$ の行列表現 X^+ を $\hat{X}$ の行列表現 X の**疑似逆行列**という[24]。任意の $\hat{X}$ に対して $\hat{X}^+$ は一意的に定まる。$\hat{X}$ が正則ならば $\hat{X}^+ = \hat{X}^{-1}$ である。(1) より $(\hat{X}\hat{X}^+)^2 = \hat{X}\hat{X}^+$ であり，(2) より $(\hat{X}^+\hat{X})^2 = \hat{X}^+\hat{X}$ であるから，(3)，(4) の性質とあわせると，$\hat{X}\hat{X}^+$，$\hat{X}^+\hat{X}$ は正射影である。特に，$\hat{X}$ が正規変換のとき，そのスペクトル分解を

$$\hat{X} = \sum_{i=1}^{n} \xi_i \left|p_i\right\rangle\!\left\langle p_i\right| = \sum_{i(\xi_i \neq 0)} \xi_i \left|p_i\right\rangle\!\left\langle p_i\right| \tag{3.3.26}$$

とすると，

$$\hat{X}^+ = \sum_{i(\xi_i \neq 0)} \frac{1}{\xi_i} \left|p_i\right\rangle\!\left\langle p_i\right| \tag{3.3.27}$$

である。このとき，

$$\hat{P} = \sum_{i(\xi_i \neq 0)} \left|p_i\right\rangle\!\left\langle p_i\right| \qquad \hat{Q} = \sum_{i(\xi_i = 0)} \left|p_i\right\rangle\!\left\langle p_i\right| \tag{3.3.28}$$

とおくと，これらは $\operatorname{im}\hat{X}$，$\ker\hat{X}$ への正射影であり，$\hat{I} = \hat{P} + \hat{Q}$，および，

$$\hat{X}\hat{X}^+ = \hat{X}^+\hat{X} = \hat{P} \qquad \hat{P}\hat{X} = \hat{X}\hat{P} = \hat{X} \qquad \hat{P}\hat{X}^+ = \hat{X}^+\hat{P} = \hat{X}^+ \tag{3.3.29}$$

$$\hat{Q}\hat{X} = \hat{X}\hat{Q} = \hat{0} \qquad \hat{Q}\hat{X}^+ = \hat{X}^+\hat{Q} = \hat{0} \tag{3.3.30}$$

を満たす。

与えられた正規変換 $\hat{X}$ とベクトル $\left|f\right\rangle$ に対し，非同次方程式

$$\hat{X}\left|u\right\rangle = \left|f\right\rangle \tag{3.3.31}$$

を解くことを考える。(3.3.31) の解 $\left|u\right\rangle$ は

$$\hat{P}\left|f\right\rangle = \left|f\right\rangle \qquad \text{つまり} \qquad \hat{Q}\left|f\right\rangle = \mathbf{0} \tag{3.3.32}$$

のときに限り存在する。このとき，

$$\left|u\right\rangle = \left|u_*\right\rangle + \hat{X}^+\left|f\right\rangle \tag{3.3.33}$$

である。ここで，$\left|u_*\right\rangle$ は非同次方程式 (3.3.31) に付随する同次方程式 $\hat{X}\left|u_*\right\rangle = \mathbf{0}$ の一般解であり，$\hat{X}^+\left|f\right\rangle$ は非同次方程式 (3.3.31) の特殊解である[25]。

==========

補足・計算例 32.

[24] ここで扱う疑似逆変換あるいは疑似逆行列は**ムーア–ペンローズ逆行列** として知られる一般化逆行列の一例となっています。

[25] 疑似逆変換 $\hat{X}^+$ は非同次線形微分方程式の理論で**グリーン関数**として知られているものと関係しています。

正規変換の固有値問題
正規変換の固有値問題についての 2 つの例を示す。例 1 は固有値に重根がない場合であり，例 2 は固有値に重根がある場合である。表現はある正規直交基底 $e = \{\,|e_1\rangle\,, \cdots\,, |e_n\rangle\}$ によるものとする。

例 1：固有値に重根がない場合[26]

$$X = \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{bmatrix} \tag{3.3.34}$$

(1) 固有値・固有ベクトル・固有空間

$$\begin{aligned} \det(X - \xi I) &= \det \begin{bmatrix} -\xi & 1 & 0 \\ 1 & -\xi & 1 \\ 0 & 1 & -\xi \end{bmatrix} = -\xi^3 + 2\xi \\ &= -\xi(\xi - \sqrt{2})(\xi + \sqrt{2}) = 0 \\ &\therefore \xi_1 = -\sqrt{2},\ \xi_2 = 0,\ \xi_3 = \sqrt{2} \quad \Rightarrow \quad \xi_{(1)} = -\sqrt{2},\ \xi_{(2)} = 0,\ \xi_{(3)} = \sqrt{2} \end{aligned} \tag{3.3.35}$$

・$\xi = \xi_{(1)}(= -\sqrt{2})$ のとき

$$(X - \xi_{(1)} I)\boldsymbol{c} = \begin{bmatrix} \sqrt{2} & 1 & 0 \\ 1 & \sqrt{2} & 1 \\ 0 & 1 & \sqrt{2} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} c_1 \\ c_2 \\ c_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \sqrt{2}c_1 + c_2 \\ c_1 + \sqrt{2}c_2 + c_3 \\ c_2 + \sqrt{2}c_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} \qquad \therefore \boldsymbol{p}_1 = \frac{1}{2} \begin{bmatrix} 1 \\ -\sqrt{2} \\ 1 \end{bmatrix} \tag{3.3.36}$$

$$W_{(1)} = \mathrm{span}(\boldsymbol{p}_1) \qquad \dim W_{(1)} = 1 \tag{3.3.37}$$

・$\xi = \xi_{(2)}(= 0)$ のとき

$$(X - \xi_{(2)} I)\boldsymbol{c} = \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} c_1 \\ c_2 \\ c_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} c_2 \\ c_1 + c_3 \\ c_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} \qquad \therefore \boldsymbol{p}_2 = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ -1 \end{bmatrix} \tag{3.3.38}$$

$$W_{(2)} = \mathrm{span}(\boldsymbol{p}_2) \qquad \dim W_{(2)} = 1 \tag{3.3.39}$$

・$\xi = \xi_{(3)}(= \sqrt{2})$ のとき

$$(X - \xi_{(3)} I)\boldsymbol{c} = \begin{bmatrix} -\sqrt{2} & 1 & 0 \\ 1 & -\sqrt{2} & 1 \\ 0 & 1 & -\sqrt{2} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} c_1 \\ c_2 \\ c_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -\sqrt{2}c_1 + c_2 \\ c_1 - \sqrt{2}c_2 + c_3 \\ c_2 - \sqrt{2}c_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} \qquad \therefore \boldsymbol{p}_3 = \frac{1}{2} \begin{bmatrix} 1 \\ \sqrt{2} \\ 1 \end{bmatrix} \tag{3.3.40}$$

$$W_{(3)} = \mathrm{span}(\boldsymbol{p}_3) \qquad \dim W_{(3)} = 1 \tag{3.3.41}$$

(2) スペクトル分解・固有射影

$$P = [\,\boldsymbol{p}_1\,\boldsymbol{p}_2\,\boldsymbol{p}_3\,] = \begin{bmatrix} 1/2 & 1/\sqrt{2} & 1/2 \\ -1/\sqrt{2} & 0 & 1/\sqrt{2} \\ 1/2 & -1/\sqrt{2} & 1/2 \end{bmatrix} \quad \Rightarrow \quad P^{-1} = P^\dagger = \begin{bmatrix} \boldsymbol{p}_1^\dagger \\ \boldsymbol{p}_2^\dagger \\ \boldsymbol{p}_3^\dagger \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1/2 & -1/\sqrt{2} & 1/2 \\ 1/\sqrt{2} & 0 & -1/\sqrt{2} \\ 1/2 & 1/\sqrt{2} & 1/2 \end{bmatrix} \tag{3.3.42}$$

[26](3.3.48) の行列は量子化学で**ヒュッケル法**によってアリルラジカルを扱う際に現れます。

$$
\begin{aligned}
P_{(1)} &= \boldsymbol{p}_1\boldsymbol{p}_1^\dagger = \begin{bmatrix} 1/2 \\ -1/\sqrt{2} \\ 1/2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1/2 & -1/\sqrt{2} & 1/2 \end{bmatrix} = \frac{1}{4}\begin{bmatrix} 1 & -\sqrt{2} & 1 \\ -\sqrt{2} & 2 & -\sqrt{2} \\ 1 & -\sqrt{2} & 1 \end{bmatrix} \\
P_{(2)} &= \boldsymbol{p}_2\boldsymbol{p}_2^\dagger = \begin{bmatrix} 1/\sqrt{2} \\ 0 \\ -1/\sqrt{2} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1/\sqrt{2} & 0 & -1/\sqrt{2} \end{bmatrix} = \frac{1}{4}\begin{bmatrix} 2 & 0 & -2 \\ 0 & 0 & 0 \\ -2 & 0 & 2 \end{bmatrix} \\
P_{(3)} &= \boldsymbol{p}_3\boldsymbol{p}_3^\dagger = \begin{bmatrix} 1/2 \\ 1/\sqrt{2} \\ 1/2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1/2 & 1/\sqrt{2} & 1/2 \end{bmatrix} = \frac{1}{4}\begin{bmatrix} 1 & \sqrt{2} & 1 \\ \sqrt{2} & 2 & \sqrt{2} \\ 1 & \sqrt{2} & 1 \end{bmatrix}
\end{aligned}
\tag{3.3.43}
$$

$$
\begin{aligned}
X &= \xi_1\boldsymbol{p}_1\boldsymbol{p}_1^\dagger + \xi_2\boldsymbol{p}_2\boldsymbol{p}_2^\dagger + \xi_3\boldsymbol{p}_3\boldsymbol{p}_3^\dagger = \xi_{(1)}P_{(1)} + \xi_{(2)}P_{(2)} + \xi_{(3)}P_{(3)} \\
&= -\sqrt{2}\cdot\frac{1}{4}\begin{bmatrix} 1 & -\sqrt{2} & 1 \\ -\sqrt{2} & 2 & -\sqrt{2} \\ 1 & -\sqrt{2} & 1 \end{bmatrix} + 0\cdot\frac{1}{4}\begin{bmatrix} 2 & 0 & -2 \\ 0 & 0 & 0 \\ -2 & 0 & 2 \end{bmatrix} + \sqrt{2}\cdot\frac{1}{4}\begin{bmatrix} 1 & \sqrt{2} & 1 \\ \sqrt{2} & 2 & \sqrt{2} \\ 1 & \sqrt{2} & 1 \end{bmatrix}
\end{aligned}
\tag{3.3.44}
$$

(3) 固有射影公式

$$
\begin{aligned}
P_{(1)} &= \frac{(X-\xi_{(2)}I)(X-\xi_{(3)}I)}{(\xi_{(1)}-\xi_{(2)})(\xi_{(1)}-\xi_{(3)})} = \frac{1}{4}\begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} -\sqrt{2} & 1 & 0 \\ 1 & -\sqrt{2} & 1 \\ 0 & 1 & -\sqrt{2} \end{bmatrix} = \frac{1}{4}\begin{bmatrix} 1 & -\sqrt{2} & 1 \\ -\sqrt{2} & 2 & -\sqrt{2} \\ 1 & -\sqrt{2} & 1 \end{bmatrix} \\
P_{(2)} &= \frac{(X-\xi_{(1)}I)(X-\xi_{(3)}I)}{(\xi_{(2)}-\xi_{(1)})(\xi_{(2)}-\xi_{(3)})} = -\frac{1}{2}\begin{bmatrix} \sqrt{2} & 1 & 0 \\ 1 & \sqrt{2} & 1 \\ 0 & 1 & \sqrt{2} \end{bmatrix}\begin{bmatrix} -\sqrt{2} & 1 & 0 \\ 1 & -\sqrt{2} & 1 \\ 0 & 1 & -\sqrt{2} \end{bmatrix} = \frac{1}{4}\begin{bmatrix} 2 & 0 & -2 \\ 0 & 0 & 0 \\ -2 & 0 & 2 \end{bmatrix} \\
P_{(3)} &= \frac{(X-\xi_{(1)}I)(X-\xi_{(2)}I)}{(\xi_{(3)}-\xi_{(1)})(\xi_{(3)}-\xi_{(2)})} = \frac{1}{4}\begin{bmatrix} \sqrt{2} & 1 & 0 \\ 1 & \sqrt{2} & 1 \\ 0 & 1 & \sqrt{2} \end{bmatrix}\begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{bmatrix} = \frac{1}{4}\begin{bmatrix} 1 & \sqrt{2} & 1 \\ \sqrt{2} & 2 & \sqrt{2} \\ 1 & \sqrt{2} & 1 \end{bmatrix}
\end{aligned}
\tag{3.3.45}
$$

(4) 疑似逆行列[27]

$$
X^+ = -\frac{1}{\sqrt{2}}\cdot\frac{1}{4}\begin{bmatrix} 1 & -\sqrt{2} & 1 \\ -\sqrt{2} & 2 & -\sqrt{2} \\ 1 & -\sqrt{2} & 1 \end{bmatrix} + \frac{1}{\sqrt{2}}\cdot\frac{1}{4}\begin{bmatrix} 1 & \sqrt{2} & 1 \\ \sqrt{2} & 2 & \sqrt{2} \\ 1 & \sqrt{2} & 1 \end{bmatrix} = \frac{1}{4}\begin{bmatrix} 0 & 2 & 0 \\ 2 & 0 & 2 \\ 0 & 2 & 0 \end{bmatrix} \tag{3.3.46}
$$

$$
XX^+ = X^+X = \frac{1}{4}\begin{bmatrix} 0 & 2 & 0 \\ 2 & 0 & 2 \\ 0 & 2 & 0 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{bmatrix} = \frac{1}{4}\begin{bmatrix} 2 & 0 & 2 \\ 0 & 4 & 0 \\ 2 & 0 & 2 \end{bmatrix} = P_{(1)} + P_{(3)} \tag{3.3.47}
$$

例 2：固有値に重根がある場合[28]

$$
X = \begin{bmatrix} 0 & 1 & 1 \\ 1 & 0 & 1 \\ 1 & 1 & 0 \end{bmatrix} \tag{3.3.48}
$$

[27] (3.3.34) の X は $\det X = 0$ からわかるように正則行列でないので，逆行列 X^{-1} は存在しません。

[28] (3.3.48) の行列は量子化学で**ヒュッケル法**によってシクロプロペニウムイオンを扱う際に現れます。

(1) 固有値・固有ベクトル・固有空間

$$\det(X-\xi I)=\det\begin{bmatrix}-\xi & 1 & 1\\ 1 & -\xi & 1\\ 1 & 1 & -\xi\end{bmatrix}=-\xi^3+2+3\xi=-(\xi+1)^2(\xi-2)=0$$
$$\therefore \xi_1=-1,\ \xi_2=-1,\ \xi_3=2 \quad\Rightarrow\quad \xi_{(1)}=-1\,(\text{重根}),\ \xi_{(2)}=2 \tag{3.3.49}$$

・$\xi=\xi_{(1)}(=-1\,(\text{重根}))$ のとき

$$(X-\xi_{(1)}I)\boldsymbol{c}=\begin{bmatrix}1&1&1\\1&1&1\\1&1&1\end{bmatrix}\begin{bmatrix}c_1\\c_2\\c_3\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}c_1+c_2+c_3\\c_1+c_2+c_3\\c_1+c_2+c_3\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}0\\0\\0\end{bmatrix}\quad\therefore \boldsymbol{p}_1=\frac{1}{\sqrt{6}}\begin{bmatrix}1\\-2\\1\end{bmatrix}\quad \boldsymbol{p}_2=\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{bmatrix}1\\0\\-1\end{bmatrix} \tag{3.3.50}$$

$$W_{(1)}=\mathrm{span}(\boldsymbol{p}_1,\boldsymbol{p}_2)\qquad \dim W_{(1)}=2 \tag{3.3.51}$$

・$\xi=\xi_{(2)}(=2)$ のとき

$$(X-\xi_{(2)}I)\boldsymbol{c}=\begin{bmatrix}-2&1&1\\1&-2&1\\1&1&-2\end{bmatrix}\begin{bmatrix}c_1\\c_2\\c_3\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}-2c_1+c_2+c_3\\c_1-2c_2+c_3\\c_1+c_2-2c_3\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}0\\0\\0\end{bmatrix}\quad\therefore \boldsymbol{p}_3=\frac{1}{\sqrt{3}}\begin{bmatrix}1\\1\\1\end{bmatrix} \tag{3.3.52}$$

$$W_{(2)}=\mathrm{span}(\boldsymbol{p}_3)\qquad \dim W_{(2)}=1 \tag{3.3.53}$$

(2) スペクトル分解・固有射影

$$P=[\,\boldsymbol{p}_1\,\boldsymbol{p}_2\,\boldsymbol{p}_3\,]=\begin{bmatrix}1/\sqrt{6}&1/\sqrt{2}&1/\sqrt{3}\\-2/\sqrt{6}&0&1/\sqrt{3}\\1/\sqrt{6}&-1/\sqrt{2}&1/\sqrt{3}\end{bmatrix}\quad\Rightarrow\quad P^{-1}=P^{\dagger}=\begin{bmatrix}\boldsymbol{p}_1^{\dagger}\\\boldsymbol{p}_2^{\dagger}\\\boldsymbol{p}_3^{\dagger}\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}1/\sqrt{6}&-2/\sqrt{6}&1/\sqrt{6}\\1/\sqrt{2}&0&-1/\sqrt{2}\\1/\sqrt{3}&1/\sqrt{3}&1/\sqrt{3}\end{bmatrix} \tag{3.3.54}$$

$$\begin{aligned}P_{(1)}&=\boldsymbol{p}_1\boldsymbol{p}_1^{\dagger}+\boldsymbol{p}_2\boldsymbol{p}_2^{\dagger}=\begin{bmatrix}1/\sqrt{6}\\-2/\sqrt{6}\\1/\sqrt{6}\end{bmatrix}\begin{bmatrix}\ 1/\sqrt{6}&-2/\sqrt{6}&1/\sqrt{6}\ \end{bmatrix}+\begin{bmatrix}1/\sqrt{2}\\0\\-1/\sqrt{2}\end{bmatrix}\begin{bmatrix}\ 1/\sqrt{2}&0&-1/\sqrt{2}\ \end{bmatrix}\\&=\frac{1}{6}\begin{bmatrix}1&-2&1\\-2&4&-2\\1&-2&1\end{bmatrix}+\frac{1}{4}\begin{bmatrix}2&0&-2\\0&0&0\\-2&0&2\end{bmatrix}=\frac{1}{3}\begin{bmatrix}2&-1&-1\\-1&2&-1\\-1&-1&2\end{bmatrix}\\P_{(2)}&=\boldsymbol{p}_3\boldsymbol{p}_3^{\dagger}=\begin{bmatrix}1/\sqrt{3}\\1/\sqrt{3}\\1/\sqrt{3}\end{bmatrix}\begin{bmatrix}\ 1/\sqrt{3}&1/\sqrt{3}&1/\sqrt{3}\ \end{bmatrix}=\frac{1}{3}\begin{bmatrix}1&1&1\\1&1&1\\1&1&1\end{bmatrix}\end{aligned} \tag{3.3.55}$$

$$\begin{aligned}X&=\xi_1\boldsymbol{p}_1\boldsymbol{p}_1^{\dagger}+\xi_2\boldsymbol{p}_2\boldsymbol{p}_2^{\dagger}+\xi_3\boldsymbol{p}_3\boldsymbol{p}_3^{\dagger}=\xi_{(1)}P_{(1)}+\xi_{(2)}P_{(2)}\\&=-1\cdot\frac{1}{3}\begin{bmatrix}2&-1&-1\\-1&2&-1\\-1&-1&2\end{bmatrix}+2\cdot\frac{1}{3}\begin{bmatrix}1&1&1\\1&1&1\\1&1&1\end{bmatrix}\end{aligned} \tag{3.3.56}$$

(3) 固有射影公式

$$
\begin{aligned}
P_{(1)} &= \frac{X-\xi_{(2)}I}{\xi_{(1)}-\xi_{(2)}} = \frac{1}{-1-2}\left(\begin{bmatrix}0&1&1\\1&0&1\\1&1&0\end{bmatrix} - 2\begin{bmatrix}1&0&0\\0&1&0\\0&0&1\end{bmatrix}\right) = \frac{1}{3}\begin{bmatrix}2&-1&-1\\-1&2&-1\\-1&-1&2\end{bmatrix} \\
P_{(2)} &= \frac{X-\xi_{(1)}I}{\xi_{(2)}-\xi_{(1)}} = \frac{1}{2-(-1)}\left(\begin{bmatrix}0&1&1\\1&0&1\\1&1&0\end{bmatrix} - (-1)\cdot\begin{bmatrix}1&0&0\\0&1&0\\0&0&1\end{bmatrix}\right) = \frac{1}{3}\begin{bmatrix}1&1&1\\1&1&1\\1&1&1\end{bmatrix}
\end{aligned}
\tag{3.3.57}
$$

(4) 疑似逆行列 (= 逆行列)[29]

$$
X^+ = X^{-1} = -1\cdot\frac{1}{3}\begin{bmatrix}2&-1&-1\\-1&2&-1\\-1&-1&2\end{bmatrix} + \frac{1}{2}\cdot\frac{1}{3}\begin{bmatrix}1&1&1\\1&1&1\\1&1&1\end{bmatrix} = \frac{1}{2}\begin{bmatrix}-1&1&1\\1&-1&1\\1&1&-1\end{bmatrix} \tag{3.3.58}
$$

$$
XX^+ = X^+X = \frac{1}{2}\begin{bmatrix}-1&1&1\\1&-1&1\\1&1&-1\end{bmatrix}\begin{bmatrix}0&1&1\\1&0&1\\1&1&0\end{bmatrix} = \begin{bmatrix}1&0&0\\0&1&0\\0&0&0\end{bmatrix} = P_{(1)}+P_{(2)} = I \tag{3.3.59}
$$

2 行 2 列のエルミート行列の固有値・固有ベクトル

2 行 2 列のエルミート行列

$$
X = \begin{bmatrix}\alpha & \gamma\\ \gamma^* & \beta\end{bmatrix} \qquad (\alpha,\,\beta : \text{実数}, \gamma : \text{複素数}) \tag{3.3.60}
$$

の固有値 $\xi_\pm$ および正規化された固有ベクトル $\boldsymbol{p}_\pm$ は，$\delta = (\alpha-\beta)/2$，$\Delta = \sqrt{\delta^2+|\gamma|^2}$ として，

$$
\xi_+ = \frac{\alpha+\beta}{2}+\Delta \qquad \boldsymbol{p}_+ = \begin{bmatrix}u\\v\end{bmatrix} \qquad \xi_- = \frac{\alpha+\beta}{2}-\Delta \qquad \boldsymbol{p}_- = \begin{bmatrix}-v^*\\u^*\end{bmatrix} \tag{3.3.61}
$$

である。ここで，$\theta = \arg\gamma$ として，

$$
u = \sqrt{\frac{1}{2}\left(1+\frac{\delta}{\Delta}\right)}\,e^{i\theta/2} \qquad v = \sqrt{\frac{1}{2}\left(1-\frac{\delta}{\Delta}\right)}\,e^{-i\theta/2} \tag{3.3.62}
$$

とおいた。

[(3.3.61) の証明] X を

$$
X = \frac{\alpha+\beta}{2}I_2 + A \qquad \text{ここで,}\quad I_2 = \begin{bmatrix}1&0\\0&1\end{bmatrix} \quad A = \begin{bmatrix}\delta & \gamma\\ \gamma^* & -\delta\end{bmatrix} \tag{3.3.63}
$$

と書き換え，A の固有値・固有ベクトルを求めればよい。つまり，X の固有値 $\xi = \xi_\pm$ は A の固有値 $\lambda = \lambda_\pm$ に $(\alpha+\beta)/2$ を加えたものであり，また，X の固有ベクトル $\boldsymbol{p} = \boldsymbol{p}_\pm$ は A の固有ベクトルと同じである。まず，固有値を求めると，

$$
|A-\lambda I_2| = \begin{bmatrix}\delta-\lambda & \gamma\\ \gamma^* & -\delta-\lambda\end{bmatrix} = \lambda^2-\delta^2-|\gamma|^2 = 0 \tag{3.3.64}
$$

[29] (3.3.48) の X は $\det X \neq 0$ からわかるように正則行列なので，逆行列 X^{-1} が存在し疑似逆行列 X^+ と一致します。

より，

$$\lambda_\pm = \pm\sqrt{\delta^2 + |\gamma|^2} = \pm\Delta \qquad\qquad \xi_\pm = \frac{\alpha+\beta}{2} \pm \Delta \tag{3.3.65}$$

である。次に固有ベクトルを求める。

・$\xi = \xi_+$，つまり，$\lambda = \lambda_+ = \Delta$ のとき

$$(A - \lambda_+ I_2)\boldsymbol{p}_+ = \begin{bmatrix} \delta - \Delta & \gamma \\ \gamma^* & -\delta - \Delta \end{bmatrix} \begin{bmatrix} c_1 \\ c_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} (\delta - \Delta)c_1 + \gamma c_2 \\ \gamma^* c_1 - (\delta + \Delta)c_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \end{bmatrix} \tag{3.3.66}$$

より，

$$\begin{aligned} c_1 : c_2 &= \gamma : \Delta - \delta = \sqrt{\Delta^2 - \delta^2}\, e^{i\theta} : \Delta - \delta = \sqrt{\Delta + \delta}\, e^{i\theta/2} : \sqrt{\Delta - \delta}\, e^{-i\theta/2} \\ &= \sqrt{\frac{1}{2}\left(1 + \frac{\delta}{\Delta}\right)}\, e^{i\theta/2} : \sqrt{\frac{1}{2}\left(1 - \frac{\delta}{\Delta}\right)}\, e^{-i\theta/2} = u : v \qquad \therefore \boldsymbol{p}_+ = \begin{bmatrix} u \\ v \end{bmatrix} \end{aligned} \tag{3.3.67}$$

を得る。

・$\xi = \xi_-$，つまり，$\lambda = \lambda_- = -\Delta$ のとき

$$(A - \lambda_- I_2)\boldsymbol{p}_- = \begin{bmatrix} \delta + \Delta & \gamma \\ \gamma^* & -\delta + \Delta \end{bmatrix} \begin{bmatrix} c_1 \\ c_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} (\delta + \Delta)c_1 + \gamma c_2 \\ \gamma^* c_1 - (\delta - \Delta)c_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \end{bmatrix} \tag{3.3.68}$$

より，

$$\begin{aligned} c_1 : c_2 &= -\gamma : \Delta + \delta = -\sqrt{\Delta^2 - \delta^2}\, e^{i\theta} : \Delta + \delta = -\sqrt{\Delta - \delta}\, e^{i\theta/2} : \sqrt{\Delta + \delta}\, e^{-i\theta/2} \\ &= -\sqrt{\frac{1}{2}\left(1 - \frac{\delta}{\Delta}\right)}\, e^{i\theta/2} : \sqrt{\frac{1}{2}\left(1 + \frac{\delta}{\Delta}\right)}\, e^{-i\theta/2} = -v^* : u^* \qquad \therefore \boldsymbol{p}_- = \begin{bmatrix} -v^* \\ u^* \end{bmatrix} \end{aligned} \tag{3.3.69}$$

を得る。以上より，(3.3.61) が示された。 ■

一般化固有値問題

A，B を与えられた 2 つの n 次正方行列とし，これらのうち B は正定値エルミート行列であるとする[30]。このとき，

$$A\boldsymbol{x} = \lambda B\boldsymbol{x} \tag{3.3.70}$$

を満たす λ，$\boldsymbol{x}$ を求める問題を**一般化固有値問題**という。まず，B の固有ベクトルからなる正規直交基底によって (3.3.70) を表現すると，

$$\begin{bmatrix} a_{11} & \cdots & a_{1n} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{n1} & \cdots & a_{nn} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ \vdots \\ x_n \end{bmatrix} = \lambda \begin{bmatrix} \beta_1 & & O \\ & \ddots & \\ O & & \beta_n \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ \vdots \\ x_n \end{bmatrix} \tag{3.3.71}$$

と書ける。ここで，$\beta_i\,(i = 1, \cdots, n)$ は B の固有値で，すべて正の実数である。行列 X およびベクトル $\boldsymbol{p}$ を

$$X = \begin{bmatrix} \frac{1}{\sqrt{\beta_1}} & & O \\ & \ddots & \\ O & & \frac{1}{\sqrt{\beta_n}} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a_{11} & \cdots & a_{1n} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{n1} & \cdots & a_{nn} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \frac{1}{\sqrt{\beta_1}} & & O \\ & \ddots & \\ O & & \frac{1}{\sqrt{\beta_n}} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{a_{11}}{\sqrt{\beta_1\beta_1}} & \cdots & \frac{a_{1n}}{\sqrt{\beta_1\beta_n}} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{a_{n1}}{\sqrt{\beta_n\beta_1}} & \cdots & \frac{a_{nn}}{\sqrt{\beta_n\beta_n}} \end{bmatrix} \tag{3.3.72}$$

[30] B が正定値エルミート行列でなくても A が正定値エルミート行列であれば，A と B を入れ替えて $1/\lambda$ をあらためて λ とおけば同様の議論ができます。ただし，A も B も正定値エルミート行列でない場合はここで述べるような扱いはできません。

および

$$\boldsymbol{p} = \begin{bmatrix} p_1 \\ \vdots \\ p_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \sqrt{\beta_1} & & O \\ & \ddots & \\ O & & \sqrt{\beta_n} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ \vdots \\ x_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \sqrt{\beta_1} x_1 \\ \vdots \\ \sqrt{\beta_n} x_n \end{bmatrix} \tag{3.3.73}$$

とおくと，(3.3.70) は

$$X\boldsymbol{p} = \lambda \boldsymbol{p} \tag{3.3.74}$$

と表せる[31]。(3.3.74) を満たす λ，$\boldsymbol{p}$ は通常の固有値問題の解法によって得られるから，一般化固有値問題 (3.3.70) の λ は X の固有値であり，また，$\boldsymbol{x}$ は X の固有ベクトル $\boldsymbol{p}$ を用いて，

$$\boldsymbol{x} = \begin{bmatrix} x_1 \\ \vdots \\ x_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{1}{\sqrt{\beta_1}} & & O \\ & \ddots & \\ O & & \frac{1}{\sqrt{\beta_n}} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} p_1 \\ \vdots \\ p_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{1}{\sqrt{\beta_1}} p_1 \\ \vdots \\ \frac{1}{\sqrt{\beta_n}} p_n \end{bmatrix} \tag{3.3.75}$$

によって求められる。

巡回演算子の固有値問題

内積空間 V において，正規直交基底 $e = \{ |e_1\rangle, \cdots, |e_n\rangle \}$ により

$$\hat{C} = |e_2\rangle\langle e_1| + |e_3\rangle\langle e_2| + \cdots + |e_n\rangle\langle e_{n-1}| + |e_1\rangle\langle e_n| \tag{3.3.76}$$

および

$$\hat{C}^\dagger = |e_1\rangle\langle e_2| + |e_2\rangle\langle e_3| + \cdots + |e_{n-1}\rangle\langle e_n| + |e_n\rangle\langle e_1| \tag{3.3.77}$$

によって定義されるユニタリ変換 $\hat{C}$，$\hat{C}^\dagger$ を**巡回演算子**という。(3.3.76)，(3.3.77) より，

$$\hat{C}\,|e_l\rangle = |e_{l+1}\rangle \qquad \hat{C}^\dagger\,|e_l\rangle = |e_{l-1}\rangle \qquad (l = 1, \cdots, n) \tag{3.3.78}$$

である。ただし，**周期的境界条件** $|e_0\rangle = |e_n\rangle$，$|e_{n+1}\rangle = |e_1\rangle$ を課するものとする。ユニタリ変換は正規変換であるから，$\hat{C}$ の固有値を ξ_j とすると，$\hat{C}^\dagger$ の固有値は ξ_j^* であり，固有ベクトルは ξ_j と ξ_j^* に対して共通にとれる。$\hat{C}$，$\hat{C}^\dagger$ の固有値 ξ_j，ξ_j^* およびこれらに共通の正規化された固有ベクトル $|p_j\rangle$ は

$$\text{固有値：} \begin{cases} \xi_j = e^{-i\frac{2\pi j}{n}} \\ \xi_j^* = e^{i\frac{2\pi j}{n}} \end{cases} \qquad \text{固有ベクトル：} |p_j\rangle = \frac{1}{\sqrt{n}} \sum_{l=1}^{n} e^{i\frac{2\pi j}{n} l} |e_l\rangle \qquad (j = 0, \cdots, n-1) \tag{3.3.79}$$

で与えられる[32]。

[(3.3.79) の証明] $\hat{C}$ の固有値を ξ，固有ベクトルを $|p\rangle$ とすると，

$$\hat{C}\,|p\rangle = \xi\,|p\rangle \tag{3.3.80}$$

[31] A がエルミート行列のときは X もエルミート行列になります。

[32] 巡回演算子は結晶の電子状態についての基本定理である**ブロッホの定理**に関連して並進演算子として用いられます。このとき，$|p_j\rangle$ は**ブロッホ関数**とよばれ，(3.3.79) のように $|e_l\rangle$ の係数に $e^{i\frac{2\pi j}{n} l}$ の因子が現れます。この因子の形を優先したいという理由で，ξ_j を $e^{i\frac{2\pi j}{n}}$ ではなく $e^{-i\frac{2\pi j}{n}}$ と表しています。

であるから,

$$\hat{C}^n \left|p\right\rangle = \xi^n \left|p\right\rangle \tag{3.3.81}$$

となる。一方,

$$\hat{C}^n = \hat{I} \tag{3.3.82}$$

であるから,

$$\xi^n = 1 \tag{3.3.83}$$

でなければならない。(3.3.83) より，ξ は 1 の n 乗根

$$\xi_j = e^{-i\frac{2\pi j}{n}} \quad (j = 0, \cdots, n-1) \tag{3.3.84}$$

である。$\xi = \xi_j$ のとき，$\hat{C}\left|p_j\right\rangle = \xi_j \left|p_j\right\rangle$ より,

$$\begin{aligned} &\left|e_2\right\rangle\!\left\langle e_1\right|p_j\rangle + \left|e_3\right\rangle\!\left\langle e_2\right|p_j\rangle + \cdots + \left|e_n\right\rangle\!\left\langle e_{n-1}\right|p_j\rangle + \left|e_1\right\rangle\!\left\langle e_n\right|p_j\rangle \\ &= \xi_j \left|e_1\right\rangle\!\left\langle e_1\right|p_j\rangle + \xi_j \left|e_2\right\rangle\!\left\langle e_2\right|p_j\rangle + \cdots + \xi_j \left|e_{n-1}\right\rangle\!\left\langle e_{n-1}\right|p_j\rangle + \xi_j \left|e_n\right\rangle\!\left\langle e_n\right|p_j\rangle \end{aligned} \tag{3.3.85}$$

となるから,

$$\left\langle e_1\right|p_j\rangle : \left\langle e_2\right|p_j\rangle : \cdots : \left\langle e_{n-1}\right|p_j\rangle : \left\langle e_n\right|p_j\rangle = \xi_j^{-1} : \xi_j^{-2} : \cdots : \xi_j^{-(n-1)} : \xi_j^{-n} \tag{3.3.86}$$

である。したがって，固有値 ξ_j に属する正規化された固有ベクトルとして

$$\left|p_j\right\rangle = \frac{1}{\sqrt{n}} \sum_{l=1}^{n} e^{i\frac{2\pi j}{n}l} \left|e_l\right\rangle \quad (j = 0, \cdots, n-1) \tag{3.3.87}$$

を得る。以上より，(3.3.79) が示された。 ■

==========

第 4 章　テンソル積

本章では与えられた複数の線形空間からテンソル積とよばれる新たな線形空間を構成する方法について述べる。物理では複数の自由度を有する系を対象とすることがほとんどであるが，このような多自由度系に対して線形代数を応用するにはテンソル積が必要となる。なお，本章以降は物理での慣習に従い線形変換を線形演算子あるいは単に演算子とよぶことにする。また，生成消滅演算子については該当する記述が数学の教科書に見当たらないため，物理での流儀に従って述べる。

4.1　テンソル積

4.1.1　基底・双対基底・線形演算子

2 つの線形空間 V と W が与えられたとき，これらから新たな線形空間である**テンソル積** $V \otimes W$ を以下のように構成する。V の基底を $e = \{\, |e_1\rangle, \cdots, |e_n\rangle \}$，$W$ の基底を $f = \{\, |f_1\rangle, \cdots, |f_m\rangle \}$ とするとき，$V \otimes W$ は $e \otimes f = \{\, |e_i f_k\rangle \mid i = 1, \cdots, n; k = 1, \cdots, m \}$ を基底とする mn 次元の線形空間である。必要に応じて $|e_i f_k\rangle$ を $|e_i\rangle \otimes |f_k\rangle$ と表して用いることにする[1]。ここで，添え字 i，k は**辞書式順序**，つまり，$(i,k) = (1,1), \cdots, (1,m), (2,1), \cdots, (2,m), \cdots, (n,1), \cdots, (n,m)$ の順序で配列されているとする[2]。このとき，

$$|e_i\rangle \otimes |\, f\,] = [\ |e_i f_1\rangle \ \cdots \ |e_i f_m\rangle\,] \tag{4.1.1}$$

とおいて

$$|\, e\, f\,] = [\ |e_1\rangle \otimes |\, f\,] \ \cdots \ |e_n\rangle \otimes |\, f\,]\,] \tag{4.1.2}$$

[1]むしろ数学では $|e_i\rangle \otimes |f_k\rangle$ のように表す ($|\cdot\rangle$ は使いませんが…) のが普通ですが，本書では主に $|e_i f_k\rangle$ を用いることにします。物理では $|e_i\rangle \otimes |f_k\rangle$ の $\otimes$ を書かずに $|e_i\rangle\,|f_k\rangle$ のように表すこともあります。

[2]基底を定義する際にはそれを構成するベクトルの順序も定める必要があります。本書では数学や物理に限らず広く使われている辞書式順序を採用することにします。

と略記する。$V \otimes W$ のベクトル $|z\rangle$ は

$$|z\rangle = \sum_{ik} z_{ik} \, |e_i f_k\rangle = |\, e\, f\,]\boldsymbol{z} \tag{4.1.3}$$

のように表せる[3]。基底 e, f の双対基底を $\varepsilon = \{\, \langle\varepsilon_1| \,, \cdots \,, \langle\varepsilon_n|\}, \varphi = \{\, \langle\varphi_1| \,, \cdots \,, \langle\varphi_m|\}$ とするとき，基底 $e \otimes f$ の双対基底を $\varepsilon \otimes \varphi = \{\, \langle\varepsilon_i\varphi_k| \mid i = 1, \cdots, n; k = 1, \cdots, m\}$ と表す。$\langle\varepsilon_i\varphi_k|$ についても必要に応じて $\langle\varepsilon_i| \otimes \langle\varphi_k|$ と表して用いることにする。双対基底 $\varepsilon \otimes \varphi$ は $V \otimes W$ の双対空間 $V^* \otimes W^*$ の基底である。$\langle\varepsilon_i\varphi_k|$ も辞書式順序で配列されているから，

$$\langle\varepsilon_i| \otimes [\, \varphi\, | = \begin{bmatrix} \langle\varepsilon_i\varphi_1| \\ \vdots \\ \langle\varepsilon_i\varphi_m| \end{bmatrix} \tag{4.1.4}$$

とおいて

$$[\, \varepsilon\, \varphi\, | = \begin{bmatrix} \langle\varepsilon_1| \otimes [\, \varphi\, | \\ \vdots \\ \langle\varepsilon_n| \otimes [\, \varphi\, | \end{bmatrix} \tag{4.1.5}$$

のように略記する。$V^* \otimes W^*$ の線形形式 $\langle\zeta|$ は

$$\langle\zeta| = \sum_{ik} \zeta_{ik} \, \langle\varepsilon_i\varphi_k| = \boldsymbol{\zeta}[\, \varepsilon\, \varphi\, | \tag{4.1.6}$$

のように表せる。基底 $e \otimes f$ と双対基底 $\varepsilon \otimes \varphi$ は

$$\langle\varepsilon_i\varphi_k|e_j f_l\rangle = \delta_{ij}\delta_{kl} \tag{4.1.7}$$

を満たすから，$\langle\zeta|$ と $|z\rangle$ のペアリングは

$$\langle\zeta|z\rangle = \sum_{ik} \zeta_{ik} z_{ik} \tag{4.1.8}$$

と表せる。また，基底 $e \otimes f$ に関する完全性関係は

$$\hat{I}_{V\otimes W} = \sum_{ik} |e_i f_k\rangle\langle\varepsilon_i\varphi_k| \tag{4.1.9}$$

である。ここで，$\hat{I}_{V\otimes W}$ は $V \otimes W$ の恒等演算子である。

[3] この章以降，和の記号の範囲を明示していない場合はすべてについて和をとるものとします。

V のベクトル $|v\rangle$ と W のベクトル $|w\rangle$ のテンソル積 $|vw\rangle$ を

$$|vw\rangle = \sum_{ik} v_i w_k \, |e_i f_k\rangle \tag{4.1.10}$$

によって定義する。ここで，$v_i = \langle \varepsilon_i | v \rangle$，$w_k = \langle \varphi_k | w \rangle$ である。必要に応じて $|vw\rangle$ を $|v\rangle \otimes |w\rangle$ と表して用いることにする[4]。この記法によると，

$$\begin{aligned}
(\,|v\rangle + |v'\rangle) \otimes |w\rangle &= |v\rangle \otimes |w\rangle + |v'\rangle \otimes |w\rangle \\
|v\rangle \otimes (\,|w\rangle + |w'\rangle) &= |v\rangle \otimes |w\rangle + |v\rangle \otimes |w'\rangle \\
(\lambda\,|v\rangle) \otimes |w\rangle &= \lambda(\,|v\rangle \otimes |w\rangle) \\
|v\rangle \otimes (\lambda\,|w\rangle) &= \lambda(\,|v\rangle \otimes |w\rangle)
\end{aligned} \tag{4.1.11}$$

が成り立つことがわかる[5]。(4.1.11) を**双線形性**という。

V の演算子 $\hat{X}$ と W の演算子 $\hat{Y}$ のテンソル積 $\hat{X} \otimes \hat{Y}$ を

$$\hat{X} \otimes \hat{Y} = \sum_{ijkl} X_{ij} Y_{kl} \, |e_i f_k\rangle\langle \varepsilon_j \varphi_l| \tag{4.1.12}$$

によって定義する[6]。ここで，$X_{ij} = \langle \varepsilon_i | \hat{X} | e_j \rangle$，$Y_{kl} = \langle \varphi_k | \hat{Y} | f_l \rangle$ である。特に，

$$|e_i\rangle\langle \varepsilon_j| \otimes |f_k\rangle\langle \varphi_l| = |e_i f_k\rangle\langle \varepsilon_j \varphi_l| \tag{4.1.13}$$

である。また，(4.1.12) により，トレースについて

$$\mathrm{tr}(\hat{X} \otimes \hat{Y}) = \mathrm{tr}\,\hat{X}\,\mathrm{tr}\,\hat{Y} \tag{4.1.14}$$

が成り立つ。(4.1.9) と (4.1.12) を比べると，$\hat{I}_V$，$\hat{I}_W$ を V，W の恒等演算子として，

$$\hat{I}_{V\otimes W} = \hat{I}_V \otimes \hat{I}_W \tag{4.1.15}$$

と書けることがわかる。また，$\hat{X}$，$\hat{Y}$ を $V \otimes W$ の演算子とみると，

$$\hat{X} = \sum_{ijk} X_{ij} \, |e_i f_k\rangle\langle \varepsilon_j \varphi_k| \qquad \hat{Y} = \sum_{ikl} Y_{kl} \, |e_i f_k\rangle\langle \varepsilon_i \varphi_l| \tag{4.1.16}$$

---

[4] $V \otimes W$ のベクトルはいつも $|v\rangle \otimes |w\rangle$ の形のベクトルの線形結合として表されますが，必ずしも $|v\rangle \otimes |w\rangle$ の形に書けるわけではありません。$|v\rangle \otimes |w\rangle$ の形に書けない $V \otimes W$ のベクトルは量子力学で**量子もつれ**あるいは**量子エンタングルメント**の状態を表します。

[5] $|v\rangle$ と $|w\rangle$ を与えれば $|vw\rangle$ は一意的に決まりますが，$|vw\rangle$ を与えても $|v\rangle$ と $|w\rangle$ は一意的には決まりません。このことは例えば $(\lambda\,|v\rangle) \otimes |w\rangle = |v\rangle \otimes (\lambda\,|w\rangle)$ であることからもわかります。

[6] (2.2.6) で定義した同じ線形空間の演算子の積と違って，$\hat{X} \otimes \hat{Y}$ は異なる線形空間の演算子の積だということに注意しましょう。

である。(4.1.16) の $\hat{X}$，$\hat{Y}$ は略さずに書けば $\hat{X}\otimes\hat{I}_W$，$\hat{I}_V\otimes\hat{Y}$ のことであるが，混乱の生じない限り恒等演算子の部分は省略することにする。(4.1.10) と (4.1.12) より $\hat{X}\otimes\hat{Y}\,|vw\rangle=\sum_{ijkl}X_{ij}v_jY_{kl}w_l\,|e_if_k\rangle$ であるから，

$$\hat{X}\otimes\hat{Y}\,|vw\rangle=\hat{X}\,|v\rangle\otimes\hat{Y}\,|w\rangle \tag{4.1.17}$$

が成り立つ。また，基底 $e\otimes f$ による $\hat{X}\otimes\hat{Y}$ の行列表現は

$$[\,\varepsilon\,\varphi\,|\hat{X}\otimes\hat{Y}|\,e\,f\,]=\begin{bmatrix}X_{11}Y & \cdots & X_{1n}Y\\ \vdots & \ddots & \vdots\\ X_{n1}Y & \cdots & X_{nn}Y\end{bmatrix} \tag{4.1.18}$$

と表せる。ここで，$Y=[\,\varphi\,|\hat{Y}|\,f\,]$ である。(4.1.18) を X と Y の**クロネッカー積**という。これをを $X\otimes Y$ によって表すことにする[7]。

[(4.1.18) の証明] (4.1.2)，(4.1.5)，(4.1.17) より，

$$\begin{aligned}
[\,\varepsilon\,\varphi\,|\hat{X}\otimes\hat{Y}|\,e\,f\,]&=\begin{bmatrix}\langle\varepsilon_1|\otimes[\,\varphi\,|\\ \vdots\\ \langle\varepsilon_n|\otimes[\,\varphi\,|\end{bmatrix}\hat{X}\otimes\hat{Y}[\,|e_1\rangle\otimes|\,f\,]\cdots\ |e_n\rangle\otimes|\,f\,]]\\
&=\begin{bmatrix}\langle\varepsilon_1|\otimes[\,\varphi\,|\\ \vdots\\ \langle\varepsilon_n|\otimes[\,\varphi\,|\end{bmatrix}[\,\hat{X}\,|e_1\rangle\otimes\hat{Y}|\,f\,]\cdots\hat{X}\,|e_n\rangle\otimes\hat{Y}|\,f\,]]\\
&=\begin{bmatrix}\langle\varepsilon_1|\hat{X}|e_1\rangle\,[\,\varphi\,|\hat{Y}|\,f\,] & \cdots & \langle\varepsilon_1|\hat{X}|e_n\rangle\,[\,\varphi\,|\hat{Y}|\,f\,]\\ \vdots & \ddots & \vdots\\ \langle\varepsilon_n|\hat{X}|e_1\rangle\,[\,\varphi\,|\hat{Y}|\,f\,] & \cdots & \langle\varepsilon_n|\hat{X}|e_n\rangle\,[\,\varphi\,|\hat{Y}|\,f\,]\end{bmatrix}\\
&=\begin{bmatrix}X_{11}Y & \cdots & X_{1n}Y\\ \vdots & \ddots & \vdots\\ X_{n1}Y & \cdots & X_{nn}Y\end{bmatrix}
\end{aligned} \tag{4.1.19}$$

を得る。 ■

4.1.2 内積とエルミート共役

線形空間 V，W がともに内積空間のとき，テンソル積 $V\otimes W$ の内積を

$$(\,|vw\rangle\,,\,|v'w'\rangle)=(\,|v\rangle\,,\,|v'\rangle)_V(\,|w\rangle\,,\,|w'\rangle)_W \tag{4.1.20}$$

[7] $\hat{X}\otimes\hat{Y}$ の行列表現がクロネッカー積 (4.1.18) の形に書けるためには，基底 $e\otimes f$ を構成するベクトルが辞書式順序で配列されていなければなりません。

によって定義する[8]。基底 $e \otimes f$ に関する計量 G はその (ik, jl) 成分が

$$(\,|e_i f_k\rangle\,,\,|e_j f_l\rangle) = (\,|e_i\rangle\,,\,|e_j\rangle)_V(\,|f_k\rangle\,,\,|f_l\rangle)_W \tag{4.1.21}$$

によって与えられる mn 次の正方行列となる。つまり，V，W の基底 e，f に関する計量を G_V，G_W として，$G = G_V \otimes G_W$ である。$V \otimes W$ のベクトル $|z\rangle = |\,e\,f\,]\boldsymbol{z}$ に対し，そのエルミート共役 $|z\rangle^\dagger$，つまり，$\langle z|$ を

$$\langle z| = \boldsymbol{z}^\dagger G[\,\varepsilon\,\varphi\,| \tag{4.1.22}$$

によって定義する。$[\,e\,f\,|$ を

$$[\,e\,f\,| = G[\,\varepsilon\,\varphi\,| \tag{4.1.23}$$

とおくと

$$\langle z| = \boldsymbol{z}^\dagger[\,e\,f\,| \tag{4.1.24}$$

と表せる。$V^* \otimes W^*$ の線形形式 $\langle\zeta| = \boldsymbol{\zeta}[\,\varepsilon\,\varphi\,|$ に対し，そのエルミート共役 $\langle\zeta|^\dagger$，つまり，$|\zeta\rangle$ を

$$|\zeta\rangle = |\,e\,f\,]G^{-1}\boldsymbol{\zeta}^\dagger \tag{4.1.25}$$

によって定義する。$|\,\varepsilon\,\varphi\,]$ を

$$|\,\varepsilon\,\varphi\,] = |\,e\,f\,]G^{-1} \tag{4.1.26}$$

とおくと

$$|\zeta\rangle = |\,\varepsilon\,\varphi\,]\boldsymbol{\zeta}^\dagger \tag{4.1.27}$$

と表せる。$V \otimes W$ の演算子 $\hat{Z}$ のエルミート共役 $\hat{Z}^\dagger$ を

$$(\hat{Z}\,|z\rangle\,,\,|z'\rangle) = (\,|z\rangle\,,\hat{Z}^\dagger\,|z'\rangle) \tag{4.1.28}$$

によって定義する。この定義により

$$(\hat{X} \otimes \hat{Y})^\dagger = \hat{X}^\dagger \otimes \hat{Y}^\dagger \tag{4.1.29}$$

[8] $V \otimes W$ のベクトルは $|vw\rangle$ の形のベクトルの線形結合で書けるので，(4.1.20) あるいは (4.1.21) によって $V \otimes W$ の内積は完全に定まります。

が成り立つ。

[(4.1.29) の証明] (4.1.17)，(4.1.20)，(4.1.28) より，

$$
\begin{aligned}
&(\hat{X}\otimes\hat{Y}\,|vw\rangle\,,\,|v'w'\rangle) = (\hat{X}\,|v\rangle\otimes\hat{Y}\,|w\rangle\,,\,|v'\rangle\otimes\,|w'\rangle)\\
&= (\hat{X}\,|v\rangle\,,\,|v'\rangle)_V(\hat{Y}\,|w\rangle\,,\,|w'\rangle)_W = (\,|v\rangle\,,\hat{X}^\dagger\,|v'\rangle)_V(\,|w\rangle\,,\hat{Y}^\dagger\,|w'\rangle)_W\\
&= (\,|v\rangle\otimes\,|w\rangle\,,\hat{X}^\dagger\,|v'\rangle\otimes\hat{Y}^\dagger\,|w'\rangle) = (\,|vw\rangle\,,\hat{X}^\dagger\otimes\hat{Y}^\dagger\,|v'w'\rangle)
\end{aligned}
\tag{4.1.30}
$$

である。一方，(4.1.28) より，

$$
(\hat{X}\otimes\hat{Y}\,|vw\rangle\,,\,|v'w'\rangle) = (\,|vw\rangle\,,(\hat{X}\otimes\hat{Y})^\dagger\,|v'w'\rangle) \tag{4.1.31}
$$

である。以上より，(4.1.29) が示された。 ■

==========

補足・計算例 33.

テンソル積

例 1：補足・計算例 29 で取り上げた内積空間 $\mathrm{span}(e^{ix}, e^{-ix})$, $\mathrm{span}(\,|\uparrow\rangle\,,\,|\downarrow\rangle)$ を V_x, V_{spin} と表すことにし，これらからテンソル積 $V = V_x\otimes V_{\mathrm{spin}}$ を構成する。V_x の正規直交基底を $\chi = \{\chi_+(x), \chi_-(x)\} = \{\frac{1}{\sqrt{2\pi}}e^{ix}, \frac{1}{\sqrt{2\pi}}e^{-ix}\}$，$V_{\mathrm{spin}}$ の正規直交基底を $\sigma = \{\,|\uparrow\rangle\,,\,|\downarrow\rangle\}$ とすると，V の正規直交基底は

$$
\varphi = \{\chi_+(x)\,|\uparrow\rangle\,,\chi_+(x)\,|\downarrow\rangle\,,\chi_-(x)\,|\uparrow\rangle\,,\chi_-(x)\,|\downarrow\rangle\,,\} \tag{4.1.32}
$$

である。V の任意のベクトル $|\psi(x)\rangle$ は基底 φ によって

$$
|\psi(x)\rangle = \sum_{k_x\sigma} c_{k_x\sigma}\chi_{k_x}(x)\,|\sigma\rangle \tag{4.1.33}
$$

と表せる。ここで，$k_x = +,-$，$\sigma = \uparrow,\downarrow$ である。波数演算子 $\hbar_x = -iD_x$ とスピン角運動量演算子の x 成分 $\hat{s}_x$ を用いて V の演算子 $\hat{X}$ を

$$
\hat{X} = \hbar_x\otimes\hat{s}_x = -\frac{i}{2}D_x\otimes(\,|\uparrow\rangle\langle\downarrow| + |\downarrow\rangle\langle\uparrow|) \tag{4.1.34}
$$

と定義する。$\hbar_x$，$\hat{s}_x$ は V_x，V_{spin} のエルミート演算子であるから，$\hat{X}$ は V のエルミート演算子となる。基底 φ による $\hat{X}$ の行列表現はクロネッカー積

$$
\hat{X}\overset{\varphi}{\mapsto}\frac{1}{2}\begin{bmatrix}1 & 0\\ 0 & -1\end{bmatrix}\otimes\underbrace{\begin{bmatrix}0 & 1\\ 1 & 0\end{bmatrix}}_{\sigma_x} = \frac{1}{2}\begin{bmatrix}\sigma_x & 0\\ 0 & -\sigma_x\end{bmatrix} = \frac{1}{2}\begin{bmatrix}0 & 1 & 0 & 0\\ 1 & 0 & 0 & 0\\ 0 & 0 & 0 & -1\\ 0 & 0 & -1 & 0\end{bmatrix} \tag{4.1.35}
$$

で与えられる。ここで，σ_x はパウリ行列の x 成分である。(4.1.35) より，$\hat{X}$ の固有値，固有ベクトルは

$$
\begin{aligned}
\xi_1 &= 1 \quad \text{のとき} \quad \chi_+(x)\,|+\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\chi_+(x)(\,|\uparrow\rangle + |\downarrow\rangle)\\
\xi_2 &= -1 \quad \text{のとき} \quad \chi_+(x)\,|-\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\chi_+(x)(\,|\uparrow\rangle - |\downarrow\rangle)\\
\xi_3 &= -1 \quad \text{のとき} \quad \chi_-(x)\,|+\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\chi_-(x)(\,|\uparrow\rangle + |\downarrow\rangle)\\
\xi_4 &= 1 \quad \text{のとき} \quad \chi_-(x)\,|-\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\chi_-(x)(\,|\uparrow\rangle - |\downarrow\rangle)
\end{aligned}
\tag{4.1.36}
$$

である。

例 2：上の例を拡張して, 内積空間 $V_x, V_y, V_z, V_{\rm spin}$ のテンソル積 $V = V_x \otimes V_y \otimes V_z \otimes V_{\rm spin}$ を構成する。ここで，$V_x = {\rm span}(e^{ix}, e^{-ix})$，$V_y = {\rm span}(e^{iy}, e^{-iy})$，$V_z = {\rm span}(e^{iz}, e^{-iz})$，$V_{\rm spin} = {\rm span}(\,|\!\uparrow\rangle\,, |\!\downarrow\rangle)$ である。このとき，V は 16 次元の内積空間となる。記号 $\boldsymbol{k}$ および σ を $\{\boldsymbol{k} = k_x\,\boldsymbol{e}_x + k_y\,\boldsymbol{e}_y + k_z\,\boldsymbol{e}_z \,|\, k_x = +,-; k_y = +,-; k_z = +,-\}$ および $\sigma = \uparrow, \downarrow$ によって定義すると，V の正規直交基底 φ は $\boldsymbol{r} = x\,\boldsymbol{e}_x + y\,\boldsymbol{e}_y + z\,\boldsymbol{e}_z$，$\chi_{\boldsymbol{k}}(\boldsymbol{r}) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} e^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}}$ として $\varphi = \{\chi_{\boldsymbol{k}}(\boldsymbol{r})\,|\sigma\rangle\}$ によって与えられる。波数演算子 $\hat{\boldsymbol{k}} = \hat{k}_x\,\boldsymbol{e}_x + \hat{k}_y\,\boldsymbol{e}_y + \hat{k}_z\,\boldsymbol{e}_z = (-i\partial_x)\,\boldsymbol{e}_x + (-i\partial_y)\,\boldsymbol{e}_y + (-i\partial_z)\,\boldsymbol{e}_z$ とスピン角運動量演算子 $\hat{\boldsymbol{s}} = \hat{s}_x\,\boldsymbol{e}_x + \hat{s}_y\,\boldsymbol{e}_y + \hat{s}_z\,\boldsymbol{e}_z$ を用いて**ヘリシティー演算子** $\hat{h}$ を

$$\hat{h} = \boldsymbol{n}\cdot\hat{\boldsymbol{s}} = n_x\hat{s}_x + n_y\hat{s}_y + n_z\hat{s}_z = \frac{1}{2}[\,|\!\uparrow\rangle\ \ |\!\downarrow\rangle\,]\begin{bmatrix} n_z & n_x - in_y \\ n_x + in_y & -n_z \end{bmatrix}\begin{bmatrix} \langle\uparrow| \\ \langle\downarrow| \end{bmatrix} \tag{4.1.37}$$

によって定義する。ここで，$\boldsymbol{n} = n_x\,\boldsymbol{e}_x + n_y\,\boldsymbol{e}_y + n_z\,\boldsymbol{e}_z = \hat{\boldsymbol{k}}/\sqrt{\hat{k}_x^2 + \hat{k}_y^2 + \hat{k}_z^2}$ である。$\hat{h}$ は V のエルミート演算子となる。補足・計算例 29 で求めた (3.2.57) より，$\hat{h}$ の固有値，固有ベクトルは

$$\begin{aligned} &\text{固有値：}+\frac{1}{2},\quad \text{固有ベクトル：}\chi_{\boldsymbol{k}}(\boldsymbol{r})\,|+\rangle = \chi_{\boldsymbol{k}}(\boldsymbol{r})\Big(\cos(\theta_{\boldsymbol{k}}/2)\,|\!\uparrow\rangle + \sin(\theta_{\boldsymbol{k}}/2)e^{i\phi_{\boldsymbol{k}}/2}\,|\!\downarrow\rangle\Big) \\ &\text{固有値：}-\frac{1}{2},\quad \text{固有ベクトル：}\chi_{\boldsymbol{k}}(\boldsymbol{r})\,|-\rangle = \chi_{\boldsymbol{k}}(\boldsymbol{r})\Big(-\sin(\theta_{\boldsymbol{k}}/2)\,|\!\uparrow\rangle + \cos(\theta_{\boldsymbol{k}}/2)e^{i\phi_{\boldsymbol{k}}/2}\,|\!\downarrow\rangle\Big) \end{aligned} \tag{4.1.38}$$

である。ここで，$\theta_{\boldsymbol{k}}$，$\phi_{\boldsymbol{k}}$ は $\boldsymbol{k}$ の方向の天頂角，方位角である。具体的に $\theta_{\boldsymbol{k}}$，$\phi_{\boldsymbol{k}}$ を示すと

$k_x\,k_y\,k_z$	$\theta_{\boldsymbol{k}}$	$\phi_{\boldsymbol{k}}$	$k_x\,k_y\,k_z$	$\theta_{\boldsymbol{k}}$	$\phi_{\boldsymbol{k}}$
$+\,+\,+$	θ_*	$\pi/4$	$-\,+\,+$	θ_*	$3\pi/4$
$+\,+\,-$	$\pi-\theta_*$	$\pi/4$	$-\,+\,-$	$\pi-\theta_*$	$3\pi/4$
$+\,-\,+$	θ_*	$-\pi/4$	$-\,-\,+$	θ_*	$-3\pi/4$
$+\,-\,-$	$\pi-\theta_*$	$-\pi/4$	$-\,-\,-$	$\pi-\theta_*$	$-3\pi/4$

(4.1.39)

となる。ここで，$\theta_* = \arccos(\sqrt{1/3})$ とおいた。

例 3：内積空間 $V_1 = {\rm span}(\,|1\uparrow\rangle\,, |1\downarrow\rangle)$，$V_2 = {\rm span}(\,|2\uparrow\rangle\,, |2\downarrow\rangle)$ のテンソル積 $W = V_1 \otimes V_2$ を考える[9]。V_1，V_2 の正規直交基底を $e_1 = \{\,|1\uparrow\rangle\,, |1\downarrow\rangle\}$，$e_2 = \{\,|2\uparrow\rangle\,, |2\downarrow\rangle\}$ とする。基底 e_1 と e_2 により構成した W の基底を $e = \{\,|1\uparrow 2\uparrow\rangle\,, |1\uparrow 2\downarrow\rangle\,, |1\downarrow 2\uparrow\rangle\,, |1\downarrow 2\downarrow\rangle\}$ とする。V_1，V_2 のスピン角運動量演算子 $\hat{\boldsymbol{s}}_1$，$\hat{\boldsymbol{s}}_2$ は，パウリ行列 $\boldsymbol{\sigma} = \sigma_x\,\boldsymbol{e}_x + \sigma_y\,\boldsymbol{e}_y + \sigma_z\,\boldsymbol{e}_z$ を用いて，

$$\begin{aligned} \hat{\boldsymbol{s}}_1 &= \hat{s}_{1x}\,\boldsymbol{e}_x + \hat{s}_{1y}\,\boldsymbol{e}_y + \hat{s}_{1z}\,\boldsymbol{e}_z = \frac{1}{2}[\,|1\uparrow\rangle\ \ |1\downarrow\rangle\,]\boldsymbol{\sigma}\begin{bmatrix} \langle 1\uparrow| \\ \langle 1\downarrow| \end{bmatrix} \\ \hat{\boldsymbol{s}}_2 &= \hat{s}_{2x}\,\boldsymbol{e}_x + \hat{s}_{2y}\,\boldsymbol{e}_y + \hat{s}_{2z}\,\boldsymbol{e}_z = \frac{1}{2}[\,|2\uparrow\rangle\ \ |2\downarrow\rangle\,]\boldsymbol{\sigma}\begin{bmatrix} \langle 2\uparrow| \\ \langle 2\downarrow| \end{bmatrix} \end{aligned} \tag{4.1.40}$$

と表せる。全スピン角運動量演算子 $\hat{\boldsymbol{S}} = \hat{S}_x\,\boldsymbol{e}_x + \hat{S}_y\,\boldsymbol{e}_y + \hat{S}_z\,\boldsymbol{e}_z$ を $\hat{\boldsymbol{S}} = \hat{\boldsymbol{s}}_1 \otimes \hat{I}_2 + \hat{I}_1 \otimes \hat{\boldsymbol{s}}_2$ によって定義する。つまり，

$$\hat{S}_x = \hat{s}_{1x} \otimes \hat{I}_2 + \hat{I}_1 \otimes \hat{s}_{2x} \qquad \hat{S}_y = \hat{s}_{1y} \otimes \hat{I}_2 + \hat{I}_1 \otimes \hat{s}_{2y} \qquad \hat{S}_z = \hat{s}_{1z} \otimes \hat{I}_2 + \hat{I}_1 \otimes \hat{s}_{2z} \tag{4.1.41}$$

[9] ここでは陽子と電子のような異なる種類のスピン 1/2 の粒子を考えています。電子と電子のような同じ種類のスピン 1/2 の粒子を扱うには §4.2 で述べる反対称テンソル空間が必要になります。

である[10]。全角運動量演算子の 2 乗 $\hat{\boldsymbol{S}}^2$ は

$$\hat{\boldsymbol{S}}^2 = \hat{S}_x^2 + \hat{S}_y^2 + \hat{S}_z^2 = \hat{\boldsymbol{s}}_1^2 \otimes \hat{I}_2 + \hat{I}_1 \otimes \hat{\boldsymbol{s}}_2^2 + 2\hat{s}_{1x} \otimes \hat{s}_{2x} + 2\hat{s}_{1y} \otimes \hat{s}_{2y} + 2\hat{s}_{1z} \otimes \hat{s}_{2z} \tag{4.1.42}$$

である。ここで，$|1\sigma_1\rangle\langle 1\sigma_1'| \otimes |2\sigma_2\rangle\langle 2\sigma_2'| = |1\sigma_1 2\sigma_2\rangle\langle 1\sigma_1' 2\sigma_2'|$ であるから，

$$\begin{aligned}
&\hat{\boldsymbol{s}}_1^2 \otimes \hat{I}_2 = \frac{3}{4}\hat{I}_1 \otimes \hat{I}_2 \qquad \hat{I}_1 \otimes \hat{\boldsymbol{s}}_2^2 = \hat{I}_1 \otimes \frac{3}{4}\hat{I}_2 \\
&2\hat{s}_{1x} \otimes \hat{s}_{2x} = \frac{1}{2}(\,|1\uparrow 2\uparrow\rangle\langle 1\downarrow 2\downarrow| + |1\uparrow 2\downarrow\rangle\langle 1\downarrow 2\uparrow| + |1\downarrow 2\uparrow\rangle\langle 1\uparrow 2\downarrow| + |1\downarrow 2\downarrow\rangle\langle 1\uparrow 2\uparrow|) \\
&2\hat{s}_{1y} \otimes \hat{s}_{2y} = \frac{1}{2}(-|1\uparrow 2\uparrow\rangle\langle 1\downarrow 2\downarrow| + |1\uparrow 2\downarrow\rangle\langle 1\downarrow 2\uparrow| + |1\downarrow 2\uparrow\rangle\langle 1\uparrow 2\downarrow| - |1\downarrow 2\downarrow\rangle\langle 1\uparrow 2\uparrow|) \\
&2\hat{s}_{1z} \otimes \hat{s}_{2z} = \frac{1}{2}(\,|1\uparrow 2\uparrow\rangle\langle 1\uparrow 2\uparrow| - |1\uparrow 2\downarrow\rangle\langle 1\uparrow 2\downarrow| - |1\downarrow 2\uparrow\rangle\langle 1\downarrow 2\uparrow| + |1\downarrow 2\downarrow\rangle\langle 1\downarrow 2\downarrow|)
\end{aligned} \tag{4.1.43}$$

より，

$$\begin{aligned}
\hat{\boldsymbol{S}}^2 &= \frac{3}{2}\hat{I}_1 \otimes \hat{I}_2 + |1\uparrow 2\downarrow\rangle\langle 1\downarrow 2\uparrow| + |1\downarrow 2\uparrow\rangle\langle 1\uparrow 2\downarrow| \\
&\qquad + \frac{1}{2}(\,|1\uparrow 2\uparrow\rangle\langle 1\uparrow 2\uparrow| - |1\uparrow 2\downarrow\rangle\langle 1\uparrow 2\downarrow| - |1\downarrow 2\uparrow\rangle\langle 1\downarrow 2\uparrow| + |1\downarrow 2\downarrow\rangle\langle 1\downarrow 2\downarrow|) \\
&= \frac{3}{2}\hat{I}_1 \otimes \hat{I}_2 + \frac{1}{2}(\,|1\uparrow 2\uparrow\rangle\langle 1\uparrow 2\uparrow| + |1\downarrow 2\downarrow\rangle\langle 1\downarrow 2\downarrow|) \\
&\qquad + |1\uparrow 2\downarrow\rangle\langle 1\downarrow 2\uparrow| + |1\downarrow 2\uparrow\rangle\langle 1\uparrow 2\downarrow| - \frac{1}{2}(\,|1\uparrow 2\downarrow\rangle\langle 1\uparrow 2\downarrow| + |1\downarrow 2\uparrow\rangle\langle 1\downarrow 2\uparrow|) \\
&= \frac{3}{2}\hat{I}_1 \otimes \hat{I}_2 + \frac{1}{2}(\,|1\uparrow 2\uparrow\rangle\langle 1\uparrow 2\uparrow| + |1\downarrow 2\downarrow\rangle\langle 1\downarrow 2\downarrow|) \\
&\qquad\qquad + [\,|1\uparrow 2\downarrow\rangle\ \ |1\downarrow 2\uparrow\rangle\,]\begin{bmatrix} -1/2 & 1 \\ 1 & -1/2 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} \langle 1\uparrow 2\downarrow| \\ \langle 1\downarrow 2\uparrow| \end{bmatrix} \\
&= \frac{3}{2}\hat{I}_1 \otimes \hat{I}_2 + \frac{1}{2}(\,|1\uparrow 2\uparrow\rangle\langle 1\uparrow 2\uparrow| + |1\downarrow 2\downarrow\rangle\langle 1\downarrow 2\downarrow|) + [\,|\mathrm{T}_0\rangle\ \ |\mathrm{S}\rangle\,]\begin{bmatrix} 1/2 & 0 \\ 0 & -3/2 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} \langle \mathrm{T}_0| \\ \langle \mathrm{S}| \end{bmatrix} \\
&= \frac{3}{2}(\,|\mathrm{T}_{+1}\rangle\langle \mathrm{T}_{+1}| + |\mathrm{T}_{-1}\rangle\langle \mathrm{T}_{-1}| + |\mathrm{T}_0\rangle\langle \mathrm{T}_0| + |\mathrm{S}\rangle\langle \mathrm{S}|) \\
&\qquad\qquad + \frac{1}{2}(\,|\mathrm{T}_{+1}\rangle\langle \mathrm{T}_{+1}| + |\mathrm{T}_{-1}\rangle\langle \mathrm{T}_{-1}|) + \frac{1}{2}|\mathrm{T}_0\rangle\langle \mathrm{T}_0| - \frac{3}{2}|\mathrm{S}\rangle\langle \mathrm{S}| \\
&= 0 \cdot |\mathrm{S}\rangle\langle \mathrm{S}| + 2 \cdot (\,|\mathrm{T}_{+1}\rangle\langle \mathrm{T}_{+1}| + |\mathrm{T}_0\rangle\langle \mathrm{T}_0| + |\mathrm{T}_{-1}\rangle\langle \mathrm{T}_{-1}|)
\end{aligned} \tag{4.1.44}$$

と書ける。ここで，

$$|\mathrm{S}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(\,|1\uparrow 2\downarrow\rangle - |1\downarrow 2\uparrow\rangle) \tag{4.1.45}$$

$$|\mathrm{T}_{+1}\rangle = |1\uparrow 2\uparrow\rangle \quad |\mathrm{T}_0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(\,|1\uparrow 2\downarrow\rangle + |1\downarrow 2\uparrow\rangle) \quad |\mathrm{T}_{-1}\rangle = |1\downarrow 2\downarrow\rangle \tag{4.1.46}$$

[10]角運動量の合成の一般論を用いれば，ここで示す計算よりも系統的に扱うことができます。詳細については参考文献 [16]，[17] などを参照してください。

とおいた。(4.1.45)，(4.1.46) のベクトルはすべて正規化されており，また，互いに直交している。(4.1.44) の最右辺は $\hat{\boldsymbol{S}}^2$ のスペクトル分解であり，(4.1.45)，(4.1.46) のベクトルは $\hat{\boldsymbol{S}}^2$ の固有ベクトルである。$\hat{\boldsymbol{S}}^2$ の固有値，固有ベクトルは

$$\begin{aligned} &\text{固有値：}0, \quad \text{固有ベクトル：}|\mathrm{S}\rangle \\ &\text{固有値：}2, \quad \text{固有ベクトル：}|\mathrm{T}_{+1}\rangle\,,\ |\mathrm{T}_0\rangle\,,\ |\mathrm{T}_{-1}\rangle \end{aligned} \tag{4.1.47}$$

である。また，(4.1.45)，(4.1.46) のベクトルは $\hat{S}_z$ の固有ベクトルにもなっている。$\hat{S}_z$ の固有値，固有ベクトルは

$$\begin{aligned} &\text{固有値：}+1, \quad \text{固有ベクトル：}|\mathrm{T}_{+1}\rangle \\ &\text{固有値：}\quad 0, \quad \text{固有ベクトル：}|\mathrm{S}\rangle\,,\ |\mathrm{T}_0\rangle \\ &\text{固有値：}-1, \quad \text{固有ベクトル：}|\mathrm{T}_{-1}\rangle \end{aligned} \tag{4.1.48}$$

である。$|\mathrm{S}\rangle$ は**スピン 1 重項状態**，$|\mathrm{T}_{+1}\rangle$，$|\mathrm{T}_0\rangle$，$|\mathrm{T}_{-1}\rangle$ は**スピン 3 重項状態**とよばれる。

==========

4.2 反対称テンソル空間

4.2.1 反対称テンソル空間

内積空間 V が与えられたとき，V の N 個のコピー $V_1, \cdots, V_N$ からテンソル積 $V^{\otimes N} = V_1 \otimes \cdots \otimes V_N$ を構成する。ここで，V_i の添え字 i は V_i が左から i 番目の V のコピーであることを表す[11]。$V^{\otimes N}$ を V の N 次の**テンソル空間**という。また，$V^{\otimes N}$ の元を N 次の**テンソル**という[12]。V の正規直交基底を $\varphi = \{\,|a\rangle\,,\,|b\rangle\,,\,|c\rangle\,,\cdots\}$ とするとき，$a, b, c, \cdots$ を基底 φ をなすベクトルの**ラベル**という[13]。基底 φ から構成した $\{\,|\varphi_1\rangle_1 \otimes \cdots \otimes\ |\varphi_N\rangle_N\ |\,\varphi_i = a, b, c, \cdots\ \ (i = 1, \cdots, N)\}$ は $V^{\otimes N}$ の正規直交基底となる。ここで，$|\cdot\rangle_i$ の添え字 i は $|\cdot\rangle_i$ が V_i のベクトルであることを表す[14]。以降では V の一般のベクトル $|\psi\rangle$ に対応する V_i のベクトルを $|\psi\rangle_i$ によっ

[11] V_i の添え字 i は書かないのが普通ですが，本書では説明の都合上この添え字を明示することにします。

[12] 物理でいうテンソルはほとんどの場合テンソル場のことを指します。テンソル場はテンソル解析で扱われる対象です。本書ではテンソル場については触れないことにします。

[13] §4.2 では V の基底をなすベクトルのラベルを $a, b, c, \cdots$ のように表し，これまで $e_1, e_2, e_3, \cdots$ などで使ってきたような $1, 2, 3, \cdots$ といった添え字は付けないことにします。添え字は V_i や φ_i などで使いますので，これ以上増やしたくないというのがその理由です。なお，ラベルという用語は本書のみで用いるものです。量子力学では V のベクトルを一粒子状態とよびますので，その場合ラベルとは一粒子状態の名称を指すことになります。

[14] これに対し，φ_i の添え字 i は $|\text{ラベル}\rangle_i$ のラベル $a, b, c, \cdots$ を表す変数が N 個必要であることから用いた便宜上のものです。したがって，混乱の生じない限り，ラベルを表す変数としては (4.2.1) のように $|\text{ラベル}\rangle_i$ の添え字 i と異なる添え字 ((4.2.1) では $|\text{ラベル}\rangle_i$ のラベルに使われている添え字が $\sigma^{-1}(i)$ になっています) をもつものを使っても構いませんし，場合によっては添え字のないものを使っても構いません。

て表し，そのエルミート共役を $\langle\psi|_i$ によって表すものとする。このとき注意すべき点は，V_i は V のコピーであるから，V_i の 2 つのベクトル $|\psi\rangle_i$ と $|\psi'\rangle_i$ の内積 $(|\psi\rangle_i, |\psi'\rangle_i)_{V_i} = \langle\psi|_i |\psi'\rangle_i$ は i によらず $(|\psi\rangle, |\psi'\rangle)_V = \langle\psi|\psi'\rangle$ に一致するということである。本章ではこの事実を利用して，スカラーである $\langle\psi|\psi'\rangle$ の形が現れたらこれを適切な位置に移動させて計算を行うことにする[15]。

$V^{\otimes N}$ の演算子 $\hat{\sigma}$ を

$$\hat{\sigma} = \sum_{\{\varphi_i\}} |\varphi_{\sigma^{-1}(1)}\rangle_1 \langle\varphi_1|_1 \otimes \cdots \otimes |\varphi_{\sigma^{-1}(N)}\rangle_N \langle\varphi_N|_N \tag{4.2.1}$$

によって定義する。$\hat{\sigma}$ を置換 σ に対応する**置換演算子**という[16]。(4.2.1) の和は $\varphi_1, \cdots, \varphi_N$ のすべてについてとることを表す。置換 σ は (1.5.1) で定義したように，

$$\sigma = \begin{pmatrix} 1 & \cdots & N \\ \sigma(1) & \cdots & \sigma(N) \end{pmatrix} \tag{4.2.2}$$

である。積 $\hat{\sigma}\hat{\tau}$ について，

$$\hat{\sigma}\hat{\tau} = \sum_{\{\varphi_i\}} |\varphi_{(\sigma\tau)^{-1}(1)}\rangle_1 \langle\varphi_1|_1 \otimes \cdots \otimes |\varphi_{(\sigma\tau)^{-1}(N)}\rangle_N \langle\varphi_N|_N \tag{4.2.3}$$

が成り立つ。つまり，$\hat{\sigma}\hat{\tau}$ は置換 $\sigma\tau$ に対応する置換演算子となる[17]。

[15] (4.2.4) や (4.2.7) の計算を参考にしてください。

[16] §4.2 では §1.5.1 で述べた置換の基本的性質が必要になります。

[17] 置換演算子の定義 (4.2.1) において右辺の置換を σ ではなく σ^{-1} にしたのは置換演算子 $\hat{\sigma}\hat{\tau}$ を置換 $\sigma\tau$ に対応するようにしたかったからです。もし，(4.2.1) の右辺で σ^{-1} ではなく σ を用いていたら $\hat{\sigma}\hat{\tau}$ は $\tau\sigma$ に対応することになってしまいます。なお，本書の定義は参考文献 [9]，[14] の定義と同じですが，参考文献 [1] の定義とは逆になっています。

[(4.2.3) の証明] 置換演算子の定義 (4.2.1) より，

$$
\begin{aligned}
\hat{\sigma}\hat{\tau} &= \sum_{\{\varphi'_i\}}\sum_{\{\varphi_i\}} |\varphi'_{\sigma^{-1}(1)}\rangle_1 \langle\varphi'_1|_1 \, |\varphi_{\tau^{-1}(1)}\rangle_1 \langle\varphi_1|_1 \otimes \cdots \\
&\qquad\qquad \cdots \otimes |\varphi'_{\sigma^{-1}(N)}\rangle_N \langle\varphi'_N|_N \, |\varphi_{\tau^{-1}(N)}\rangle_N \langle\varphi_N|_N \\
&\overset{①}{=} \sum_{\{\varphi'_i\}}\sum_{\{\varphi_i\}} |\varphi'_{\sigma^{-1}(1)}\rangle_1 \langle\varphi'_1|\varphi_{\tau^{-1}(1)}\rangle \langle\varphi_1|_1 \otimes \cdots \\
&\qquad\qquad \cdots \otimes |\varphi'_{\sigma^{-1}(N)}\rangle_N \langle\varphi'_N|\varphi_{\tau^{-1}(N)}\rangle \langle\varphi_N|_N \\
&\overset{②}{=} \sum_{\{\varphi'_i\}}\sum_{\{\varphi_i\}} |\varphi'_{\sigma^{-1}(1)}\rangle_1 \langle\varphi'_{\sigma^{-1}(1)}|\varphi_{\tau^{-1}\sigma^{-1}(1)}\rangle \langle\varphi_1|_1 \otimes \cdots \\
&\qquad\qquad \cdots \otimes |\varphi'_{\sigma^{-1}(N)}\rangle_N \langle\varphi'_{\sigma^{-1}(N)}|\varphi_{\tau^{-1}\sigma^{-1}(N)}\rangle \langle\varphi_N|_N \\
&\overset{③}{=} \sum_{\{\varphi'_i\}}\sum_{\{\varphi_i\}} |\varphi'_{\sigma^{-1}(1)}\rangle_1 \langle\varphi'_{\sigma^{-1}(1)}|_1 \, |\varphi_{\tau^{-1}\sigma^{-1}(1)}\rangle_1 \langle\varphi_1|_1 \otimes \cdots \\
&\qquad\qquad \cdots \otimes |\varphi'_{\sigma^{-1}(N)}\rangle_N \langle\varphi'_{\sigma^{-1}(N)}|_N \, |\varphi_{\tau^{-1}\sigma^{-1}(N)}\rangle_N \langle\varphi_N|_N \\
&\overset{④}{=} \sum_{\{\varphi_i\}} \hat{I}_1 \, |\varphi_{\tau^{-1}\sigma^{-1}(1)}\rangle_1 \langle\varphi_1|_1 \otimes \cdots \otimes \hat{I}_N \, |\varphi_{\tau^{-1}\sigma^{-1}(N)}\rangle_N \langle\varphi_N|_N \\
&= \sum_{\{\varphi_i\}} |\varphi_{(\sigma\tau)^{-1}(1)}\rangle_1 \langle\varphi_1|_1 \otimes \cdots \otimes |\varphi_{(\sigma\tau)^{-1}(N)}\rangle_N \langle\varphi_N|_N
\end{aligned}
\tag{4.2.4}
$$

を得る。等式①，③において $\langle\psi|_i \, |\psi'\rangle_i = \langle\psi|\psi'\rangle$ を用い，等式②では左辺のスカラー $\langle\psi|\psi'\rangle$ を次の計算のために適切な位置に移動させた。等式④において V_i の恒等演算子 $\hat{I}_i$ が $\hat{I}_i = \sum_{\varphi_i} |\varphi_i\rangle_i \langle\varphi_i|_i$ と表せることを用いた。 ■

V の N 個のベクトル $|\psi_1\rangle, \cdots, |\psi_N\rangle$ による $V^{\otimes N}$ のテンソル $|\psi_1\rangle_1 \otimes \cdots \otimes |\psi_N\rangle_N$ に対し，$\hat{\sigma}$ は

$$
\hat{\sigma}\,|\psi_1\rangle_1 \otimes \cdots \otimes |\psi_N\rangle_N = |\psi_{\sigma^{-1}(1)}\rangle_1 \otimes \cdots \otimes |\psi_{\sigma^{-1}(N)}\rangle_N \tag{4.2.5}
$$

と作用する[18]。また，$\hat{\sigma}$ はユニタリ演算子であり，

$$
\hat{\sigma}^\dagger = \hat{\sigma}^{-1} \tag{4.2.6}
$$

を満たす。

[18] $|\psi_1\rangle_1 \otimes \cdots \otimes |\psi_N\rangle_N$ の形のテンソルを**単純テンソル**といいます。一般のテンソルは単純テンソルの線形結合で表せるので，テンソル空間の演算子はその単純テンソルへの作用が与えられれば定まることになります。

[(4.2.5) の証明] 置換演算子の定義 (4.2.1) より，

$$
\begin{aligned}
&\hat{\sigma}\,|\psi_1\rangle_1 \otimes \cdots \otimes |\psi_N\rangle_N \\
&= \sum_{\{\varphi_i\}} |\varphi_{\sigma^{-1}(1)}\rangle_1 \langle\varphi_1|_1 |\psi_1\rangle_1 \otimes \cdots \otimes |\varphi_{\sigma^{-1}(N)}\rangle_N \langle\varphi_N|_N |\psi_N\rangle_N \\
&\overset{①}{=} \sum_{\{\varphi_i\}} |\varphi_{\sigma^{-1}(1)}\rangle_1 \langle\varphi_1|\psi_1\rangle \otimes \cdots \otimes |\varphi_{\sigma^{-1}(N)}\rangle_N \langle\varphi_N|\psi_N\rangle \\
&\overset{②}{=} \sum_{\{\varphi_i\}} |\varphi_{\sigma^{-1}(1)}\rangle_1 \langle\varphi_{\sigma^{-1}(1)}|\psi_{\sigma^{-1}(1)}\rangle \otimes \cdots \otimes |\varphi_{\sigma^{-1}(N)}\rangle_N \langle\varphi_{\sigma^{-1}(N)}|\psi_{\sigma^{-1}(N)}\rangle \\
&\overset{③}{=} \sum_{\{\varphi_i\}} |\varphi_{\sigma^{-1}(1)}\rangle_1 \langle\varphi_{\sigma^{-1}(1)}|_1 |\psi_{\sigma^{-1}(1)}\rangle_1 \otimes \cdots \otimes |\varphi_{\sigma^{-1}(N)}\rangle_N \langle\varphi_{\sigma^{-1}(N)}|_N |\psi_{\sigma^{-1}(N)}\rangle_N \\
&\overset{④}{=} \hat{I}_1\,|\psi_{\sigma^{-1}(1)}\rangle_1 \otimes \cdots \otimes \hat{I}_N\,|\psi_{\sigma^{-1}(N)}\rangle_N = |\psi_{\sigma^{-1}(1)}\rangle_1 \otimes \cdots \otimes |\psi_{\sigma^{-1}(N)}\rangle_N
\end{aligned}
\tag{4.2.7}
$$

を得る。等式①，③において $\langle\psi|_i\,|\psi'\rangle_i = \langle\psi|\psi'\rangle$ を用い，等式②では左辺のスカラー $\langle\psi|\psi'\rangle$ を次の計算のために適切な位置に移動させた。等式④において V_i の恒等演算子 $\hat{I}_i$ が $\hat{I}_i = \sum_{\varphi_i} |\varphi_i\rangle_i \langle\varphi_i|_i$ と表せることを用いた。 ■

[(4.2.6) の証明] 置換演算子の定義 (4.2.1) より，

$$
\hat{\sigma}^\dagger = \sum_{\{\varphi_i\}} |\varphi_1\rangle_1 \langle\varphi_{\sigma^{-1}(1)}|_1 \otimes \cdots \otimes |\varphi_N\rangle_N \langle\varphi_{\sigma^{-1}(N)}|_N \tag{4.2.8}
$$

と書ける。したがって，

$$
\begin{aligned}
\hat{\sigma}\hat{\sigma}^\dagger &= \sum_{\{\varphi_i\}}\sum_{\{\varphi'_i\}} |\varphi_{\sigma^{-1}(1)}\rangle_1 \langle\varphi_1|\varphi'_1\rangle \langle\varphi'_{\sigma^{-1}(1)}|_1 \otimes \cdots \\
&\qquad\qquad \cdots \otimes |\varphi_{\sigma^{-1}(N)}\rangle_N \langle\varphi_N|\varphi'_N\rangle \langle\varphi'_{\sigma^{-1}(N)}|_N \\
&\overset{①}{=} \sum_{\{\varphi_i\}} |\varphi_{\sigma^{-1}(1)}\rangle_1 \langle\varphi_{\sigma^{-1}(1)}|_1 \otimes \cdots \otimes |\varphi_{\sigma^{-1}(N)}\rangle_N \langle\varphi_{\sigma^{-1}(N)}|_N \\
&\overset{②}{=} \hat{I}_1 \otimes \cdots \otimes \hat{I}_N = \hat{I}_{V^{\otimes N}}
\end{aligned}
\tag{4.2.9}
$$

を得る。等式①において $\langle\varphi_i|\varphi'_i\rangle = \delta_{\varphi_i\varphi'_i}$ を用いた。また，等式②において V_i の恒等演算子 $\hat{I}_i$ が $\hat{I}_i = \sum_{\varphi_i} |\varphi_i\rangle_i \langle\varphi_i|_i$ と表せることを用いた。$\hat{\sigma}^\dagger\hat{\sigma} = \hat{I}_{V^{\otimes N}}$ も同様に示せる。 ■

反対称化演算子 $\hat{A}_N$ を

$$
\hat{A}_N = \frac{1}{N!}\sum_{\sigma} \mathrm{sgn}(\sigma)\hat{\sigma} \tag{4.2.10}
$$

によって定義する。ここで，和は $N!$ 個の置換 σ すべてについてとるものとする。このとき，

$$\hat{A}_N^2 = \hat{A}_N \qquad\qquad \hat{A}_N^\dagger = \hat{A}_N \tag{4.2.11}$$

が成り立つ。つまり，$\hat{A}_N$ は $V^{\otimes N}$ の正射影である。$\hat{A}_N$ の像 $\operatorname{im}\hat{A}_N$ は $V^{\otimes N}$ の部分空間となる。これを $\bigwedge^N V$ と表し，N 次の**反対称テンソル空間**という。また，$\bigwedge^N V$ の元を N 次の**反対称テンソル**という[19]。さらに，$N=0$ のときにも**真空状態** $|\mathrm{vac}\rangle$ を導入して $\bigwedge^0 V = \mathrm{span}(|\mathrm{vac}\rangle)$ と考えることにする。
[(4.2.11) の証明] まず，

$$\begin{aligned}\hat{A}_N^2 &= \left(\frac{1}{N!}\right)^2 \sum_\sigma \sum_{\sigma'} \mathrm{sgn}(\sigma)\,\mathrm{sgn}(\sigma')\hat{\sigma}\hat{\sigma}' \overset{①}{=} \left(\frac{1}{N!}\right)^2 \sum_\sigma \sum_\tau \mathrm{sgn}(\tau)\hat{\tau} \\ &= \frac{1}{N!}\sum_\tau \mathrm{sgn}(\tau)\hat{\tau} = \hat{A}_N\end{aligned} \tag{4.2.12}$$

より，(4.2.11) の第 1 式を得る。等式①では，左辺の $\sigma\sigma'$ を τ に置き換え，置換の符号の性質 (1.5.8) を用いた。次に，

$$\hat{A}_N^\dagger = \frac{1}{N!}\sum_\sigma \mathrm{sgn}(\sigma)\hat{\sigma}^\dagger = \frac{1}{N!}\sum_\sigma \mathrm{sgn}(\sigma)\hat{\sigma}^{-1} \overset{②}{=} \frac{1}{N!}\sum_\tau \mathrm{sgn}(\tau)\hat{\tau} = \hat{A}_N \tag{4.2.13}$$

より，(4.2.11) の第 2 式を得る。等式②では，左辺の σ^{-1} を τ に置き換え，置換の符号の性質 (1.5.8) を用いた。 ■

4.2.2 スレイター行列式

V の N 個のベクトル $|\psi_1\rangle, \cdots, |\psi_N\rangle$ を用いて，$\bigwedge^N V$ の反対称テンソル $|\psi_1 \cdots \psi_N\rangle$ を

$$|\psi_1 \cdots \psi_N\rangle = \sqrt{N!}\hat{A}_N\, |\psi_1\rangle_1 \otimes \cdots \otimes |\psi_N\rangle_N \tag{4.2.14}$$

[19] 多粒子系の量子力学において，N 個のフェルミ粒子からなる系の状態は N 次反対称テンソルで表されます。電子はフェルミ粒子なので，N 電子系の状態は N 次反対称テンソルで表されることになります。

によって定義する。$|\psi_1 \cdots \psi_N\rangle$ は

$$
\begin{aligned}
|\psi_1 \cdots \psi_N\rangle &= \frac{1}{\sqrt{N!}} \sum_{\sigma} \mathrm{sgn}(\sigma)\, |\psi_{\sigma(1)}\rangle_1 \otimes \cdots \otimes |\psi_{\sigma(N)}\rangle_N \\
&= \frac{1}{\sqrt{N!}} \det \begin{bmatrix} |\psi_1\rangle_1 & \cdots & |\psi_1\rangle_N \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ |\psi_N\rangle_1 & \cdots & |\psi_N\rangle_N \end{bmatrix}
\end{aligned}
\tag{4.2.15}
$$

と表せる。$|\psi_1 \cdots \psi_N\rangle$ を**スレイター行列式**という[20]。行列式の性質より，

$$
|\psi_{\sigma(1)} \cdots \psi_{\sigma(N)}\rangle = \mathrm{sgn}(\sigma)\, |\psi_1 \cdots \psi_N\rangle \tag{4.2.16}
$$

が成り立つ。特に，ψ_i と ψ_j を入れ替えると，

$$
|\psi_1 \cdots \psi_j \cdots \psi_i \cdots \psi_N\rangle = -\, |\psi_1 \cdots \psi_i \cdots \psi_j \cdots \psi_N\rangle \tag{4.2.17}
$$

であるから，

$$
\psi_i = \psi_j \ (i \neq j) \quad \Rightarrow \quad |\psi_1 \cdots \psi_i \cdots \psi_j \cdots \psi_N\rangle = \mathbf{0} \tag{4.2.18}
$$

を得る[21]。2 つのスレイター行列式 $|\psi_1 \cdots \psi_N\rangle$ と $|\psi'_1 \cdots \psi'_N\rangle$ の間の内積は

$$
\langle \psi_1 \cdots \psi_N | \psi'_1 \cdots \psi'_N\rangle = \det \begin{bmatrix} \langle \psi_1 | \psi'_1\rangle & \cdots & \langle \psi_1 | \psi'_N\rangle \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \langle \psi_N | \psi'_1\rangle & \cdots & \langle \psi_N | \psi'_N\rangle \end{bmatrix} \tag{4.2.19}
$$

[20] スレイター行列式とは**単純反対称テンソル**のことです。一般の反対称テンソルはスレイター行列式の線形結合で表せるので，反対称テンソル空間の演算子はそのスレイター行列式への作用が与えられれば定まることになります。なお，多電子系の基底状態を単一のスレイター行列式で表す近似を**ハートリー–フォック近似** といいます。

[21] (4.2.18) は多電子系の量子力学で**パウリの排他律**として知られている性質です。

と表せる。
[(4.2.19) の証明] (4.2.15) より，

$$
\begin{aligned}
&\langle\psi_1\cdots\psi_N|\psi'_1\cdots\psi'_N\rangle \\
&= \frac{1}{N!}\sum_{\sigma}\sum_{\sigma'}\mathrm{sgn}(\sigma)\,\mathrm{sgn}(\sigma')\,\langle\psi_{\sigma(1)}|\psi'_{\sigma'(1)}\rangle\cdots\langle\psi_{\sigma(N)}|\psi'_{\sigma'(N)}\rangle \\
&\overset{①}{=} \frac{1}{N!}\sum_{\sigma}\sum_{\sigma'}\mathrm{sgn}(\sigma)\,\mathrm{sgn}(\sigma'^{-1})\,\langle\psi_{\sigma\sigma'^{-1}(1)}|\psi'_1\rangle\cdots\langle\psi_{\sigma\sigma'^{-1}(N)}|\psi'_N\rangle \\
&\overset{②}{=} \frac{1}{N!}\sum_{\sigma}\sum_{\tau}\mathrm{sgn}(\tau)\,\langle\psi_{\tau(1)}|\psi'_1\rangle\cdots\langle\psi_{\tau(N)}|\psi'_N\rangle \\
&= \sum_{\tau}\mathrm{sgn}(\tau)\,\langle\psi_{\tau(1)}|\psi'_1\rangle\cdots\langle\psi_{\tau(N)}|\psi'_N\rangle \\
&= \det\begin{bmatrix}\langle\psi_1|\psi'_1\rangle & \cdots & \langle\psi_1|\psi'_N\rangle \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \langle\psi_N|\psi'_1\rangle & \cdots & \langle\psi_N|\psi'_N\rangle\end{bmatrix}
\end{aligned}
\tag{4.2.20}
$$

を得る。等式①，②において置換の符号の性質 (1.5.8) を用いた。また，等式②では左辺の $\sigma\sigma'^{-1}$ を右辺の τ に置き換えた。 ■

(4.2.19) より，V の正規直交基底 $\varphi = \{\,|a\rangle\,,\,|b\rangle\,,\,|c\rangle\,,\cdots\}$ のベクトルにより構成したスレイター行列式 $|\varphi_1\cdots\varphi_N\rangle$ の組

$$
\{\,|\varphi_1\cdots\varphi_N\rangle\mid\varphi_i = a,b,c,\cdots\ (i=1,\cdots,N)\}
\tag{4.2.21}
$$

は $\bigwedge^N V$ の正規直交基底となる。ただし，基底 φ のベクトルのラベルに対して $a < b < c < \cdots$ によって順序を定め，$|\varphi_1\cdots\varphi_N\rangle$ におけるラベルは $\varphi_1 < \cdots < \varphi_N$ の順番で配列してあるとする。このとき，

$$
\langle\varphi_1\cdots\varphi_N|\varphi'_1\cdots\varphi'_N\rangle = \begin{cases}1 & (\varphi_1=\varphi'_1,\cdots,\varphi_N=\varphi'_N) \\ 0 & (\text{上記以外})\end{cases}
\tag{4.2.22}
$$

である。基底 (4.2.21) を用いると，$\bigwedge^N V$ の一般の反対称テンソルはスレイター行列式の線形結合で表せる。したがって，演算子の性質を調べるには，それのスレイター行列式に対する作用を調べればよいといえる。

4.2.3 生成消滅演算子

V のベクトル $|\xi\rangle$ に対し演算子 $\hat{a}_\xi^\dagger$ をスレイター行列式 $|\psi_1\cdots\psi_N\rangle$ に対する作用

$$\hat{a}_\xi^\dagger\,|\psi_1\cdots\psi_N\rangle = |\xi\psi_1\cdots\psi_N\rangle \tag{4.2.23}$$

によって定義する[22]。$\hat{a}_\xi^\dagger$ を ξ の**生成演算子**といい，そのエルミート共役 $\hat{a}_\xi$ を ξ の**消滅演算子**という[23]。$\hat{a}_\xi$ の $|\psi_1\cdots\psi_N\rangle$ に対する作用は

$$\hat{a}_\xi\,|\psi_1\cdots\psi_N\rangle = \sum_{i=1}^{N}(-1)^{i-1}\,\langle\xi|\psi_i\rangle\;|\psi_1\overset{\text{no }\psi_i}{\cdots\cdots}\psi_N\rangle \tag{4.2.24}$$

によって与えられる。ただし，$\hat{a}_\xi\,|\mathrm{vac}\rangle = \mathbf{0}$ と定義する。
[(4.2.24) の証明] $\hat{a}_\xi^\dagger$ の定義 (4.2.23) より，

$$\begin{aligned}
&\langle\psi_1'\cdots\psi_{N-1}'|\hat{a}_\xi|\psi_1\cdots\psi_N\rangle = \langle\psi_1\cdots\psi_N|\hat{a}_\xi^\dagger|\psi_1'\cdots\psi_{N-1}'\rangle^* \\
&= \langle\psi_1\cdots\psi_N|\xi\psi_1'\cdots\psi_{N-1}'\rangle^* = \langle\xi\psi_1'\cdots\psi_{N-1}'|\psi_1\cdots\psi_N\rangle \\
&\overset{①}{=} \det\begin{bmatrix} \langle\xi|\psi_1\rangle & \cdots & \langle\xi|\psi_N\rangle \\ \langle\psi_1'|\psi_1\rangle & \cdots & \langle\psi_1'|\psi_N\rangle \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \langle\psi_{N-1}'|\psi_1\rangle & \cdots & \langle\psi_{N-1}'|\psi_N\rangle \end{bmatrix} \\
&\overset{②}{=} \sum_{i=1}^{N}(-1)^{i-1}\,\langle\xi|\psi_i\rangle\;\langle\psi_1'\cdots\psi_{N-1}'|\psi_1\overset{\text{no }\psi_i}{\cdots\cdots}\psi_N\rangle
\end{aligned} \tag{4.2.25}$$

を得る。等式①では (4.2.19) を用いた。等式②にでは行列式の第 1 行による余因子展開を用いた[24]。以上より，(4.2.24) が示された。 ■

V のベクトル $|\xi\rangle$，$|\eta\rangle$ に対する生成消滅演算子について，

$$\{\hat{a}_\xi^\dagger, \hat{a}_\eta^\dagger\} = 0 \qquad \{\hat{a}_\xi, \hat{a}_\eta\} = 0 \qquad \{\hat{a}_\xi, \hat{a}_\eta^\dagger\} = \langle\xi|\eta\rangle \tag{4.2.26}$$

が成り立つ[25]。ここで，2 つの演算子 $\hat{X}$ と $\hat{Y}$ の**反交換子**を

$$\{\,\hat{X}, \hat{Y}\,\} = \hat{X}\hat{Y} + \hat{Y}\hat{X} \tag{4.2.27}$$

[22] 正確にいうと $\hat{a}_\xi^\dagger$ は $\bigwedge V = \bigoplus_{N=0}^{\infty}\bigwedge^N V$ の演算子です。

[23] $\hat{a}_\xi^\dagger$ を $\hat{a}_\xi$ より先に定義するほうが議論しやすいので，このようにして進めることにします。生成消滅演算子については参考文献 [17] の第 11 章と参考文献 [18] の第 6 章が参考になります。

[24] 余因子展開については §1.5.3 の (1.5.27) を参照してください。

[25] (4.2.26) のそれぞれの式の右辺は正確に書くならば $\hat{0}$ や $\langle\xi|\eta\rangle\,\hat{I}$ などのように表すべきですが，本書では物理の流儀にしたがって (4.2.26) のように書くことにします。

によって定義した。(4.2.26) より，特に $(\hat{a}_\xi^\dagger)^2 = 0$，$(\hat{a}_\xi)^2 = 0$ である[26]。
[(4.2.26) の証明] まず，$\{\hat{a}_\xi^\dagger, \hat{a}_\eta^\dagger\} = 0$ を示す。生成演算子の定義 (4.2.23) より，

$$\hat{a}_\xi^\dagger \hat{a}_\eta^\dagger \left|\psi_1 \cdots \psi_N\right\rangle = \left|\xi\eta\psi_1 \cdots \psi_N\right\rangle = -\left|\eta\xi\psi_1 \cdots \psi_N\right\rangle = -\hat{a}_\eta^\dagger \hat{a}_\xi^\dagger \left|\psi_1 \cdots \psi_N\right\rangle \tag{4.2.28}$$

であるから，$\{\hat{a}_\xi^\dagger, \hat{a}_\eta^\dagger\} = 0$ が成り立つ。また，この式の両辺のエルミート共役をとることにより，$\{\hat{a}_\xi, \hat{a}_\eta\} = 0$ を得る。次に，$\{\hat{a}_\xi, \hat{a}_\eta^\dagger\} = \langle\xi|\eta\rangle$ を示す。(4.2.23) および (4.2.24) により，

$$\begin{aligned}
\hat{a}_\xi \hat{a}_\eta^\dagger \left|\psi_1 \cdots \psi_N\right\rangle &= \hat{a}_\xi \left|\xi\psi_1 \cdots \psi_N\right\rangle \\
&= \langle\xi|\eta\rangle \left|\psi_1 \cdots \psi_N\right\rangle + \sum_{i=1}^{N} (-1)^i \langle\xi|\psi_i\rangle \left|\eta\psi_1 \overset{\text{no } \psi_i}{\cdots\cdots} \psi_N\right\rangle \\
\hat{a}_\eta^\dagger \hat{a}_\xi \left|\psi_1 \cdots \psi_N\right\rangle &= \hat{a}_\eta^\dagger \sum_{i=1}^{N} (-1)^{i-1} \langle\xi|\psi_i\rangle \left|\psi_1 \overset{\text{no } \psi_i}{\cdots\cdots} \psi_N\right\rangle \\
&= \sum_{i=1}^{N} (-1)^{i-1} \langle\xi|\psi_i\rangle \left|\eta\psi_1 \overset{\text{no } \psi_i}{\cdots\cdots} \psi_N\right\rangle
\end{aligned} \tag{4.2.29}$$

であるから，

$$(\hat{a}_\xi \hat{a}_\eta^\dagger + \hat{a}_\eta^\dagger \hat{a}_\xi) \left|\psi_1 \cdots \psi_N\right\rangle = \langle\xi|\eta\rangle \left|\psi_1 \cdots \psi_N\right\rangle \tag{4.2.30}$$

を得る。よって，$\{\hat{a}_\xi, \hat{a}_\eta^\dagger\} = \langle\xi|\eta\rangle$ が示された。 ■

V の 2 組の正規直交基底 $\varphi = \{\left|a\right\rangle, \left|b\right\rangle, \left|c\right\rangle, \cdots\}$ と $\varphi' = \{\left|a'\right\rangle, \left|b'\right\rangle, \left|c'\right\rangle, \cdots\}$ について，

$$\hat{a}_{\varphi'}^\dagger = \sum_\varphi \langle\varphi|\varphi'\rangle \hat{a}_\varphi^\dagger \qquad\qquad \hat{a}_{\varphi'} = \sum_\varphi \langle\varphi'|\varphi\rangle \hat{a}_\varphi \tag{4.2.31}$$

が成り立つ[27]。
[(4.2.31) の証明] まず，$\psi_1' = \varphi', \psi_2' = \psi_1, \cdots, \psi_N' = \psi_{N-1}$ とおくと，

$$\hat{a}_{\varphi'}^\dagger \left|\psi_1 \cdots \psi_{N-1}\right\rangle = \left|\varphi'\psi_1 \cdots \psi_{N-1}\right\rangle = \left|\psi_1' \cdots \psi_N'\right\rangle \tag{4.2.32}$$

である。ここで，

$$\left|\psi_1' \cdots \psi_N'\right\rangle = \frac{1}{\sqrt{N!}} \sum_\sigma \mathrm{sgn}(\sigma) \left|\psi_{\sigma(1)}'\right\rangle_1 \otimes \cdots \otimes \left|\psi_1'\right\rangle_{\sigma^{-1}(1)} \otimes \cdots \otimes \left|\psi_{\sigma(N)}'\right\rangle_N \tag{4.2.33}$$

[26] この性質はパウリの排他律 (4.2.18) の別な表現だと考えることができます。
[27] (4.2.31) では基底を表す φ，φ' を基底のラベルを表す変数としても使っていますが，混乱は生じないと思います。

の $|\psi_1'\rangle_{\sigma^{-1}(1)} = |\varphi'\rangle_{\sigma^{-1}(1)}$ に

$$|\varphi'\rangle_{\sigma^{-1}(1)} = \sum_{\varphi} |\varphi\rangle_{\sigma^{-1}(1)} \langle\varphi|_{\sigma^{-1}(1)} |\varphi'\rangle_{\sigma^{-1}(1)} = \sum_{\varphi} |\varphi\rangle_{\sigma^{-1}(1)} \langle\varphi|\varphi'\rangle \tag{4.2.34}$$

を用いると，

$$\begin{aligned} |\psi_1' \cdots \psi_N'\rangle &= \sum_{\varphi} \langle\varphi|\varphi'\rangle \frac{1}{\sqrt{N!}} \sum_{\sigma} \mathrm{sgn}(\sigma) |\psi_{\sigma(1)}'\rangle_1 \otimes \cdots \otimes |\varphi\rangle_{\sigma^{-1}(1)} \otimes \cdots \otimes |\psi_{\sigma(N)}'\rangle_N \\ &= \sum_{\varphi} \langle\varphi|\varphi'\rangle |\varphi\psi_2' \cdots \psi_N'\rangle = \sum_{\varphi} \langle\varphi|\varphi'\rangle |\varphi\psi_1 \cdots \psi_{N-1}\rangle \end{aligned} \tag{4.2.35}$$

と書ける。つまり，

$$\hat{a}_{\varphi'}^{\dagger} |\psi_1 \cdots \psi_{N-1}\rangle = \sum_{\varphi} \langle\varphi|\varphi'\rangle \hat{a}_{\varphi}^{\dagger} |\psi_1 \cdots \psi_{N-1}\rangle \tag{4.2.36}$$

である。よって，(4.2.31) の第 1 式が成り立つことが示された。第 1 式の両辺のエルミート共役をとると第 2 式が得られる。 ■

4.2.4 1 体演算子と 2 体演算子

V の演算子を $\bigwedge^N V$ に拡張したものを **1 体演算子**，$V \otimes V$ の演算子を $\bigwedge^N V$ に拡張したものを **2 体演算子**という。なお，§4.2.4 では V の正規直交基底 $\varphi = \{ |a\rangle, |b\rangle, |c\rangle, \cdots \}$ のベクトルを表すラベル $a, b, c, \cdots$ の変数としてこれまで用いてきた φ_i などの代わりに α，β，α'，β' を用いることにする。一方，V の一般のベクトルを表すラベルはこれまでと同じように ψ_i，ψ_j などを用いる。

まず，1 体演算子について述べる。V の演算子

$$\hat{F}_1 = \sum_{\alpha\beta} F_{\alpha\beta} |\alpha\rangle\langle\beta| \tag{4.2.37}$$

を $V^{\otimes N}$ に拡張すると，

$$\hat{F}_N = \sum_{\alpha\beta} F_{\alpha\beta} \sum_{i=1}^{N} |\alpha\rangle_i \langle\beta|_i \tag{4.2.38}$$

となる[28]。これに対し

$$\hat{F} = \sum_{\alpha\beta} F_{\alpha\beta} \hat{a}_\alpha^\dagger \hat{a}_\beta \tag{4.2.39}$$

とおくと，$\bigwedge^N V$ において

$$\hat{F}_N = \hat{F} \tag{4.2.40}$$

である。

[(4.2.40) の証明] $\bigwedge^N V$ の反対称テンソルはスレイター行列式 $|\psi_1 \cdots \psi_N\rangle$ の線形結合で表されるから，任意の $|\psi_1 \cdots \psi_N\rangle$ に対して (4.2.40) を示せばよい。また，α, β についての和の部分は本質的でないから，

$$\sum_{i=1}^N |\alpha\rangle_i \langle\beta|_i |\psi_1 \cdots \psi_N\rangle = \hat{a}_\alpha^\dagger \hat{a}_\beta |\psi_1 \cdots \psi_N\rangle \tag{4.2.41}$$

がいえればよい。まず，(4.2.41) の左辺を計算すると，

$$\begin{aligned}
&\sum_{i=1}^N |\alpha\rangle_i \langle\beta|_i |\psi_1 \cdots \psi_N\rangle \\
&= \sum_{i=1}^N |\alpha\rangle_i \langle\beta|_i \frac{1}{\sqrt{N!}} \sum_\sigma \mathrm{sgn}(\sigma) |\psi_{\sigma(1)}\rangle_1 \otimes \cdots \otimes |\psi_{\sigma(i)}\rangle_i \otimes \cdots \otimes |\psi_{\sigma(N)}\rangle_N \\
&= \frac{1}{\sqrt{N!}} \sum_\sigma \mathrm{sgn}(\sigma) \sum_{i=1}^N \langle\beta|\psi_{\sigma(i)}\rangle |\psi_{\sigma(1)}\rangle_1 \otimes \cdots \otimes |\alpha\rangle_i \otimes \cdots \otimes |\psi_{\sigma(N)}\rangle_N \\
&\overset{①}{=} \frac{1}{\sqrt{N!}} \sum_\sigma \mathrm{sgn}(\sigma) \sum_{i=1}^N \langle\beta|\psi_i\rangle |\psi_{\sigma(1)}\rangle_1 \otimes \cdots \otimes |\alpha\rangle_{\sigma^{-1}(i)} \otimes \cdots \otimes |\psi_{\sigma(N)}\rangle_N \\
&= \sum_{i=1}^N \langle\beta|\psi_i\rangle \frac{1}{\sqrt{N!}} \sum_\sigma \mathrm{sgn}(\sigma) |\psi_{\sigma(1)}\rangle_1 \otimes \cdots \otimes |\alpha\rangle_{\sigma^{-1}(i)} \otimes \cdots \otimes |\psi_{\sigma(N)}\rangle_N \\
&= \sum_{i=1}^N \langle\beta|\psi_i\rangle |\psi_1 \cdots \underbrace{\alpha}_{i\text{ 番目}} \cdots \psi_N\rangle
\end{aligned} \tag{4.2.42}$$

[28] (4.2.38) の右辺を略さずに書くと $\sum_{\alpha\beta} F_{\alpha\beta} \sum_{i=1}^N \hat{I}_1 \otimes \cdots \otimes \hat{I}_{i-1} \otimes |\alpha\rangle_i \langle\beta|_i \otimes \hat{I}_{i+1} \otimes \cdots \otimes \hat{I}_N$ ですが，物理の流儀にしたがって恒等演算子の部分は書かずに表すことにします。

を得る。等式①では任意の置換 σ に対し $\sum_{i=1}^{N} f(\sigma(i), i) = \sum_{i=1}^{N} f(i, \sigma^{-1}(i))$ が成り立つことを用いた[29]。次に，(4.2.41) の右辺を計算すると，

$$
\begin{aligned}
&\hat{a}_\alpha^\dagger \hat{a}_\beta \left|\psi_1 \cdots \psi_N\right\rangle = \hat{a}_\alpha^\dagger \sum_{i=1}^{N} (-1)^{i-1} \left\langle \beta | \psi_i \right\rangle \left|\psi_1 \overset{\text{no } \psi_i}{\cdots\cdots} \psi_N\right\rangle \\
&= \sum_{i=1}^{N} (-1)^{i-1} \left\langle \beta | \psi_i \right\rangle \hat{a}_\alpha^\dagger \left|\psi_1 \overset{\text{no } \psi_i}{\cdots\cdots} \psi_N\right\rangle = \sum_{i=1}^{N} (-1)^{i-1} \left\langle \beta | \psi_i \right\rangle \left|\alpha \psi_1 \overset{\text{no } \psi_i}{\cdots\cdots} \psi_N\right\rangle \\
&= \sum_{i=1}^{N} \left\langle \beta | \psi_i \right\rangle \left|\psi_1 \cdots \underbrace{\alpha}_{i\text{ 番目}} \cdots \psi_N\right\rangle
\end{aligned}
\tag{4.2.43}
$$

を得る。よって，(4.2.41) が示された。 ■

重要な 1 体演算子である**数演算子** $\hat{n}_\varphi$ を

$$
\hat{n}_\varphi = \hat{a}_\varphi^\dagger \hat{a}_\varphi \tag{4.2.44}
$$

によって定義する。$\bigwedge^N V$ の場合，数演算子 $\hat{n}_\varphi$ は $\hat{n}_\varphi^2 = \hat{n}_\varphi$，$\hat{n}_\varphi^\dagger = \hat{n}_\varphi$ を満たすので正射影演算子である。したがって，その固有値は 0，1 である。固有値 0 に属する固有ベクトルは $\hat{a}_\varphi \left| \cdot \right\rangle$ の形に書ける反対称テンソルであり，固有値 1 に属する固有ベクトルは $\hat{a}_\varphi^\dagger \left| \cdot \right\rangle$ の形に書ける反対称テンソルである。特に，(4.2.21) に対し，

$$
\hat{n}_\varphi \left|\varphi_1 \cdots \varphi_N\right\rangle = \begin{cases} \left|\varphi_1 \cdots \varphi_N\right\rangle & (\varphi_1, \cdots, \varphi_N \text{の中に} \varphi \text{ がある}) \\ \mathbf{0} & (\varphi_1, \cdots, \varphi_N \text{の中に} \varphi \text{ がない}) \end{cases} \tag{4.2.45}
$$

である。

次に，2 体演算子について述べる。$V \otimes V$ の演算子

$$
\hat{G}_2 = \sum_{\alpha\beta\alpha'\beta'} G_{\alpha\beta\alpha'\beta'} \left(\left|\alpha\right\rangle_1 \left\langle \beta \right|_1 \otimes \left|\alpha'\right\rangle_2 \left\langle \beta' \right|_2 + \left|\alpha'\right\rangle_1 \left\langle \beta' \right|_1 \otimes \left|\alpha\right\rangle_2 \left\langle \beta \right|_2 \right) \tag{4.2.46}
$$

を $V^{\otimes N}$ に拡張すると，

$$
\hat{G}_N = \sum_{\alpha\beta\alpha'\beta'} G_{\alpha\beta\alpha'\beta'} \sum_{i=1}^{N} \left(\sum_{j=1}^{i-1} \left|\alpha'\right\rangle_j \left\langle \beta' \right|_j \otimes \left|\alpha\right\rangle_i \left\langle \beta \right|_i + \sum_{j=i+1}^{N} \left|\alpha\right\rangle_i \left\langle \beta \right|_i \otimes \left|\alpha'\right\rangle_j \left\langle \beta' \right|_j \right) \tag{4.2.47}
$$

[29] (4.2.42) の計算は，演算子 $\sum_{i=1}^{N} \left|\alpha\right\rangle_i \left\langle \beta \right|_i$ を σ についての和の中に入れた直後 (ベクトルに作用させる直前) に $\sum_{i=1}^{N} \left|\alpha\right\rangle_i \left\langle \beta \right|_i = \sum_{i=1}^{N} \left|\alpha\right\rangle_{\sigma^{-1}(i)} \left\langle \beta \right|_{\sigma^{-1}(i)}$ と書き換えて行っても同じ結果になります。

となる[30]。これに対し

$$\hat{G} = \sum_{\alpha\beta\alpha'\beta'} G_{\alpha\beta\alpha'\beta'} \hat{a}^\dagger_\alpha \hat{a}^\dagger_{\alpha'} \hat{a}_{\beta'} \hat{a}_\beta \tag{4.2.48}$$

とおくと，$\bigwedge^N V$ において

$$\hat{G}_N = \hat{G} \tag{4.2.49}$$

である。
[(4.2.49) の証明] $\bigwedge^N V$ の反対称テンソルはスレイター行列式 $|\psi_1 \cdots \psi_N\rangle$ の線形結合で表されるから，任意の $|\psi_1 \cdots \psi_N\rangle$ に対して (4.2.49) を示せばよい。また，α，β，α'，β' についての和の部分は本質的でないから，

$$\begin{aligned}
&\sum_{i=1}^{N} \left(\sum_{j=1}^{i-1} |\alpha'\rangle_j \langle\beta'|_j \otimes |\alpha\rangle_i \langle\beta|_i + \sum_{j=i+1}^{N} |\alpha\rangle_i \langle\beta|_i \otimes |\alpha'\rangle_j \langle\beta'|_j \right) |\psi_1 \cdots \psi_N\rangle \\
&= \hat{a}^\dagger_\alpha \hat{a}^\dagger_{\alpha'} \hat{a}_{\beta'} \hat{a}_\beta |\psi_1 \cdots \psi_N\rangle
\end{aligned} \tag{4.2.50}$$

[30] (4.2.47) の右辺を略さずに書くと $\sum_{i=1}^{N} \hat{I}_1 \otimes \cdots \otimes \hat{I}_{i-1} \otimes \left(\sum_{\alpha\beta} F_{\alpha\beta} |\alpha\rangle_i \langle\beta|_i \right) \otimes \hat{I}_{i+1} \otimes \cdots \otimes \hat{I}_N$ ですが，物理の流儀にしたがって恒等演算子の部分は書かずに表すことにします。

がいえればよい。まず，(4.2.50) の左辺を計算すると，

$$
\begin{aligned}
&\sum_{i=1}^{N}\left(\sum_{j=1}^{i-1}\left|\alpha'\right\rangle_j \left\langle\beta'\right|_j \otimes \left|\alpha\right\rangle_i \left\langle\beta\right|_i + \sum_{j=i+1}^{N}\left|\alpha\right\rangle_i \left\langle\beta\right|_i \otimes \left|\alpha'\right\rangle_j \left\langle\beta'\right|_j\right)\left|\psi_1\cdots\psi_N\right\rangle \\
&=\sum_{i=1}^{N}\left(\sum_{j=1}^{i-1}\left|\alpha'\right\rangle_j \left\langle\beta'\right|_j \otimes \left|\alpha\right\rangle_i \left\langle\beta\right|_i + \sum_{j=i+1}^{N}\left|\alpha\right\rangle_i \left\langle\beta\right|_i \otimes \left|\alpha'\right\rangle_j \left\langle\beta'\right|_j\right) \\
&\qquad\qquad\frac{1}{\sqrt{N!}}\sum_{\sigma}\mathrm{sgn}(\sigma)\left|\psi_{\sigma(1)}\right\rangle_1 \otimes\cdots\otimes \left|\psi_{\sigma(N)}\right\rangle_N \\
&=\frac{1}{\sqrt{N!}}\sum_{\sigma}\mathrm{sgn}(\sigma)\sum_{i=1}^{N}\Bigg(\sum_{j=1}^{i-1}\left|\alpha'\right\rangle_j \left\langle\beta'\right|_j \otimes \left|\alpha\right\rangle_i \left\langle\beta\right|_i \\
&\qquad\qquad\left|\psi_{\sigma(1)}\right\rangle_1 \otimes\cdots\otimes \left|\psi_{\sigma(j)}\right\rangle_j \otimes\cdots\otimes \left|\psi_{\sigma(i)}\right\rangle_i \otimes\cdots \left|\psi_{\sigma(N)}\right\rangle_N \\
&\qquad\quad+\sum_{j=i+1}^{N}\left|\alpha\right\rangle_i \left\langle\beta\right|_i \otimes \left|\alpha'\right\rangle_j \left\langle\beta'\right|_j \\
&\qquad\qquad\left|\psi_{\sigma(1)}\right\rangle_1 \otimes\cdots\otimes \left|\psi_{\sigma(i)}\right\rangle_i \otimes\cdots\otimes \left|\psi_{\sigma(j)}\right\rangle_j \otimes\cdots \left|\psi_{\sigma(N)}\right\rangle_N \Bigg) \\
&=\frac{1}{\sqrt{N!}}\sum_{\sigma}\mathrm{sgn}(\sigma)\sum_{i=1}^{N}\Bigg(\sum_{j=1}^{i-1}\left\langle\beta'|\psi_{\sigma(j)}\right\rangle \left\langle\beta|\psi_{\sigma(i)}\right\rangle \\
&\qquad\qquad\left|\psi_{\sigma(1)}\right\rangle_1 \otimes\cdots\otimes \left|\alpha'\right\rangle_j \otimes\cdots\otimes \left|\alpha\right\rangle_i \otimes\cdots \left|\psi_{\sigma(N)}\right\rangle_N \\
&\qquad\quad+\sum_{j=i+1}^{N}\left\langle\beta|\psi_{\sigma(i)}\right\rangle \left\langle\beta'|\psi_{\sigma(j)}\right\rangle \\
&\qquad\qquad\left|\psi_{\sigma(1)}\right\rangle_1 \otimes\cdots\otimes \left|\alpha\right\rangle_i \otimes\cdots\otimes \left|\alpha'\right\rangle_j \otimes\cdots \left|\psi_{\sigma(N)}\right\rangle_N \Bigg) \\
&=\frac{1}{\sqrt{N!}}\sum_{\sigma}\mathrm{sgn}(\sigma)\sum_{i\neq j}\left\langle\beta|\psi_{\sigma(i)}\right\rangle \left\langle\beta'|\psi_{\sigma(j)}\right\rangle \\
&\qquad\qquad\left|\psi_{\sigma(1)}\right\rangle_1 \otimes\cdots\otimes \Big[\left|\alpha\right\rangle_i \otimes\cdots\otimes \left|\alpha'\right\rangle_j\Big] \otimes\cdots \left|\psi_{\sigma(N)}\right\rangle_N \\
&\overset{①}{=}\frac{1}{\sqrt{N!}}\sum_{\sigma}\mathrm{sgn}(\sigma)\sum_{i\neq j}\left\langle\beta|\psi_i\right\rangle \left\langle\beta'|\psi_j\right\rangle \\
&\qquad\qquad\left|\psi_{\sigma(1)}\right\rangle_1 \otimes\cdots\otimes \Big[\left|\alpha\right\rangle_{\sigma^{-1}(i)} \otimes\cdots\otimes \left|\alpha'\right\rangle_{\sigma^{-1}(j)}\Big] \otimes\cdots \left|\psi_{\sigma(N)}\right\rangle_N \\
&=\sum_{i\neq j}\left\langle\beta|\psi_i\right\rangle \left\langle\beta'|\psi_j\right\rangle \left|\psi_1\cdots\underbrace{\alpha}_{i\,\text{番目}}\cdots\underbrace{\alpha'}_{j\,\text{番目}}\cdots\psi_N\right\rangle
\end{aligned}
\tag{4.2.51}
$$

を得る。ここで, $\sum_{i\neq j}$ は $i=j$ を除く i,j の和を意味する。また, $[\,|\alpha\rangle_i \otimes\cdots\otimes |\alpha'\rangle_j]$ は

$$\Big[\,|\alpha\rangle_i \otimes\cdots\otimes\ |\alpha'\rangle_j\Big] = \begin{cases} |\alpha'\rangle_j \otimes\cdots\otimes\ |\alpha\rangle_i & (i>j) \\ |\alpha\rangle_i \otimes\cdots\otimes\ |\alpha'\rangle_j & (i<j) \end{cases} \tag{4.2.52}$$

を意味する記号として用いた。等式①では任意の置換 σ に対し $\sum_{i\neq j} f(\sigma(i),\sigma(j),i,j) = \sum_{i\neq j} f(i,j,\sigma^{-1}(i),\sigma^{-1}(j))$ が成り立つことを用いた[31]。次に，(4.2.50) の右辺を計算すると，

$$\begin{aligned}
&\hat{a}^\dagger_\alpha \hat{a}^\dagger_{\alpha'} \hat{a}_{\beta'} \hat{a}_\beta \,|\psi_1\cdots\psi_N\rangle = \hat{a}^\dagger_\alpha \hat{a}^\dagger_{\alpha'} \hat{a}_{\beta'} \sum_{i=1}^{N} (-1)^{i-1} \langle\beta|\psi_i\rangle\ |\psi_1 \overset{\text{no }\psi_i}{\cdots\cdots} \psi_N\rangle \\
&= \hat{a}^\dagger_\alpha \hat{a}^\dagger_{\alpha'} \sum_{i=1}^{N} (-1)^{i-1} \langle\beta|\psi_i\rangle \Bigg(\sum_{j=1}^{i-1} (-1)^{j-1} \langle\beta'|\psi_j\rangle\ |\psi_1 \overset{\text{no }\psi_j}{\cdots\cdots} \overset{\text{no }\psi_i}{\cdots\cdots} \psi_N\rangle \\
&\qquad\qquad + \sum_{j=i+1}^{N} (-1)^{j-2} \langle\beta'|\psi_j\rangle\ |\psi_1 \overset{\text{no }\psi_i}{\cdots\cdots} \overset{\text{no }\psi_j}{\cdots\cdots} \psi_N\rangle \Bigg) \\
&= \hat{a}^\dagger_\alpha \sum_{i=1}^{N} (-1)^{i-1} \langle\beta|\psi_i\rangle \Bigg(\sum_{j=1}^{i-1} \langle\beta'|\psi_j\rangle\ |\psi_1 \cdots \underbrace{\alpha'}_{j\text{ 番目}} \overset{\text{no }\psi_i}{\cdots\cdots} \psi_N\rangle \\
&\qquad\qquad + \sum_{j=i+1}^{N} \langle\beta'|\psi_j\rangle\ |\psi_1 \overset{\text{no }\psi_i}{\cdots\cdots} \underbrace{\alpha'}_{j\text{ 番目}} \cdots \psi_N\rangle \Bigg) \\
&= \sum_{i=1}^{N} \langle\beta|\psi_i\rangle \Bigg(\sum_{j=1}^{i-1} \langle\beta'|\psi_j\rangle\ |\psi_1 \cdots \underbrace{\alpha'}_{j\text{ 番目}} \cdots \underbrace{\alpha}_{i\text{ 番目}} \cdots \psi_N\rangle \\
&\qquad\qquad + \sum_{j=i+1}^{N} \langle\beta'|\psi_j\rangle\ |\psi_1 \cdots \underbrace{\alpha}_{i\text{ 番目}} \cdots \underbrace{\alpha'}_{j\text{ 番目}} \cdots \psi_N\rangle \Bigg) \\
&= \sum_{i\neq j} \langle\beta|\psi_i\rangle\ \langle\beta'|\psi_j\rangle\ |\psi_1 \cdots \underbrace{\alpha}_{i\text{ 番目}} \cdots \underbrace{\alpha'}_{j\text{ 番目}} \cdots \psi_N\rangle
\end{aligned} \tag{4.2.53}$$

を得る。よって，(4.2.50) が示された。 ■

[31] (4.2.51) の計算は，演算子 $\sum_{i\neq j} |\alpha\rangle_i \langle\beta|_i \otimes |\alpha'\rangle_j \langle\beta'|_j$ を σ についての和の中に入れた直後 (ベクトルに作用させる直前) に $\sum_{i\neq j} |\alpha\rangle_i \langle\beta|_i \otimes |\alpha'\rangle_j \langle\beta'|_j = \sum_{i\neq j} |\alpha\rangle_{\sigma^{-1}(i)} \langle\beta|_{\sigma^{-1}(i)} \otimes |\alpha'\rangle_{\sigma^{-1}(j)} \langle\beta'|_{\sigma^{-1}(j)}$ と書き換えて行っても同じ結果になります。

==========

補足・計算例 34.

反対称テンソル空間

例 1：内積空間 V とその正規直交基底 $\varphi = \{\,|1\uparrow\rangle\,,\,|1\downarrow\rangle\,,\,|2\uparrow\rangle\,,\,|2\downarrow\rangle\}$ を考え，V を基に 2 次の反対称テンソル空間 $\bigwedge^2 V$ を構成する。$\bigwedge^2 V$ の基底を $e = \{\,|1\uparrow 1\downarrow\rangle\,,\,|1\uparrow 2\uparrow\rangle\,,\,|1\uparrow 2\downarrow\rangle\,,\,|1\downarrow 2\uparrow\rangle\,,\,|1\downarrow 2\downarrow\rangle\,,\,|2\uparrow 2\downarrow\rangle\}$ とすると，基底 e は正規直交基底となる。基底 e のベクトルに以下の演算子を作用させたときに $\mathbf{0}$ にならない場合について計算を示す (次の例 2 でこれらの計算が必要)。

・$\hat{a}^\dagger_{1\uparrow}\hat{a}_{1\downarrow}\hat{a}^\dagger_{1\downarrow}\hat{a}_{1\uparrow}$：

$$\begin{aligned}\hat{a}^\dagger_{1\uparrow}\hat{a}_{1\downarrow}\hat{a}^\dagger_{1\downarrow}\hat{a}_{1\uparrow}\,|1\uparrow 2\uparrow\rangle &= \hat{a}^\dagger_{1\uparrow}\hat{a}_{1\downarrow}\hat{a}^\dagger_{1\downarrow}\,|2\uparrow\rangle = \hat{a}^\dagger_{1\uparrow}\hat{a}_{1\downarrow}\,|1\downarrow 2\uparrow\rangle = \hat{a}^\dagger_{1\uparrow}\,|2\uparrow\rangle = |1\uparrow 2\uparrow\rangle \\ \hat{a}^\dagger_{1\uparrow}\hat{a}_{1\downarrow}\hat{a}^\dagger_{1\downarrow}\hat{a}_{1\uparrow}\,|1\uparrow 2\downarrow\rangle &= \hat{a}^\dagger_{1\uparrow}\hat{a}_{1\downarrow}\hat{a}^\dagger_{1\downarrow}\,|2\downarrow\rangle = \hat{a}^\dagger_{1\uparrow}\hat{a}_{1\downarrow}\,|1\downarrow 2\downarrow\rangle = \hat{a}^\dagger_{1\uparrow}\,|2\uparrow\rangle = |1\uparrow 2\downarrow\rangle\end{aligned} \tag{4.2.54}$$

・$\hat{a}^\dagger_{1\downarrow}\hat{a}_{1\uparrow}\hat{a}^\dagger_{1\uparrow}\hat{a}_{1\downarrow}$：同様に $\hat{a}^\dagger_{1\downarrow}\hat{a}_{1\uparrow}\hat{a}^\dagger_{1\uparrow}\hat{a}_{1\downarrow}\,|1\downarrow 2\uparrow\rangle = |1\downarrow 2\uparrow\rangle$，$\hat{a}^\dagger_{1\downarrow}\hat{a}_{1\uparrow}\hat{a}^\dagger_{1\uparrow}\hat{a}_{1\downarrow}\,|1\downarrow 2\downarrow\rangle = |1\downarrow 2\downarrow\rangle$

・$\hat{a}^\dagger_{2\uparrow}\hat{a}_{2\downarrow}\hat{a}^\dagger_{2\downarrow}\hat{a}_{2\uparrow}$：

$$\begin{aligned}\hat{a}^\dagger_{2\uparrow}\hat{a}_{2\downarrow}\hat{a}^\dagger_{2\downarrow}\hat{a}_{2\uparrow}\,|1\uparrow 2\uparrow\rangle &= -\hat{a}^\dagger_{2\uparrow}\hat{a}_{2\downarrow}\hat{a}^\dagger_{2\downarrow}\hat{a}_{2\uparrow}\,|2\uparrow 1\uparrow\rangle = -\hat{a}^\dagger_{2\uparrow}\hat{a}_{2\downarrow}\hat{a}^\dagger_{2\downarrow}\,|1\uparrow\rangle \\ &= -\hat{a}^\dagger_{2\uparrow}\hat{a}_{2\downarrow}\,|2\downarrow 1\uparrow\rangle = -\hat{a}^\dagger_{2\uparrow}\,|1\uparrow\rangle = -\,|2\uparrow 1\uparrow\rangle = |1\uparrow 2\uparrow\rangle \\ \hat{a}^\dagger_{2\uparrow}\hat{a}_{2\downarrow}\hat{a}^\dagger_{2\downarrow}\hat{a}_{2\uparrow}\,|1\downarrow 2\uparrow\rangle &= -\hat{a}^\dagger_{2\uparrow}\hat{a}_{2\downarrow}\hat{a}^\dagger_{2\downarrow}\hat{a}_{2\uparrow}\,|2\uparrow 1\downarrow\rangle = -\hat{a}^\dagger_{2\uparrow}\hat{a}_{2\downarrow}\hat{a}^\dagger_{2\downarrow}\,|1\downarrow\rangle \\ &= -\hat{a}^\dagger_{2\uparrow}\hat{a}_{2\downarrow}\,|2\downarrow 1\downarrow\rangle = -\hat{a}^\dagger_{2\uparrow}\,|1\downarrow\rangle = -\,|2\uparrow 1\downarrow\rangle = |1\downarrow 2\uparrow\rangle\end{aligned} \tag{4.2.55}$$

・$\hat{a}^\dagger_{2\downarrow}\hat{a}_{2\uparrow}\hat{a}^\dagger_{2\uparrow}\hat{a}_{2\downarrow}$：同様に $\hat{a}^\dagger_{2\downarrow}\hat{a}_{2\uparrow}\hat{a}^\dagger_{2\uparrow}\hat{a}_{2\downarrow}\,|1\uparrow 2\downarrow\rangle = |1\uparrow 2\downarrow\rangle$，$\hat{a}^\dagger_{2\downarrow}\hat{a}_{2\uparrow}\hat{a}^\dagger_{2\uparrow}\hat{a}_{2\downarrow}\,|1\downarrow 2\downarrow\rangle = |1\downarrow 2\downarrow\rangle$

・$\hat{a}^\dagger_{1\uparrow}\hat{a}_{1\downarrow}\hat{a}^\dagger_{2\downarrow}\hat{a}_{2\uparrow}$：

$$\begin{aligned}\hat{a}^\dagger_{1\uparrow}\hat{a}_{1\downarrow}\hat{a}^\dagger_{2\downarrow}\hat{a}_{2\uparrow}\,|1\downarrow 2\uparrow\rangle &= -\hat{a}^\dagger_{1\uparrow}\hat{a}_{1\downarrow}\hat{a}^\dagger_{2\downarrow}\hat{a}_{2\uparrow}\,|2\uparrow 1\downarrow\rangle = -\hat{a}^\dagger_{1\uparrow}\hat{a}_{1\downarrow}\hat{a}^\dagger_{2\downarrow}\,|1\downarrow\rangle \\ &= -\hat{a}^\dagger_{1\uparrow}\hat{a}_{1\downarrow}\,|2\downarrow 1\downarrow\rangle = \hat{a}^\dagger_{1\uparrow}\hat{a}_{1\downarrow}\,|1\downarrow 2\downarrow\rangle = \hat{a}^\dagger_{1\uparrow}\,|2\downarrow\rangle = |1\uparrow 2\downarrow\rangle\end{aligned} \tag{4.2.56}$$

・$\hat{a}^\dagger_{1\downarrow}\hat{a}_{1\uparrow}\hat{a}^\dagger_{2\uparrow}\hat{a}_{2\downarrow}$：同様に $\hat{a}^\dagger_{1\downarrow}\hat{a}_{1\uparrow}\hat{a}^\dagger_{2\uparrow}\hat{a}_{2\downarrow}\,|1\uparrow 2\downarrow\rangle = |1\downarrow 2\uparrow\rangle$

例 2：補足・計算例 33 の例 3 と類似の問題を反対称テンソル空間の場合に扱ってみる[32]。内積空間 V とその正規直交基底 $\varphi = \{\,|1\uparrow\rangle\,,\,|1\downarrow\rangle\,,\,|2\uparrow\rangle\,,\,|2\downarrow\rangle\}$ を考え，V を基に 2 次の反対称テンソル空間 $\bigwedge^2 V$ を構成する。$\bigwedge^2 V$ の基底を $e = \{\,|1\uparrow 1\downarrow\rangle\,,\,|1\uparrow 2\uparrow\rangle\,,\,|1\uparrow 2\downarrow\rangle\,,\,|1\downarrow 2\uparrow\rangle\,,\,|1\downarrow 2\downarrow\rangle\,,\,|2\uparrow 2\downarrow\rangle\}$ とすると，基底 e は正規直交基底となる。正射影演算子 $\hat{P}$，$\hat{Q}$ を

$$\begin{aligned}\hat{P} &= |1\uparrow 2\uparrow\rangle\langle 1\uparrow 2\uparrow| + |1\uparrow 2\downarrow\rangle\langle 1\uparrow 2\downarrow| + |1\downarrow 2\uparrow\rangle\langle 1\downarrow 2\uparrow| + |1\downarrow 2\downarrow\rangle\langle 1\downarrow 2\downarrow| \\ \hat{Q} &= |1\uparrow 1\downarrow\rangle\langle 1\uparrow 1\downarrow| + |2\uparrow 2\downarrow\rangle\langle 2\uparrow 2\downarrow|\end{aligned} \tag{4.2.57}$$

によって定義する。$W = \operatorname{im}\hat{P}$ とおくと $W^\perp = \operatorname{im}\hat{Q}$ であり，

$$\begin{aligned}W &= \operatorname{span}(\,|1\uparrow 2\uparrow\rangle\,,\,|1\uparrow 2\downarrow\rangle\,,\,|1\downarrow 2\uparrow\rangle\,,\,|1\downarrow 2\downarrow\rangle) \\ W^\perp &= \operatorname{span}(\,|1\uparrow 1\downarrow\rangle\,,\,|2\uparrow 2\downarrow\rangle)\end{aligned} \tag{4.2.58}$$

[32] ここでは 2 個の電子のような同じ種類のスピン 1/2 の粒子を考えています。

と書ける。全スピン角運動量演算子 $\hat{\boldsymbol{S}} = \hat{S}_x\,\boldsymbol{e}_x + \hat{S}_y\,\boldsymbol{e}_y + \hat{S}_z\,\boldsymbol{e}_z$ はパウリ行列 $\boldsymbol{\sigma} = \sigma_x\,\boldsymbol{e}_x + \sigma_y\,\boldsymbol{e}_y + \sigma_z\,\boldsymbol{e}_z$ を用いて

$$\hat{\boldsymbol{S}} = \frac{1}{2}[\,\hat{a}_{1\uparrow}^\dagger\ \hat{a}_{1\downarrow}^\dagger\,]\boldsymbol{\sigma}\begin{bmatrix}\hat{a}_{1\uparrow}\\ \hat{a}_{1\downarrow}\end{bmatrix} + \frac{1}{2}[\,\hat{a}_{2\uparrow}^\dagger\ \hat{a}_{2\downarrow}^\dagger\,]\boldsymbol{\sigma}\begin{bmatrix}\hat{a}_{2\uparrow}\\ \hat{a}_{2\downarrow}\end{bmatrix} \tag{4.2.59}$$

によって定義される。つまり，

$$\begin{aligned}
\hat{S}_x &= \frac{1}{2}(\hat{a}_{1\uparrow}^\dagger\hat{a}_{1\downarrow} + \hat{a}_{1\downarrow}^\dagger\hat{a}_{1\uparrow} + \hat{a}_{2\uparrow}^\dagger\hat{a}_{2\downarrow} + \hat{a}_{2\downarrow}^\dagger\hat{a}_{2\uparrow})\\
\hat{S}_y &= \frac{1}{2i}(\hat{a}_{1\uparrow}^\dagger\hat{a}_{1\downarrow} - \hat{a}_{1\downarrow}^\dagger\hat{a}_{1\uparrow} + \hat{a}_{2\uparrow}^\dagger\hat{a}_{2\downarrow} - \hat{a}_{2\downarrow}^\dagger\hat{a}_{2\uparrow})\\
\hat{S}_z &= \frac{1}{2}(\hat{a}_{1\uparrow}^\dagger\hat{a}_{1\uparrow} - \hat{a}_{1\downarrow}^\dagger\hat{a}_{1\downarrow} + \hat{a}_{2\uparrow}^\dagger\hat{a}_{2\uparrow} - \hat{a}_{2\downarrow}^\dagger\hat{a}_{2\downarrow})
\end{aligned} \tag{4.2.60}$$

である。全スピン角運動量演算子の 2 乗 $\hat{\boldsymbol{S}}^2 = \hat{S}_x^2 + \hat{S}_y^2 + \hat{S}_z^2$ は

$$\begin{aligned}
\hat{\boldsymbol{S}}^2 &= \frac{1}{2}(\hat{a}_{1\uparrow}^\dagger\hat{a}_{1\downarrow}\hat{a}_{1\downarrow}^\dagger\hat{a}_{1\uparrow} + \hat{a}_{1\downarrow}^\dagger\hat{a}_{1\uparrow}\hat{a}_{1\uparrow}^\dagger\hat{a}_{1\downarrow} + \hat{a}_{1\uparrow}^\dagger\hat{a}_{1\downarrow}\hat{a}_{2\downarrow}^\dagger\hat{a}_{2\uparrow} + \hat{a}_{2\downarrow}^\dagger\hat{a}_{2\uparrow}\hat{a}_{1\uparrow}^\dagger\hat{a}_{1\downarrow}\\
&\qquad + \hat{a}_{1\downarrow}^\dagger\hat{a}_{1\uparrow}\hat{a}_{2\uparrow}^\dagger\hat{a}_{2\downarrow} + \hat{a}_{2\uparrow}^\dagger\hat{a}_{2\downarrow}\hat{a}_{1\downarrow}^\dagger\hat{a}_{1\uparrow} + \hat{a}_{2\uparrow}^\dagger\hat{a}_{2\downarrow}\hat{a}_{2\downarrow}^\dagger\hat{a}_{2\uparrow} + \hat{a}_{2\downarrow}^\dagger\hat{a}_{2\uparrow}\hat{a}_{2\uparrow}^\dagger\hat{a}_{2\downarrow})\\
&\quad + \frac{1}{4}(\hat{n}_{1\uparrow}^2 + \hat{n}_{1\downarrow}^2 + \hat{n}_{2\uparrow}^2 + \hat{n}_{2\downarrow}^2\\
&\qquad - 2\hat{n}_{1\uparrow}\hat{n}_{1\downarrow} + 2\hat{n}_{1\uparrow}\hat{n}_{2\uparrow} - 2\hat{n}_{1\uparrow}\hat{n}_{2\downarrow} - 2\hat{n}_{1\downarrow}\hat{n}_{2\uparrow} + 2\hat{n}_{1\downarrow}\hat{n}_{2\downarrow} - 2\hat{n}_{2\uparrow}\hat{n}_{2\downarrow})\\
&= \frac{1}{2}(\hat{a}_{1\uparrow}^\dagger\hat{a}_{1\downarrow}\hat{a}_{1\downarrow}^\dagger\hat{a}_{1\uparrow} + \hat{a}_{1\downarrow}^\dagger\hat{a}_{1\uparrow}\hat{a}_{1\uparrow}^\dagger\hat{a}_{1\downarrow} + \hat{a}_{2\uparrow}^\dagger\hat{a}_{2\downarrow}\hat{a}_{2\downarrow}^\dagger\hat{a}_{2\uparrow} + \hat{a}_{2\downarrow}^\dagger\hat{a}_{2\uparrow}\hat{a}_{2\uparrow}^\dagger\hat{a}_{2\downarrow})\\
&\qquad\qquad + \hat{a}_{1\uparrow}^\dagger\hat{a}_{1\downarrow}\hat{a}_{2\downarrow}^\dagger\hat{a}_{2\uparrow} + \hat{a}_{1\downarrow}^\dagger\hat{a}_{1\uparrow}\hat{a}_{2\uparrow}^\dagger\hat{a}_{2\downarrow}\\
&\quad + \frac{1}{4}(\hat{n}_{1\uparrow} + \hat{n}_{1\downarrow} + \hat{n}_{2\uparrow} + \hat{n}_{2\downarrow}\\
&\qquad - 2\hat{n}_{1\uparrow}\hat{n}_{1\downarrow} + 2\hat{n}_{1\uparrow}\hat{n}_{2\uparrow} - 2\hat{n}_{1\uparrow}\hat{n}_{2\downarrow} - 2\hat{n}_{1\downarrow}\hat{n}_{2\uparrow} + 2\hat{n}_{1\downarrow}\hat{n}_{2\downarrow} - 2\hat{n}_{2\uparrow}\hat{n}_{2\downarrow})
\end{aligned} \tag{4.2.61}$$

と書ける。ここで，$\hat{S}_z^2$ の項は数演算子 $\hat{n}_\varphi = \hat{a}_\varphi^\dagger\hat{a}_\varphi$ を用いて表した。$\hat{I}_{\bigwedge^2 V} = \hat{P} + \hat{Q}$ より，$\hat{\boldsymbol{S}}^2 = \hat{\boldsymbol{S}}^2\hat{P} + \hat{\boldsymbol{S}}^2\hat{Q}$ と書ける。まず $\hat{\boldsymbol{S}}^2\hat{P}$ を計算すると，

$$\begin{aligned}
\hat{\boldsymbol{S}}^2\hat{P} &= |1\uparrow 2\uparrow\rangle\langle 1\uparrow 2\uparrow| + |1\uparrow 2\downarrow\rangle\langle 1\uparrow 2\downarrow| + |1\downarrow 2\uparrow\rangle\langle 1\downarrow 2\uparrow| + |1\downarrow 2\downarrow\rangle\langle 1\downarrow 2\downarrow|\\
&\quad + |1\uparrow 2\downarrow\rangle\langle 1\downarrow 2\uparrow| + |1\downarrow 2\uparrow\rangle\langle 1\uparrow 2\downarrow| + |1\uparrow 2\uparrow\rangle\langle 1\uparrow 2\uparrow| + |1\downarrow 2\downarrow\rangle\langle 1\downarrow 2\downarrow|\\
&= 2(\,|1\uparrow 2\uparrow\rangle\langle 1\uparrow 2\uparrow| + |1\downarrow 2\downarrow\rangle\langle 1\downarrow 2\downarrow|) + [\,|1\uparrow 2\downarrow\rangle\ \ |1\downarrow 2\uparrow\rangle\,]\begin{bmatrix}1 & 1\\ 1 & 1\end{bmatrix}\begin{bmatrix}\langle 1\uparrow 2\downarrow|\\ \langle 1\downarrow 2\uparrow|\end{bmatrix}\\
&= 2(\,|\mathrm{T}_{+1}\rangle\langle\mathrm{T}_{+1}| + |\mathrm{T}_{-1}\rangle\langle\mathrm{T}_{-1}|) + [\,|\mathrm{T}_0\rangle\ \ |\mathrm{S}\rangle\,]\begin{bmatrix}2 & 0\\ 0 & 0\end{bmatrix}\begin{bmatrix}\langle\mathrm{T}_0|\\ \langle\mathrm{S}|\end{bmatrix}\\
&= 0\cdot|\mathrm{S}\rangle\langle\mathrm{S}| + 2\cdot(\,|\mathrm{T}_{+1}\rangle\langle\mathrm{T}_{+1}| + |\mathrm{T}_0\rangle\langle\mathrm{T}_0| + |\mathrm{T}_{-1}\rangle\langle\mathrm{T}_{-1}|)
\end{aligned} \tag{4.2.62}$$

を得る。ここで，

$$|\mathrm{S}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(\,|1\uparrow 2\downarrow\rangle - |1\downarrow 2\uparrow\rangle) \tag{4.2.63}$$

$$|\mathrm{T}_{+1}\rangle = |1\uparrow 2\uparrow\rangle \quad |\mathrm{T}_0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(\,|1\uparrow 2\downarrow\rangle + |1\downarrow 2\uparrow\rangle) \quad |\mathrm{T}_{-1}\rangle = |1\downarrow 2\downarrow\rangle \tag{4.2.64}$$

とおいた。(4.2.62) の最右辺は W の演算子としての $\hat{\boldsymbol{S}}^2$ のスペクトル分解であり，(4.2.63)，(4.2.64) のベクトルは $\hat{\boldsymbol{S}}^2$ の固有ベクトルである。$\hat{\boldsymbol{S}}^2$ の固有値，固有ベクトルは

$$\begin{aligned} &\text{固有値：}0, \quad \text{固有ベクトル：}|\mathrm{S}\rangle \\ &\text{固有値：}2, \quad \text{固有ベクトル：}|\mathrm{T}_{+1}\rangle\,,\ |\mathrm{T}_0\rangle\,,\ |\mathrm{T}_{-1}\rangle \end{aligned} \tag{4.2.65}$$

である。また，(4.2.63)，(4.2.64) のベクトルは $\hat{S}_z$ の固有ベクトルにもなっている。$\hat{S}_z$ の固有値，固有ベクトルは

$$\begin{aligned} &\text{固有値：}+1, \quad \text{固有ベクトル：}|\mathrm{T}_{+1}\rangle \\ &\text{固有値：}\ \ 0, \quad \text{固有ベクトル：}|\mathrm{S}\rangle\,,\ |\mathrm{T}_0\rangle \\ &\text{固有値：}-1, \quad \text{固有ベクトル：}|\mathrm{T}_{-1}\rangle \end{aligned} \tag{4.2.66}$$

である。一方，$\hat{\boldsymbol{S}}^2\hat{Q}$ については

$$\hat{\boldsymbol{S}}^2\hat{Q} = 0 \tag{4.2.67}$$

であるから，$W^\perp$ のベクトルは $\hat{\boldsymbol{S}}^2$ の固有値 0 に属する。$W^\perp$ のベクトルは $\hat{S}_z$ の固有値 0 に属することも明らかである。以上より，$|\mathrm{S}\rangle$ および $W^\perp$ のベクトルはスピン 1 重項状態を表し，$|\mathrm{T}_{+1}\rangle$，$|\mathrm{T}_0\rangle$，$|\mathrm{T}_{-1}\rangle$ はスピン 3 重項状態を表せることがわかる。

例 3：反交換関係 $\{\hat{a}, \hat{a}^\dagger\} = 1$ を満たす生成消滅演算子 $\hat{a}$，$\hat{a}^\dagger$ と複素数 λ を用いて演算子 $\hat{a}(\lambda)$ および $\hat{a}^\dagger(\lambda)$ を

$$\hat{a}(\lambda) = e^{\lambda\hat{n}}\hat{a}e^{-\lambda\hat{n}} \qquad\qquad \hat{a}^\dagger(\lambda) = e^{\lambda\hat{n}}\hat{a}^\dagger e^{-\lambda\hat{n}} \tag{4.2.68}$$

によって定義する。ここで，$\hat{n} = \hat{a}^\dagger\hat{a}$ は数演算子である。演算子の指数関数の定義 (2.2.49)，および，$\hat{n}\hat{a} = \hat{a}^\dagger\hat{a}^2 = 0$，$\hat{a}\hat{n} = \hat{a}\hat{a}^\dagger\hat{a} = (1 - \hat{a}^\dagger\hat{a})\hat{a} = \hat{a}$ より，

$$\hat{a}(\lambda) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-\lambda)^n}{n!}\hat{a} \tag{4.2.69}$$

と書けるから，

$$\hat{a}(\lambda) = \hat{a}e^{-\lambda} \tag{4.2.70}$$

を得る。また，(4.2.68) より $\hat{a}(\lambda)^\dagger = \hat{a}^\dagger(-\lambda^*)$ であるから，

$$\hat{a}^\dagger(\lambda) = \hat{a}^\dagger e^{\lambda} \tag{4.2.71}$$

を得る。

==========

4.3 対称テンソル空間

4.3.1 対称テンソル空間

反対称テンソル空間 $\bigwedge^N V$ と並んで重要なテンソル空間 $V^{\otimes N}$ の部分空間として対称テンソル空間 $\bigvee^N V$ がある。$\bigvee^N V$ についての議論は $\bigwedge^N V$ についての場合と

ほとんど同じように進めることができるので，対称テンソル空間に特有の性質以外についての記述は要点をまとめる程度に留める。

対称化演算子 $\hat{S}_N$ を

$$\hat{S}_N = \frac{1}{N!}\sum_{\sigma}\hat{\sigma} \tag{4.3.1}$$

によって定義する[33]。このとき，

$$\hat{S}_N^2 = \hat{S}_N \qquad\qquad \hat{S}_N^\dagger = \hat{S}_N \tag{4.3.2}$$

が成り立つ。つまり，$\hat{S}_N$ は $V^{\otimes N}$ の正射影である。$\hat{S}_N$ の像 $\operatorname{im}\hat{S}_N$ は $V^{\otimes N}$ の部分空間となる。これを $\bigvee^N V$ と表し，N 次の**対称テンソル空間**という。また，$\bigvee^N V$ の元を N 次の**対称テンソル**という[34]。さらに，$N=0$ のときにも**真空状態** $|\mathrm{vac}\rangle$ を導入して $\bigvee^0 V = \mathrm{span}(|\mathrm{vac}\rangle)$ と考えることにする。

4.3.2 単純対称テンソル

V の N 個のベクトル $|\psi_1\rangle, \cdots, |\psi_N\rangle$ を用いて，$\bigvee^N V$ の対称テンソル $|\psi_1\cdots\psi_N\rangle$ を

$$|\psi_1\cdots\psi_N\rangle = \sqrt{N!}\hat{S}_N\,|\psi_1\rangle_1 \otimes\cdots\otimes\, |\psi_N\rangle_N \tag{4.3.3}$$

によって定義する。$|\psi_1\cdots\psi_N\rangle$ は

$$\begin{aligned}|\psi_1\cdots\psi_N\rangle &= \frac{1}{\sqrt{N!}}\sum_{\sigma}|\psi_{\sigma(1)}\rangle_1 \otimes\cdots\otimes\, |\psi_{\sigma(N)}\rangle_N \\ &= \frac{1}{\sqrt{N!}}\,\mathrm{perm}\begin{bmatrix} |\psi_1\rangle_1 & \cdots & |\psi_1\rangle_N \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ |\psi_N\rangle_1 & \cdots & |\psi_N\rangle_N \end{bmatrix}\end{aligned} \tag{4.3.4}$$

と表せる[35]。$|\psi_1\cdots\psi_N\rangle$ を**単純対称テンソル**という[36]。単純対称テンソルについて，

$$|\psi_{\sigma(1)}\cdots\psi_{\sigma(N)}\rangle = |\psi_1\cdots\psi_N\rangle \tag{4.3.5}$$

[33]反対称化演算子 $\hat{A}_N$ の定義 (4.2.10) と違うのは，置換の符号 $\mathrm{sgn}(\sigma)$ が 1 に置き換わっているという点です。

[34]多粒子系の量子力学において，N 個のボース粒子からなる系の状態は N 次対称テンソルで表されます。例として N 個の ^{4}He からなる系などがあります。

[35](4.3.4) の $\mathrm{perm}[\cdots]$ は**パーマネント**とよばれ，正方行列 A に対し $\mathrm{perm}\,A$ のように表されます。

[36]一般の対称テンソルは単純対称テンソルの線形結合で表せるので，対称テンソル空間の演算子はその単純対称テンソルへの作用が与えられれば定まることになります。

が成り立つ。特に，ψ_i と ψ_j を入れ替えると，

$$|\psi_1 \cdots \psi_j \cdots \psi_i \cdots \psi_N\rangle = |\psi_1 \cdots \psi_i \cdots \psi_j \cdots \psi_N\rangle \tag{4.3.6}$$

である。注意すべきは，スレイター行列式の性質 (4.2.18) とは異なり，$\psi_i = \psi_j$ $(i \neq j)$ であっても $|\psi_1 \cdots \psi_i \cdots \psi_j \cdots \psi_N\rangle$ は $\mathbf{0}$ にはならないという点である[37]。2 つの単純対称テンソル $|\psi_1 \cdots \psi_N\rangle$ と $|\psi'_1 \cdots \psi'_N\rangle$ の間の内積は

$$\langle \psi_1 \cdots \psi_N | \psi'_1 \cdots \psi'_N\rangle = \mathrm{perm} \begin{bmatrix} \langle \psi_1 | \psi'_1\rangle & \cdots & \langle \psi_1 | \psi'_N\rangle \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \langle \psi_N | \psi'_1\rangle & \cdots & \langle \psi_N | \psi'_N\rangle \end{bmatrix} \tag{4.3.7}$$

と表せる。(4.3.7) より，V の正規直交基底 $\varphi = \{\, |a\rangle\,, |b\rangle\,, |c\rangle\,, \cdots\}$ のベクトルにより構成した単純対称テンソル $|n_a\, n_b\, n_c\, \cdots\rangle$ を

$$|n_a\, n_b\, n_c\, \cdots\rangle = \frac{1}{\sqrt{n_a! n_b! n_c! \cdots}}\, |\varphi_1 \cdots \varphi_N\rangle \tag{4.3.8}$$

とおくと，

$$\{\, |n_a\, n_b\, n_c\, \cdots\rangle \mid n_\varphi = 0, 1, 2, \cdots\ (\varphi = a, b, c, \cdots)\} \tag{4.3.9}$$

は $\bigvee^N V$ の正規直交基底となる[38]。ただし，基底 φ のベクトルのラベルに対して $a < b < c < \cdots$ によって順序を定め，$|\varphi_1 \cdots \varphi_N\rangle$ におけるラベルは $\varphi_1 \leq \cdots \leq \varphi_N$ の順番で配列してあるとする[39]。また，$n_a, n_b, n_c, \cdots$ はラベルの並び $\varphi_1 \cdots \varphi_N$ の中に $a, b, c, \cdots$ が現れる回数を表し，$n_a + n_b + n_c + \cdots = N$ である。このとき，

$$\langle n_a\, n_b\, n_c\, \cdots | n'_a\, n'_b\, n'_c\, \cdots\rangle = \begin{cases} 1 & (n_a = n'_a, n_b = n'_b, n_c = n'_c, \cdots) \\ 0 & (\text{上記以外}) \end{cases} \tag{4.3.10}$$

である。基底 (4.3.9) を用いると，$\bigvee^N V$ の一般の対称テンソルは単純対称テンソルの線形結合で表せる。したがって，演算子の性質を調べるには，それの単純対称テンソルに対する作用を調べればよいといえる。

---

[37] これはボース粒子は同じ一粒子状態に何個でも入れるという性質を表しています。この性質がレーザーのコヒーレント状態，液体 ^{4}He の超流動状態，金属電子系の超伝導状態などの起源となります。

[38] (4.3.8) の右辺にある正規化の因子 $1/\sqrt{n_a! n_b! n_c! \cdots}$ は，(i, j) 成分がすべて 1 の n_φ 次正方行列のパーマネントを計算すると $n_\varphi!$ になることから理解できます。

[39] スレイター行列式の場合は $\varphi_1 < \cdots < \varphi_N$ のように等号無し不等号でしたが，単純対称テンソルの場合は $\varphi_1 \leq \cdots \leq \varphi_N$ のように等号付き不等号だということに注意しましょう。

4.3.3 生成消滅演算子

反対称テンソル空間の場合と同様に対称テンソル空間にける生成消滅演算子を以下のように導入する。V のベクトル $|\xi\rangle$ に対し演算子 $\hat{a}_\xi^\dagger$ を単純対称テンソル $|\psi_1\cdots\psi_N\rangle$ に対する作用

$$\hat{a}_\xi^\dagger\,|\psi_1\cdots\psi_N\rangle = |\xi\psi_1\cdots\psi_N\rangle \tag{4.3.11}$$

によって定義する。$\hat{a}_\xi^\dagger$ を ξ の生成演算子といい，そのエルミート共役 $\hat{a}_\xi$ を ξ の消滅演算子という。$\hat{a}_\xi$ の $|\psi_1\cdots\psi_N\rangle$ に対する作用は

$$\hat{a}_\xi\,|\psi_1\cdots\psi_N\rangle = \sum_{i=1}^{N}\langle\xi|\psi_i\rangle\;|\psi_1\overset{\text{no }\psi_i}{\cdots\cdots}\psi_N\rangle \tag{4.3.12}$$

によって与えられる。ただし，$\hat{a}_\xi\,|\mathrm{vac}\rangle = \mathbf{0}$ と定義する。V のベクトル $|\xi\rangle$，$|\eta\rangle$ に対する生成消滅演算子について，

$$[\,\hat{a}_\xi^\dagger,\hat{a}_\eta^\dagger\,] = 0 \qquad [\,\hat{a}_\xi,\hat{a}_\eta\,] = 0 \qquad [\,\hat{a}_\xi,\hat{a}_\eta^\dagger\,] = \langle\xi|\eta\rangle \tag{4.3.13}$$

が成り立つ[40]。ここで，$[\,\hat{X},\hat{Y}\,]$ は (2.2.7) で定義した 2 つの演算子 $\hat{X}$ と $\hat{Y}$ の交換子である。また，V の 2 組の正規直交基底 $\varphi = \{\,|a\rangle\,,|b\rangle\,,|c\rangle\,,\cdots\}$ と $\varphi' = \{\,|a'\rangle\,,|b'\rangle\,,|c'\rangle\,,\cdots\}$ について，

$$\hat{a}_{\varphi'}^\dagger = \sum_\varphi\langle\varphi|\varphi'\rangle\,\hat{a}_\varphi^\dagger \qquad\qquad \hat{a}_{\varphi'} = \sum_\varphi\langle\varphi'|\varphi\rangle\,\hat{a}_\varphi \tag{4.3.14}$$

が成り立つ。

4.3.4 1 体演算子と 2 体演算子

反対称テンソル空間の場合と同様に対称テンソル空間にける 1 体演算子と 2 体演算子を以下のように導入する。V の演算子を $\bigvee^N V$ に拡張したものを **1 体演算子**，$V\otimes V$ の演算子を $\bigvee^N V$ に拡張したものを **2 体演算子**という。

V の演算子

$$\hat{F}_1 = \sum_{\alpha\beta}F_{\alpha\beta}\,|\alpha\rangle\langle\beta| \tag{4.3.15}$$

[40] $|\xi\rangle$ と $|\eta\rangle$ を同一の正規化されたベクトルとすると，(4.3.13) は量子力学で調和振動子を扱う際に用いられる生成消滅演算子の満たす交換関係と一致します。このことから，ボース粒子系は調和振動子の集まりと等価であることがわかります。

を $V^{\otimes N}$ に拡張すると，

$$\hat{F}_N = \sum_{\alpha\beta} F_{\alpha\beta} \sum_{i=1}^{N} |\alpha\rangle_i \langle\beta|_i \tag{4.3.16}$$

となる[41]。これに対し

$$\hat{F} = \sum_{\alpha\beta} F_{\alpha\beta} \hat{a}_\alpha^\dagger \hat{a}_\beta \tag{4.3.17}$$

とおくと，$\bigvee^N V$ において

$$\hat{F}_N = \hat{F} \tag{4.3.18}$$

である。重要な 1 体演算子である**数演算子** $\hat{n}_\varphi$ を

$$\hat{n}_\varphi = \hat{a}_\varphi^\dagger \hat{a}_\varphi \tag{4.3.19}$$

によって定義する。$\hat{n}_\varphi$ はエルミート演算子であり，$\hat{n}_\varphi^\dagger = \hat{n}_\varphi$ を満たす。このとき，ν を零または正の整数 $(\nu = 0, 1, 2, \cdots)$ として

$$\hat{n}_\varphi |\nu *\rangle = \nu |\nu *\rangle \qquad |\nu *\rangle = \frac{1}{\sqrt{\nu!}} (\hat{a}_\varphi^\dagger)^\nu |*\rangle \tag{4.3.20}$$

が成り立つ。つまり，$\hat{n}_\varphi$ の固有値は零または正の整数 ν であり，固有値 ν に属する固有ベクトルは $|\nu *\rangle$ である。ただし，$|*\rangle$ は $\ker \hat{n}_\varphi$ の任意の対称テンソルであり，もし $|*\rangle$ が正規化されているならば $|\nu *\rangle$ も正規化されている[42]。$\hat{a}_\varphi^\dagger$，$\hat{a}_\varphi$ の $|\nu *\rangle$ に対する作用は

$$\hat{a}_\varphi^\dagger |\nu *\rangle = \sqrt{\nu + 1} |\nu + 1 *\rangle \qquad \hat{a}_\varphi |\nu *\rangle = \sqrt{\nu} |\nu - 1 *\rangle \tag{4.3.21}$$

である。

[(4.3.20) の証明] $\hat{a}_\varphi |\mathrm{vac}\rangle = \mathbf{0}$ より $\hat{n}_\varphi |\mathrm{vac}\rangle = \mathbf{0}$ であるから，φ 以外のラベルをもつ任意の生成演算子を任意の回数 $|\mathrm{vac}\rangle$ に作用させて得られる対称テンソルの線形結合の全体は $\ker \hat{n}_\varphi$ である。言い換えると，$\ker \hat{n}_\varphi$ は $\hat{n}_\varphi$ の固有値 0 に対応する固有空間である。したがって，$\hat{n}_\varphi |*\rangle = \mathbf{0}$ であるから，$\hat{n}_\varphi |\nu *\rangle = \nu |\nu *\rangle$ を示す

[41] (4.3.16) の $\hat{F}_N$ は (4.2.38) の $\hat{F}_N$ と同じものです。

[42] (4.3.8) の右辺にある $1/\sqrt{n_a!}$ 等の因子と (4.3.20) の第 2 式の右辺にある $1/\sqrt{\nu!}$ の因子は同じものです。この因子の導出過程はかなり違っているように見えますが，深いところで繋がっているのでしょう。

には $\hat{n}_\varphi(\hat{a}_\varphi^\dagger)^\nu = (\hat{a}_\varphi^\dagger)^\nu\hat{n}_\varphi + \nu(\hat{a}_\varphi^\dagger)^\nu$，つまり，$[\,\hat{n}_\varphi, (\hat{a}_\varphi^\dagger)^\nu\,] = \nu(\hat{a}_\varphi^\dagger)^\nu$ がいえればよい。(4.3.13) より

$$[\,\hat{n}_\varphi, \hat{a}_\varphi^\dagger\,] = [\,\hat{a}_\varphi^\dagger\hat{a}_\varphi, \hat{a}_\varphi^\dagger\,] = \hat{a}_\varphi^\dagger[\,\hat{a}_\varphi, \hat{a}_\varphi^\dagger\,] + [\,\hat{a}_\varphi^\dagger, \hat{a}_\varphi^\dagger\,]\hat{a}_\varphi = \hat{a}_\varphi^\dagger \tag{4.3.22}$$

であるから，これを繰り返し用いると

$$\begin{aligned}[\,\hat{n}_\varphi, (\hat{a}_\varphi^\dagger)^\nu\,] &= (\hat{a}_\varphi^\dagger)^{\nu-1}[\,\hat{n}_\varphi, \hat{a}_\varphi^\dagger\,] + [\,\hat{n}_\varphi, (\hat{a}_\varphi^\dagger)^{\nu-1}\,]\hat{a}_\varphi^\dagger = (\hat{a}_\varphi^\dagger)^\nu + [\,\hat{n}_\varphi, (\hat{a}_\varphi^\dagger)^{\nu-1}\,]\hat{a}_\varphi^\dagger \\ &= 2(\hat{a}_\varphi^\dagger)^\nu + [\,\hat{n}_\varphi, (\hat{a}_\varphi^\dagger)^{\nu-2}\,](\hat{a}_\varphi^\dagger)^2 = 3(\hat{a}_\varphi^\dagger)^\nu + [\,\hat{n}_\varphi, (\hat{a}_\varphi^\dagger)^{\nu-3}\,](\hat{a}_\varphi^\dagger)^3 = \cdots = \nu(\hat{a}_\varphi^\dagger)^\nu\end{aligned} \tag{4.3.23}$$

を得る。よって，$\hat{n}_\varphi\,|\nu\,*\rangle = \nu\,|\nu\,*\rangle$ が示された。また，

$$\begin{aligned}\langle\nu\,*|\nu\,*\rangle &= \frac{1}{\nu}\,\langle\nu-1\,*|\hat{a}_\varphi\hat{a}_\varphi^\dagger|\nu-1\,*\rangle = \frac{1}{\nu}\,\langle\nu-1\,*|(\hat{a}_\varphi^\dagger\hat{a}_\varphi+1)|\nu-1\,*\rangle \\ &= \frac{1}{\nu}\,\langle\nu-1\,*|(\nu-1+1)|\nu-1\,*\rangle = \langle\nu-1\,*|\nu-1\,*\rangle\end{aligned} \tag{4.3.24}$$

であるから，これを繰り返し用いると $\langle\nu\,*|\nu\,*\rangle = \cdots = \langle *|*\rangle$ を得る。したがって，もし $|*\rangle$ が正規化されているならば $|\nu\,*\rangle$ も正規化されている。以上より，(4.3.20) が示された。 ■

$V\otimes V$ の演算子

$$\hat{G}_2 = \sum_{\alpha\beta\alpha'\beta'} G_{\alpha\beta\alpha'\beta'}(\,|\alpha\rangle_1\,\langle\beta|_1 \otimes |\alpha'\rangle_2\,\langle\beta'|_2 + |\alpha'\rangle_1\,\langle\beta'|_1 \otimes |\alpha\rangle_2\,\langle\beta|_2) \tag{4.3.25}$$

を $V^{\otimes N}$ に拡張すると，

$$\hat{G}_N = \sum_{\alpha\beta\alpha'\beta'} G_{\alpha\beta\alpha'\beta'} \sum_{i=1}^{N}\left(\sum_{j=1}^{i-1} |\alpha'\rangle_j\,\langle\beta'|_j \otimes |\alpha\rangle_i\,\langle\beta|_i + \sum_{j=i+1}^{N} |\alpha\rangle_i\,\langle\beta|_i \otimes |\alpha'\rangle_j\,\langle\beta'|_j\right) \tag{4.3.26}$$

となる[43]。これに対し

$$\hat{G} = \sum_{\alpha\beta\alpha'\beta'} G_{\alpha\beta\alpha'\beta'}\hat{a}_\alpha^\dagger\hat{a}_{\alpha'}^\dagger\hat{a}_{\beta'}\hat{a}_\beta \tag{4.3.27}$$

とおくと，$\bigvee^N V$ において

$$\hat{G}_N = \hat{G} \tag{4.3.28}$$

である。

==========

補足・計算例 35.

[43] (4.3.26) の $\hat{G}_N$ は (4.2.38) の $\hat{G}_N$ と同じものです。

対称テンソル空間
例 1：交換関係 $[\hat{a}, \hat{a}^\dagger] = 1$ を満たす生成消滅演算子 $\hat{a}$，$\hat{a}^\dagger$ と複素数 α を用いてユニタリ演算子 $\hat{D}(\alpha)$ を

$$\hat{D}(\alpha) = e^{\alpha\hat{a}^\dagger - \alpha^*\hat{a}} \tag{4.3.29}$$

によって定義する。$\hat{D}(\alpha)$ を真空状態 $|\mathrm{vac}\rangle$ に作用させて得られるベクトル

$$|\alpha\rangle = \hat{D}(\alpha)\,|\mathrm{vac}\rangle \tag{4.3.30}$$

を**コヒーレント状態**という[44]。ただし，$|\mathrm{vac}\rangle$ は正規化されているとする。$|\alpha\rangle$ はユニタリ演算子を正規化されたベクトルに作用させて得たベクトルであるからやはり正規化されている。補足・計算例 19 の (2.2.80) を用いると

$$\hat{D}(\alpha) = e^{-\frac{1}{2}|\alpha|^2} e^{\alpha\hat{a}^\dagger} e^{-\alpha^*\hat{a}} \tag{4.3.31}$$

と書けるから，$e^{-\alpha^*\hat{a}}\,|\mathrm{vac}\rangle = |\mathrm{vac}\rangle$ より，

$$|\alpha\rangle = e^{-\frac{1}{2}|\alpha|^2} e^{\alpha\hat{a}^\dagger}\,|\mathrm{vac}\rangle \tag{4.3.32}$$

と表せる。数演算子 $\hat{n} = \hat{a}^\dagger\hat{a}$ の固有値 $n\,(= 0, 1, 2, \cdots)$ に属する正規化された固有ベクトルを $|n\rangle$ とすると，

$$|n\rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}}(\hat{a}^\dagger)^n\,|\mathrm{vac}\rangle \tag{4.3.33}$$

であるから，

$$|\alpha\rangle = e^{-\frac{1}{2}|\alpha|^2} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}}\,|n\rangle \tag{4.3.34}$$

と書ける。$\hat{a}\,|n\rangle = \sqrt{n}\,|n-1\rangle$ より，

$$\hat{a}\,|\alpha\rangle = \alpha\,|\alpha\rangle \tag{4.3.35}$$

が成り立つ。つまり，コヒーレント状態 $|\alpha\rangle$ は消滅演算子 $\hat{a}$ の固有値 α に属する固有ベクトルである。ただし，$\hat{a}$ は正規演算子でないため，その異なる固有値に属する固有ベクトルの間の直交性は必ずしも保証されない。実際，

$$\langle\alpha|\beta\rangle = e^{-\frac{1}{2}|\alpha|^2 - \frac{1}{2}|\beta|^2 + \alpha^*\beta} \tag{4.3.36}$$

となるから，$\alpha \neq \beta$ であっても $\langle\alpha|\beta\rangle \neq 0$ である。次に，$\langle n\rangle = \langle\alpha|\hat{n}|\alpha\rangle$ とおくと

$$\langle n\rangle = |\alpha|^2 \tag{4.3.37}$$

である。この $\langle n\rangle$ を用いると正射影演算子 $\hat{P}_n = |n\rangle\langle n|$ に対して

$$\langle\alpha|\hat{P}_n|\alpha\rangle = e^{-\langle n\rangle}\frac{\langle n\rangle^n}{n!} \tag{4.3.38}$$

[44]正確にいうと $|\alpha\rangle$ は $\bigvee V = \bigoplus_{N=0}^{\infty} \bigvee^N V$ のベクトルです。

を得る。(4.3.38) は母数 $\langle n\rangle$ のポアソン分布である[45]。

例 2：交換関係 $[\,\hat{a},\hat{a}^\dagger\,]=1$ を満たす生成消滅演算子 $\hat{a}$，$\hat{a}^\dagger$ と複素数 λ を用いて演算子 $\hat{a}(\lambda)$ および $\hat{a}^\dagger(\lambda)$ を

$$\hat{a}(\lambda)=e^{\lambda\hat{n}}\hat{a}e^{-\lambda\hat{n}} \qquad\qquad \hat{a}^\dagger(\lambda)=e^{\lambda\hat{n}}\hat{a}^\dagger e^{-\lambda\hat{n}} \tag{4.3.39}$$

によって定義する。ここで，$\hat{n}=\hat{a}^\dagger\hat{a}$ は数演算子である。補足・計算例 19 の (2.2.58) より，

$$\hat{a}(\lambda)=\sum_{n=0}^{\infty}\frac{\lambda^n}{n!}[\,\hat{n},\cdots[\,\hat{n},\hat{a}\,]\cdots] \tag{4.3.40}$$

と書ける。$[\,\hat{n},\hat{a}\,]=[\,\hat{a}^\dagger\hat{a},\hat{a}\,]=\hat{a}^\dagger[\,\hat{a},\hat{a}\,]+[\,\hat{a}^\dagger,\hat{a}\,]\hat{a}=-\hat{a}$ より $[\,\hat{n},\cdots[\,\hat{n},\hat{a}\,]\cdots]=(-1)^n\hat{a}$ であるから，

$$\hat{a}(\lambda)=\hat{a}e^{-\lambda} \tag{4.3.41}$$

を得る。また，(4.3.39) より $\hat{a}(\lambda)^\dagger=\hat{a}^\dagger(-\lambda^*)$ であるから，

$$\hat{a}^\dagger(\lambda)=\hat{a}^\dagger e^{\lambda} \tag{4.3.42}$$

を得る。

==========

[45]量子力学ではボース粒子系の状態 $|\cdot\rangle$ による $\langle\cdot|\hat{P}_n|\cdot\rangle$ を粒子数の測定値が n となる確率であると解釈します。その確率分布がコヒーレント状態 $|\alpha\rangle$ の場合はポアソン分布で与えられるということです。

第 5 章　関数空間

本章では関数全体のなす内積空間である関数空間について述べる。まず，1 変数関数の関数空間における位置演算子とデルタ関数，波数演算子と平面波について説明する。次に，スピン自由度をもつ 3 変数関数の関数空間を導入し，角運動量演算子と回転演算子の基本事項について述べる。これらを基礎として反対称テンソル空間を構築し，場の演算子を導入する。

5.1　関数空間・デルタ関数・完全性関係

5.1.1　関数空間

区間 $[a, b]$ における関数 $|f\rangle$ を 1 つの実数 $x \in [a, b]$ に対して 1 つの複素数 $f(x)$ を対応させる写像，つまり，

$$|f\rangle : x \mapsto f(x) \tag{5.1.1}$$

であるとして定義する[1]。慣習として「関数 $f(x)$」のように言い表すことが多いが，関数は写像 $|f\rangle$ のことであって，関数の値 $f(x)$ のことではないという点に注意されたい[2]。

関数 $|f\rangle$，$|g\rangle$ と複素数 λ に対して，関数の和とスカラー倍を

$$|f\rangle + |g\rangle : x \mapsto f(x) + g(x) \qquad \lambda\,|f\rangle : x \mapsto \lambda f(x) \tag{5.1.2}$$

によって定義すると，関数の全体は線形空間となる。さらに，内積を

$$(\,|f\rangle\,,\,|g\rangle) = \int_a^b dx\, f(x)^* g(x) \tag{5.1.3}$$

[1]数学では $|f\rangle$ を f と記します。

[2]したがって，$|f\rangle = f(x)$ という式は左辺 (写像) と右辺 (複素数) が種類の異なるものを等しいとしているため意味をなしません。ベクトルでいうと $|a\rangle = a_i$ と書くのと同じくらい無意味な式です。

によって定義することにより，関数の全体は内積空間となる[3]。これを**関数空間**という[4]。以降では，(5.1.3) により定まる $|f\rangle$ のエルミート共役 $\langle f|$ を用いて，必要に応じて $(|f\rangle, |g\rangle)$ を $\langle f|g\rangle$ と表すことにする。関数 $|f\rangle$ を定めるには区間 $[a, b]$ に属する無限個の x に対して無限個の $f(x)$ を定める必要がある。そのため関数空間は無限次元の線形空間となる。

5.1.2 デルタ関数

区間 $[a, b]$ の任意の関数 $f(x)$ に対して，

$$\int_a^b dx\, f(x)\delta(x-\xi) = f(\xi) \tag{5.1.4}$$

によって定義される関数 $\delta(x-\xi)$ をディラックの**デルタ関数**という[5]。(5.1.4) より，$\delta(x-\xi)$ は実関数である。また，ε を小さな正の数として

$$f(x) = \begin{cases} 1 & (\xi-\varepsilon < x < \xi+\varepsilon) \\ 0 & (\text{上記以外}) \end{cases} \tag{5.1.5}$$

とすると，

$$\int_{\xi-\varepsilon}^{\xi+\varepsilon} dx\, \delta(x-\xi) = 1 \tag{5.1.6}$$

である。したがって，$\delta(x-\xi)$ は $x \neq \xi$ で 0，$x = \xi$ で無限大となるという特異的な関数であることがわかる[6]。

[3]本章では，§5.2.5 を除き，(5.1.3) によって関数の内積を定義します。§5.2.5 では (5.1.3) を一般化した**重み付き内積** (5.2.73) について述べます。重み付き内積の詳細は補章 C.1 を参照してください。

[4]関数空間を厳密に扱う数学は関数解析とよばれます。興味のある方は関数解析の教科書を参照してください。

[5](5.1.4) の左辺は内積 (5.1.3) の形に書くと $\int_a^b dx\, \delta(x-\xi)^* f(x)$ となります。

[6]厳密にはデルタ関数は通常の関数ではなく**超関数**として扱われます。

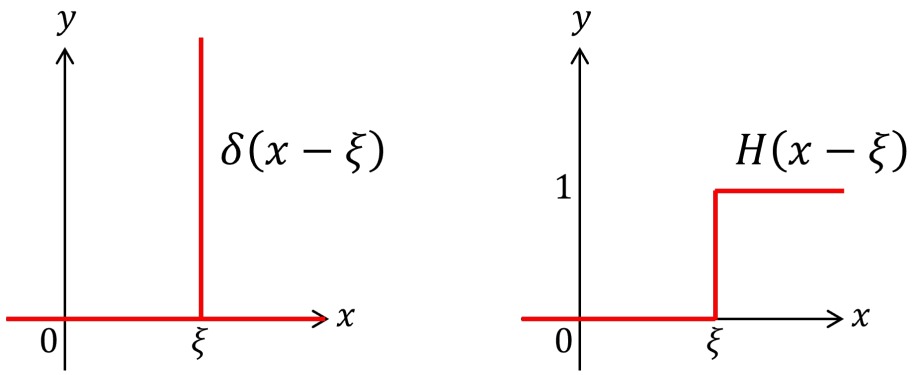


図 5.1: デルタ関数と階段関数

デルタ関数の特異性を避けて計算を行うために，例えば

$$\delta(x) = \lim_{\varepsilon\to+0} \frac{1}{\pi}\frac{\varepsilon}{x^2+\varepsilon^2} \qquad \delta(x) = \lim_{\varepsilon\to+0} \frac{1}{\sqrt{2\pi}\varepsilon} e^{-\frac{x^2}{2\varepsilon^2}} \tag{5.1.7}$$

が用いられる[7]。また，デルタ関数の性質として

$$\delta(u(x)-u(\xi)) = \frac{1}{|u'(x)|}\delta(x-\xi) \qquad \int_a^b dx\, f(x)\delta'(x-\xi) = -f'(\xi) \tag{5.1.8}$$

などが基本的である。ただし，(5.1.8) の第 1 式における $u(x)$ は区間 $[a,b]$ において x の単調関数であるとする。

デルタ関数の原始関数はヘヴィサイドの**階段関数**

$$H(x-\xi) = \begin{cases} 0 & (x<\xi) \\ 1 & (x>\xi) \end{cases} \tag{5.1.9}$$

であり，

$$H(x-\xi) = \int_a^x dx'\, \delta(x'-\xi) \tag{5.1.10}$$

が成り立つ[8]。

デルタ関数に関連して

$$\int_a^b dx\, \frac{f(x)}{x\pm i0} = \mathscr{P}\!\!\int_a^b dx\, \frac{f(x)}{x} \mp i\pi \int_a^b dx\, \delta(x) f(x) \tag{5.1.11}$$

[7](5.1.7) の第 2 式は分散 ε^2 の正規分布関数です。

[8]本書では $H(0)$ の値を未定義とすることにします。$H(0)$ の値としては 0，1/2，1 と定義されることもあります。

が成り立つ。ここで，$a<0$，$b>0$ とする。また，右辺の第 1 項は**コーシーの主値**であり，

$$\mathscr{P}\int_a^b dx\,\frac{f(x)}{x}=\lim_{\varepsilon\to+0}\left(\int_a^{-\varepsilon}dx\,\frac{f(x)}{x}+\int_\varepsilon^b dx\,\frac{f(x)}{x}\right) \tag{5.1.12}$$

によって定義される。(5.1.11) を**ソホーツキー–プレメリの定理** という[9]。
[(5.1.11) の証明] ε を小さな正の数とする。恒等式

$$\frac{1}{x\pm i\varepsilon}=\frac{x}{x^2+\varepsilon^2}\mp i\pi\frac{1}{\pi}\frac{\varepsilon}{x^2+\varepsilon^2} \tag{5.1.13}$$

の両辺を $x=a$ から $x=b$ まで積分し，コーシーの主値は

$$\mathscr{P}\int_a^b dx\,\frac{f(x)}{x}=\lim_{\varepsilon\to+0}\int_a^b dx\,\frac{x}{x^2+\varepsilon^2}f(x) \tag{5.1.14}$$

と表せること，また，デルタ関数は (5.1.7) の第 1 式のように書けることを考慮すると，(5.1.11) が得られる。 ■

5.1.3 完全性関係

区間 $[a,b]$ において任意の関数 $f(x)$ が正規直交系 $\{u_i(x)\}$ により

$$f(x)=\sum_i c_i u_i(x) \tag{5.1.15}$$

と表せるとする。このとき，$\{u_i(x)\}$ は**完全**あるいは**完全系**であるという。$\{u_i(x)\}$ が完全正規直交系であるためには，

$$\sum_i u_i(x)u_i(x')^*=\delta(x-x') \tag{5.1.16}$$

でなければならない。(5.1.16) を**完全性関係**という[10]。
[(5.1.16) の証明] $\{u_i(x)\}$ が完全正規直交系であるとする。正規直交性 $(u_i,u_j)=\delta_{ij}$ より

$$c_i=\int_a^b dx\,u_i(x)^*f(x) \tag{5.1.17}$$

[9] **リップマン–シュウィンガーの関係式** とよばれることもあります。
[10] §5.2.5 で述べる重み付き内積 (5.2.73) の場合，(5.1.16) は補章 C.1 の (C.1.17) のように修正されます。

である。これを (5.1.15) の右辺に用いると，

$$f(x) = \sum_i \left(\int_a^b dx'\, u_i(x')^* f(x') \right) u_i(x) = \int_a^b dx'\, f(x') \left(\sum_i u_i(x) u_i(x')^* \right) \tag{5.1.18}$$

となる。したがって，デルタ関数の定義 (5.1.4) より，(5.1.16) を得る。 ■

5.2 位置演算子と波数演算子

5.2.1 位置演算子とデルタ関数

区間 $[\,a, b\,]$ において，関数 $|f\rangle$ を**矩形関数**の線形結合で近似することを考える。そこで，一旦区間を $[\,a - \Delta x/2, b + \Delta x/2\,]$ として，矩形関数 $|\tau_i\rangle$ $(i = 1, \cdots, n)$ を

$$\tau_i(x) = \begin{cases} \dfrac{1}{\sqrt{\Delta x}} & (x_i - \Delta x/2 < x < x_i + \Delta x/2) \\ 0 & (\text{上記以外}) \end{cases} \tag{5.2.1}$$

によって定義する。ここで，$x_i = a + (i-1)\Delta x$，$\Delta x = (b-a)/(n-1)$ である。$V = \mathrm{span}(\,|\tau_1\rangle\,, \cdots,\, |\tau_n\rangle)$ とすると，

$$\tau = \{\,|\tau_1\rangle\,, \cdots,\, |\tau_n\rangle\} \text{ は } V \text{ の正規直交基底} \tag{5.2.2}$$

である。

[(5.2.2) の証明] $|\tau_i\rangle$ と $|\tau_j\rangle$ の内積を計算する。$i = j$ のとき，

$$\langle \tau_i | \tau_i \rangle = \int_{a-\Delta x/2}^{b+\Delta x/2} dx\, \tau_i(x)^* \tau_i(x) = \int_{x_i - \Delta x/2}^{x_i + \Delta x/2} dx \left(\frac{1}{\sqrt{\Delta x}} \right)^2 = 1 \tag{5.2.3}$$

であるから，$|\tau_i\rangle$ は正規化されている。一方，$i \neq j$ のときは恒等的に $\tau_i(x)\tau_j(x) = 0$ となるから，$\langle \tau_i | \tau_j \rangle = 0$，つまり，$|\tau_i\rangle$ と $|\tau_j\rangle$ は直交する。以上より，(5.2.2) が示された。 ■

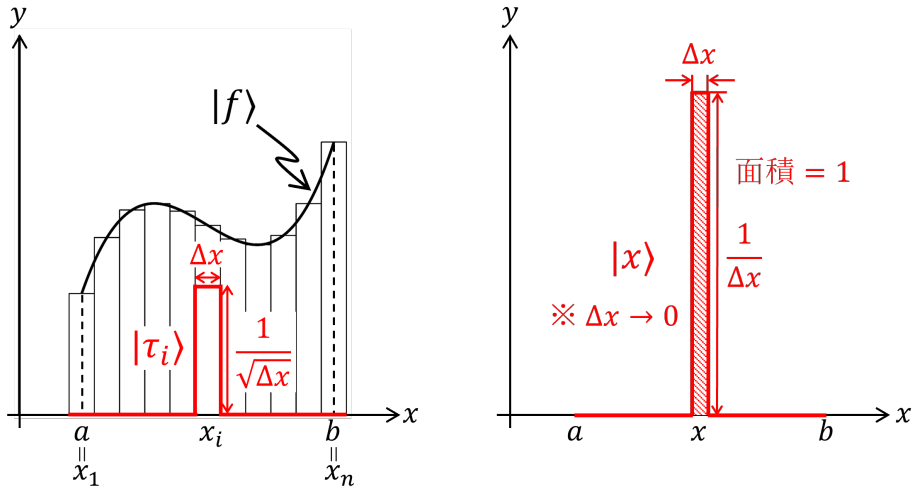


図 5.2: 矩形関数とデルタ関数

次に $n \to \infty$ の極限を考える。$|\tau_i\rangle$ と $|f\rangle$ の内積は

$$\lim_{n\to\infty} \langle\tau_i|f\rangle = \lim_{n\to\infty} \int_{x_i-\Delta x/2}^{x_i+\Delta x/2} dx\, \frac{1}{\sqrt{\Delta x}} f(x) = \lim_{n\to\infty} \sqrt{\Delta x} f(x_i) \tag{5.2.4}$$

となるから，ダイアドの定義 (2.2.16) より，

$$\lim_{n\to\infty} |\tau_i\rangle\langle\tau_i|f\rangle = \lim_{n\to\infty} \sqrt{\Delta x} f(x_i)\, |\tau_i\rangle \tag{5.2.5}$$

である。(5.2.5) を $i = 1, \cdots, n$ について和をとり完全性関係 $\hat{I} = |\,\tau\,][\,\tau\,|$ を考慮すると，

$$|f\rangle = \lim_{n\to\infty} \sum_{i=1}^{n} \sqrt{\Delta x} f(x_i)\, |\tau_i\rangle = \lim_{n\to\infty} \sum_{i=1}^{n} \Delta x f(x_i) \frac{1}{\sqrt{\Delta x}}\, |\tau_i\rangle \tag{5.2.6}$$

と書ける。$|x\rangle$ を

$$|x\rangle = \lim_{n\to\infty} \frac{1}{\sqrt{\Delta x}}\, |\tau_i\rangle \tag{5.2.7}$$

によって定義すると[11]，

$$|f\rangle = \int_a^b dx\, f(x)\, |x\rangle \tag{5.2.8}$$

[11] $\langle\tau_i|\tau_i\rangle = 1$ とは対照的に $\langle x|x\rangle = \lim_{n\to\infty} 1/\Delta x = \infty$ です。

を得る[12]。また，(5.2.4) と (5.2.7) より

$$\langle x|f\rangle = f(x) \tag{5.2.9}$$

である。したがって，$|x\rangle = |\xi\rangle$ と $|f\rangle$ の内積は $\langle\xi|f\rangle = f(\xi)$ であり，(5.2.8) より

$$f(\xi) = \int_a^b dx f(x)\,\langle\xi|x\rangle \tag{5.2.10}$$

と書ける[13]。$\langle\xi|x\rangle$ が実数であること，つまり，$\langle\xi|x\rangle = \langle x|\xi\rangle$ であること，および，デルタ関数の定義 (5.1.4) より，

$$\langle x|\xi\rangle = \delta(x-\xi) \tag{5.2.11}$$

を得る。以上より，関数 $|\xi\rangle$ がデルタ関数 $\delta(x-\xi)$ に対応することがわかった。

デルタ関数 $|x\rangle$ に関する完全性関係は，$\hat{I} = \sum_{i=1}^n |\tau_i\rangle\langle\tau_i|$ において $n\to\infty$ の極限をとることにより，

$$\hat{I} = \int_a^b dx\ |x\rangle\langle x| \tag{5.2.12}$$

と表せる。また，**位置演算子** $\hat{x}$ を，$\hat{x} = \sum_{i=1}^n x_i\,|\tau_i\rangle\langle\tau_i|$ とおいて $n\to\infty$ の極限をとることにより，

$$\hat{x} = \int_a^b dx\, x\,|x\rangle\langle x| \tag{5.2.13}$$

によって定義する[14]。$\hat{x}$ はエルミート演算子であり，

$$\hat{x}\,|x\rangle = x\,|x\rangle \qquad\qquad \langle x|\,\hat{x} = x\,\langle x| \tag{5.2.14}$$

が成り立つ[15]。$|x\rangle$ は $\hat{x}$ の固有値 x に属する固有関数である[16]。

---

[12](5.2.8) が $|f\rangle$ と $f(x)$ の関係をはっきり示している式です。$|f\rangle$ は $f(x)dx$ を係数とする $|x\rangle$ の線形結合によって表されるということです。

[13](5.2.10) の右辺は内積 (5.1.3) の形に書くと $\int_a^b dx\ \langle x|\xi\rangle^*\, f(x)$ となります。

[14](5.2.13) の意味は $|f\rangle$ と $\hat{x}\,|g\rangle$ の内積が $\int_a^b dx\, f(x)^* x g(x)$ で与えられるような演算子を $\hat{x}$ とするということです。なお，(5.2.13) は $\hat{x}$ のスペクトル分解です。数学では (5.2.13) を $\hat{E}(x) = \int_a^x dx'\ |x'\rangle\langle x'|$ を用いて $\hat{x} = \int_a^b x d\hat{E}(x)$ のように表します。

[15]あるいは，区間 $[a,b]$ の任意の x に対して (5.2.14) の第 1 式 (または第 2 式) を $\hat{x}$ の定義とすれば，(5.2.12) より (5.2.13) を導けます。

[16]位置演算子のように，固有ベクトルのノルムが無限大となるとき，それらの属する固有値は演算子の**連続スペクトル**を形成するといいます。これに対して，固有ベクトルのノルムが有限のとき，それらの属する固有値は演算子の**点スペクトル**を形成するといいます。演算子によっては点スペクトルと連続スペクトルの両方をもつことがあります。

§5.1.3 で述べた完全性関係 (5.1.16) は，(5.2.9) と (5.2.11) を用いて以下のように導ける。完全正規直交系 $\{\,|u_i\rangle\}$ に関する完全性関係は

$$\hat{I} = \sum_i |u_i\rangle\langle u_i| \tag{5.2.15}$$

である。(5.2.15) の両辺を $\langle x|$ と $|x'\rangle$ ではさむことにより，

$$\langle x|x'\rangle = \sum_i \langle x|u_i\rangle\langle u_i|x'\rangle \quad \text{つまり} \quad \delta(x-x') = \sum_i u_i(x)u_i(x')^* \tag{5.2.16}$$

を得る。

区間 $(-\infty,\infty)$ における関数 $|f\rangle$ 全体のなす関数空間の演算子 $\hat{P}$ を

$$\hat{P} = \int_{-\infty}^{\infty} dx\ |-x\rangle\langle x| \tag{5.2.17}$$

によって定義する。つまり，任意の x に対して

$$\hat{P}\,|x\rangle = |-x\rangle \tag{5.2.18}$$

と定める[17]。$\hat{P}$ を**反転演算子**という[18]。(5.2.17) より，$\hat{P}^\dagger = \hat{P}$，$\hat{P}^\dagger = \hat{P}^{-1}$，つまり，$\hat{P}$ はエルミート演算子であると同時にユニタリ演算子でもあることがわかる。また，

$$\hat{P}\,|f\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dx\, f(-x)\,|x\rangle \tag{5.2.19}$$

と表せるから，

$$\langle x|\hat{P}|f\rangle = f(-x) \tag{5.2.20}$$

である。(5.2.20) は $\hat{P}$ が関数 $|f\rangle$ のグラフを $x=0$ を対称の中心として反転させる演算子であることを意味する。$\hat{P}^2 = \hat{I}$ であるから，$\hat{P}$ の固有値は $+1$ および -1 である。固有値 $+1$ に対応する固有空間は $f(-x) = f(x)$，つまり，偶関数全体のなす部分空間であり，一方，固有値 -1 に対応する固有空間は $f(-x) = -f(x)$，つまり，奇数関数全体のなす部分空間である。なお，$\mathscr{P}$ を $\mathscr{P}f(x) = f(-x)$，つまり，

$$\mathscr{P}\,\langle x| = \langle -x| \tag{5.2.21}$$

[17] $\int_{-\infty}^{\infty} dx\ |x\rangle\langle x| = \hat{I}$ なので，(5.2.17) または (5.2.18) のどちらによって $\hat{P}$ を定義しても同じです。

[18] 1 変数の関数の場合には**鏡映演算子**ということもできます。

によって定義すると，

$$\langle x|\,\hat{P} = \mathscr{P}\,\langle x| \tag{5.2.22}$$

と表せる[19]。

5.2.2 波数演算子と平面波

区間 $[-L/2, L/2]$ において，**周期的境界条件** $f(-L/2) = f(L/2)$ を満たす関数 $|f\rangle$ の全体を V とする。V の演算子 $\hat{k}_x$ を

$$\hat{k}_x = \int_{-L/2}^{L/2} dx\ |x\rangle \left(-i\frac{d}{dx}\right) \langle x| \tag{5.2.23}$$

によって定義する[20]。$\hat{k}_x$ を**波数演算子**という[21]。このとき，

$$\hat{k}_x \text{は}\, V\, \text{のエルミート演算子} \tag{5.2.24}$$

である[22]。

[(5.2.24) の証明] $\hat{k}_x$ がエルミート演算子の定義 $(\,|f\rangle\,, \hat{k}_x\,|g\rangle) = (\hat{k}_x\,|f\rangle\,,\,|g\rangle)$，つまり，$\langle f|\hat{k}_x|g\rangle = \langle g|\hat{k}_x|f\rangle^*$ を満たすことを示す。$f(-L/2) = f(L/2)$，$g(-L/2) = g(L/2)$ であるから，

$$\begin{aligned}\langle f|\hat{k}_x|g\rangle &= -i\int_{-L/2}^{L/2} dx\, f(x)^* \frac{dg(x)}{dx} = \underbrace{-i[f(x)^* g(x)]_{-L/2}^{L/2}}_{0} + i\int_{-L/2}^{L/2} dx\, \frac{df(x)^*}{dx} g(x) \\ &= \left(-i\int_{-L/2}^{L/2} dx\, g(x)^* \frac{df(x)}{dx}\right)^* = \langle g|\hat{k}_x|f\rangle^*\end{aligned} \tag{5.2.25}$$

---

[19] 補足・計算例 19 の例 3 以降，反転演算子を $\mathscr{P}$ のように表して使ってきましたが，その $\hat{P}$ との関係は (5.2.22) によって与えられます。

[20] (5.2.23) の意味は $|f\rangle$ と $\hat{k}_x\,|g\rangle$ の内積が $\int_{-L/2}^{L/2} dx\, f(x)^*(-i\frac{d}{dx})g(x)$ で与えられるような演算子を $\hat{k}_x$ とするということです。

[21] 量子力学では波数演算子に $\hbar$ を掛けた $\hat{p}_x = \hbar\hat{k}_x$ が**運動量演算子**として重要な役割を果たします。

[22] 波数演算子 (5.2.23) がエルミート演算子となるような最も一般的な境界条件は $f(-L/2) = f(L/2)e^{i\theta}$ です。これは捻れらた周期的境界条件とよばれます。

を得る。したがって，$\hat{k}_x$ は V のエルミート演算子である[23]。 ■

$\hat{k}_x$ の基本的な性質として

$$\langle x|\,\hat{k}_x = -i\frac{d}{dx}\,\langle x| \tag{5.2.26}$$

が成り立つ[24]。$\mathscr{k}_x = -i\frac{d}{dx}$ とおくと，

$$\langle x|\,\hat{k}_x = \mathscr{k}_x\,\langle x| \tag{5.2.27}$$

と書ける。$\mathscr{k}_x$ を $\hat{k}_x$ の**座標表示**という[25]。また，位置演算子 $\hat{x}$ との間に交換関係

$$[\,\hat{x},\hat{k}_x\,] = i\hat{I} \tag{5.2.28}$$

が成り立つ[26]。

[(5.2.28) の証明] まず，$\hat{x}\hat{k}_x$ を計算すると，$\hat{x}\,|x\rangle = x\,|x\rangle$ より，

$$\hat{x}\hat{k}_x = \int_{-L/2}^{L/2} dx\,\hat{x}\,|x\rangle\left(-i\frac{d}{dx}\right)\langle x| = \int_{-L/2}^{L/2} dx\;|x\rangle\left(-ix\frac{d}{dx}\right)\langle x| \tag{5.2.29}$$

となる。次に，$\hat{k}_x\hat{x}$ を計算すると，$\langle x|\,\hat{x} = x\,\langle x|$ より，

$$\begin{aligned}\hat{k}_x\hat{x} &= \int_{-L/2}^{L/2} dx\;|x\rangle\left(-i\frac{d}{dx}\right)\langle x|\,\hat{x} = \int_{-L/2}^{L/2} dx\;|x\rangle\left(-i\frac{d}{dx}\right)x\,\langle x| \\ &= \int_{-L/2}^{L/2} dx\;|x\rangle\left(-i\,\langle x| - ix\frac{d}{dx}\,\langle x|\right) = -i\hat{I} + \hat{x}\hat{k}_x\end{aligned} \tag{5.2.30}$$

となる。したがって，$[\,\hat{x},\hat{k}_x\,] = \hat{x}\hat{k}_x - \hat{k}_x\hat{x} = i\hat{I}$ を得る。 ■

$\hat{k}_x$ の固有値 k_j，固有関数 $|\varphi_j\rangle$ は

$$k_j = \frac{2\pi}{L}j \qquad\qquad \varphi_j(x) = \frac{1}{\sqrt{L}}e^{ik_jx} \tag{5.2.31}$$

---

[23] この証明からわかるように，演算子がエルミートかどうかは考えている関数がどのようなものなのかに依存します。$\hat{k}_x$ の場合，$f(-L/2) = f(L/2)$ を満たす関数全体のなす内積空間においてエルミートだということです。

[24] $\int_{-L/2}^{L/2} dx\;|x\rangle\langle x| = \hat{I}$ なので，(5.2.23) と (5.2.26) は同じです。

[25] 補足・計算例 19 の (2.2.66) 以降，波数演算子を $\mathscr{k}_x = -iD_x$ のように表して使ってきましたが，その $\hat{k}_x$ との関係は (5.2.27) によって与えられます。厳密にいうと $\hat{k}_x \neq \mathscr{k}_x$ ですので注意しましょう。なお，$\langle x|\,\hat{k}_x = \mathscr{k}_x\,\langle x|$ の (2.3.22) との類似から $\mathscr{k}_x$ を基底 $\{\,|x\rangle\}$ による $\hat{k}_x$ の表現ということもあります。量子力学では $-i\hbar\frac{d}{dx} = \hbar\mathscr{k}_x$ を運動量演算子 $\hat{p}_x = \hbar\hat{k}_x$ の座標表示といいます。この名称は，基底 $\{\,|x\rangle\}$ が位置演算子 $\hat{x}$ の固有ベクトルからなるため，$\langle x|\,\hat{x} = x\,\langle x|$ と表されることに由来します。

[26] 補足・計算例 31 で示した不確定性原理 (3.2.67) を位置演算子 $\hat{x}$ と波数演算子 $\hat{k}_x$ の交換関係 (5.2.28) に適用すると，$\Delta x\Delta k_x \geq \frac{1}{2}$ となります。これに $\hbar$ を掛けると，量子力学における粒子の位置と運動量の不確定性原理 $\Delta x\Delta p_x \geq \frac{\hbar}{2}$ が得られます。

によって与えられる。ここで, j は整数であり, また, $\varphi_j(x) = \langle x|\varphi_j\rangle$ である。$\varphi_j(x)$ を波数 k_j の**平面波**という。このとき，$\varphi = \{\,|\varphi_j\rangle \mid j$ は整数 $\}$ は完全正規直交系であり，完全性関係

$$\hat{I} = \sum_{j=-\infty}^{\infty} |\varphi_j\rangle\langle\varphi_j| \tag{5.2.32}$$

が成り立つ。また，$\hat{k}_x$ のスペクトル分解は

$$\hat{k}_x = \sum_{j=-\infty}^{\infty} k_j\,|\varphi_j\rangle\langle\varphi_j| \tag{5.2.33}$$

であり,

$$\hat{k}_x\,|\varphi_j\rangle = k_j\,|\varphi_j\rangle \qquad\qquad \langle\varphi_j|\,\hat{k}_x = k_j\,\langle\varphi_j| \tag{5.2.34}$$

が成り立つ。
[(5.2.31) の証明] $\hat{k}_x$ の固有値を k，固有ベクトルを $|\varphi\rangle$ とすると $\hat{k}_x\,|\varphi\rangle = k\,|\varphi\rangle$ である。この式の両辺に左から $\langle x|$ を掛けると，$\varphi(x) = \langle x|\varphi\rangle$ および (5.2.26) より,

$$-i\frac{d}{dx}\varphi(x) = k\varphi(x) \tag{5.2.35}$$

となる。微分方程式 (5.2.35) の解は $\varphi(x) = Ce^{ikx}$ である。周期的境界条件 $\varphi(-L/2) = \varphi(L/2)$ より, $e^{ikL} = 1$ でなければならない。したがって, j を整数として $k_j = 2\pi j/L$ を得る。$\varphi_j(x)$ を正規化するには $\int_{-L/2}^{L/2} dx\,|Ce^{ikx}|^2 = |C|^2L = 1$ より，$C = 1/\sqrt{L}$ と選べばよい。以上より，(5.2.31) を得る。 ■

5.2.3 フーリエ級数とフーリエ変換

前項と同じく区間 $[\,-L/2, L/2\,]$ において周期的境界条件 $f(-L/2) = f(L/2)$ を満たす関数 $|f\rangle$ の全体を V とする。V の関数 $|f\rangle$ を $\hat{k}_x$ の固有関数 $|\varphi_j\rangle$ からなる完全正規直交系 $\varphi = \{\,|\varphi_j\rangle \mid j$ は整数 $\}$ により

$$|f\rangle = \sum_{j=-\infty}^{\infty} c_j\,|\varphi_j\rangle \tag{5.2.36}$$

と表すことを $|f\rangle$ を**フーリエ級数**に展開するという。(5.2.36) は，両辺に左から $\langle x|$ を掛けると,

$$f(x) = \frac{1}{\sqrt{L}}\sum_{j=-\infty}^{\infty} c_j e^{ik_jx} \tag{5.2.37}$$

と表せる。また，$\langle\varphi_i|\varphi_j\rangle = \delta_{ij}$ より $c_j = \langle\varphi_j|f\rangle$ であるから，

$$c_j = \frac{1}{\sqrt{L}}\int_{-L/2}^{L/2} dx\, e^{-ik_jx} f(x) \tag{5.2.38}$$

である。ここで，$\langle\varphi_j|f\rangle$ を内積の定義 (5.1.3) にしたがって表した。

次に，$L \to \infty$ の極限を考える[27]。平面波 $|\varphi_j\rangle$ に関する完全性関係 (5.2.32) は，$\Delta k_x = 2\pi/L$ を用いて $\hat{I} = \sum_{j=-\infty}^{\infty} \Delta k_x \frac{L}{2\pi} |\varphi_j\rangle\langle\varphi_j|$ と書き換えて $L \to \infty$ の極限をとることにより，

$$\hat{I} = \int_{-\infty}^{\infty} dk_x\ |k_x\rangle\langle k_x| \tag{5.2.39}$$

と表せる。ここで，k_j を k_x と書き換えて

$$|k_x\rangle = \sqrt{\frac{L}{2\pi}}\,|\varphi_j\rangle \qquad\qquad \langle x|k_x\rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}e^{ik_xx} \tag{5.2.40}$$

とおいた。$|k_x\rangle$ は $|\varphi_j\rangle$ の定数倍であるから，(5.2.34) と同様に，

$$\hat{k}_x\,|k_x\rangle = k_x\,|k_x\rangle \qquad\qquad \langle k_x|\,\hat{k}_x = k_x\,\langle k_x| \tag{5.2.41}$$

を満たす。次に，完全性関係 (5.2.39) を用いると，

$$\langle k_x|f\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dk'_x\ \langle k_x|k'_x\rangle\langle k'_x|f\rangle \tag{5.2.42}$$

と書けるから，

$$\langle k_x|k'_x\rangle = \delta(k_x - k'_x) \tag{5.2.43}$$

であることがわかる。また，(5.2.39) および (5.2.41) を用いると，$\hat{k}_x$ のスペクトル分解は

$$\hat{k}_x = \int_{-\infty}^{\infty} dk_x\, k_x\, |k_x\rangle\langle k_x| \tag{5.2.44}$$

と書ける。以上より，V の関数 $|f\rangle$ に対して，$f(k_x) = \langle k_x|f\rangle$，$f(x) = \langle x|f\rangle$ は

$$f(k_x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int_{-\infty}^{\infty} dx\, e^{-ik_xx} f(x) \qquad\qquad f(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int_{-\infty}^{\infty} dk_x\, e^{ik_xx} f(k_x) \tag{5.2.45}$$

[27] $L \to \infty$ の極限を考えることにより，周期的でない関数も扱えるようになります。

と表せる。特に，(5.2.45) の第 1 式において $|f\rangle = |k'_x\rangle$，また，第 2 式において $|f\rangle = |x'\rangle$ とすると，

$$\delta(k_x - k'_x) = \frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty} dx\, e^{-i(k_x-k'_x)x} \qquad \delta(x-x') = \frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty} dk_x\, e^{ik_x(x-x')} \tag{5.2.46}$$

を得る。

[(5.2.45) の証明] 第 1 式については, デルタ関数に関する完全性関係 $\hat{I} = \int_{-\infty}^{\infty} dx\ |x\rangle\langle x|$ を用いて，

$$f(k_x) = \langle k_x|f\rangle = \langle k_x|\hat{I}|f\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dx\ \langle k_x|x\rangle\langle x|f\rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int_{-\infty}^{\infty} dx\, e^{-ik_x x} f(x) \tag{5.2.47}$$

である。ここで，$\langle k_x|x\rangle = \langle x|k_x\rangle^* = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}e^{-ik_x x}$ を用いた。第 2 式については，平面波に関する完全性関係 $\hat{I} = \int_{-\infty}^{\infty} dk_x\ |k_x\rangle\langle k_x|$ を用いて，

$$f(x) = \langle x|f\rangle = \langle x|\hat{I}|f\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dk_x\ \langle x|k_x\rangle\langle k_x|f\rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int_{-\infty}^{\infty} dk_x\, e^{ik_x x} f(k_x) \tag{5.2.48}$$

である。ここで，$\langle x|k_x\rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}e^{ik_x x}$ を用いた。 ■

$\hat{x}$ について

$$\langle k_x|\,\hat{x} = i\frac{d}{dk_x}\langle k_x| \tag{5.2.49}$$

が成り立つ[28]。したがって，平面波に関する完全性関係 (5.2.39) より，

$$\hat{x} = \int_{-\infty}^{\infty} dk_x\ |k_x\rangle\left(i\frac{d}{dk_x}\right)\langle k_x| \tag{5.2.50}$$

である。

[(5.2.49) の証明] デルタ関数に関する完全性関係および $\langle k_x|x\rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}e^{-ik_x x}$ を用いると，

$$\begin{aligned}\langle k_x|\,\hat{x} &= \int_{-\infty}^{\infty} dx\, x\,\langle k_x|x\rangle\langle x| = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int_{-\infty}^{\infty} dx\, xe^{-ik_x x}\langle x| = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int_{-\infty}^{\infty} dx\, i\frac{d}{dk_x}e^{-ik_x x}\langle x| \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} dx\, i\frac{d}{dk_x}\langle k_x|x\rangle\langle x| = i\frac{d}{dk_x}\langle k_x|\int_{-\infty}^{\infty} dx\ |x\rangle\langle x| = i\frac{d}{dk_x}\langle k_x|\end{aligned} \tag{5.2.51}$$

[28] (5.2.49) の (2.3.22) との類似から $i\frac{d}{dk_x}$ を基底 $\{|k_x\rangle\}$ による $\hat{x}$ の表現ということもあります。量子力学では，$p_x = \hbar k_x$ とおいて，$i\hbar\frac{d}{dp_x}$ を位置演算子 $\hat{x}$ の**運動量表示**といいます。この名称は，$|p_x\rangle = \frac{1}{\sqrt{\hbar}}|k_x\rangle$ とおくと，基底 $\{|p_x\rangle\}$ が運動量演算子 $\hat{p}_x = \hbar\hat{k}_x$ の固有ベクトルからなるため，$\langle p_x|\,\hat{p}_x = p_x\langle p_x|$ と表されることに由来します。

を得る。 ■

5.2.4 並進演算子

区間 $(-\infty, \infty)$ において関数 $|f\rangle$ 全体のなす内積空間を V とする。V の波数演算子 $\hat{k_x}$ を用いて**並進演算子** $\hat{T}_c$ を

$$\hat{T}_c = e^{-ic\hat{k}_x} \tag{5.2.52}$$

によって定義する。ここで，c は実数のパラメータである。演算子の指数関数の逆演算子は (2.2.55) によって与えられるから，$\hat{T}_c^{-1} = \hat{T}_{-c}$ である。また，$\hat{k}_x$ はエルミート演算子であるから，$\hat{T}_c^\dagger = \hat{T}_{-c}$ である。したがって，$\hat{T}_c^\dagger = \hat{T}_c^{-1}$，つまり，$\hat{T}_c$ はユニタリ演算子である。$\hat{T}_c$ は $\hat{k}_x$ により (5.2.52) と定義されるから，その固有ベクトルは $\hat{k}_x$ のものと同じ $|k_x\rangle$ であり，固有値は e^{-ick_x} である。つまり，

$$\hat{T}_c\,|k_x\rangle = e^{-ick_x}\,|k_x\rangle \tag{5.2.53}$$

である。

演算子の指数関数の定義 (2.2.49) より

$$\hat{T}_c = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-ic)^n}{n!} \hat{k}_x^n \tag{5.2.54}$$

であるから，(5.2.26) を用いると

$$\langle x|\,\hat{T}_c = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-ic)^n}{n!} \left(-i\frac{d}{dx}\right)^n \langle x| = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-c)^n}{n!} \frac{d^n}{dx^n} \langle x| = \langle x-c| \tag{5.2.55}$$

と書ける。(5.2.55) の最後の等号において左辺が右辺のテイラー展開であることを用いた[29]。したがって，$\hat{T}_c$ に左からデルタ関数 $|x\rangle$ に関する完全性関係を用いることにより，

$$\hat{T}_c = \int_{-\infty}^{\infty} dx\ |x\rangle\langle x-c| = \int_{-\infty}^{\infty} dx\ |x+c\rangle\langle x| \tag{5.2.56}$$

を得る。したがって，

$$\hat{T}_c\,|x\rangle = |x+c\rangle \tag{5.2.57}$$

[29] テイラー展開を $\langle x-c|f\rangle = f(x-c) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-c)^n}{n!} \frac{d^n}{dx^n} f(x) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-c)^n}{n!} \frac{d^n}{dx^n} \langle x|f\rangle$ と書くとわかりやすいと思います。

である。(5.2.56) より，$\hat{T}_c$ のエルミート共役は

$$\hat{T}_c^\dagger = \int_{-\infty}^{\infty} dx\ |x-c\rangle\langle x| = \int_{-\infty}^{\infty} dx\ |x\rangle\langle x+c| \tag{5.2.58}$$

と書ける。(5.2.58) より，$\hat{T}_c^\dagger = \hat{T}_c^{-1}$，つまり，$\hat{T}_c$ はユニタリ演算子であることが再び確認できる。

(5.2.56) より

$$\hat{T}_c\,|f\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dx\, f(x-c)\,|x\rangle \tag{5.2.59}$$

と表せるから，

$$\langle x|\hat{T}_c|f\rangle = f(x-c) \tag{5.2.60}$$

である。(5.2.60) は $\hat{T}_c$ が関数 $|f\rangle$ のグラフを x 軸の正の向きに c だけ平行移動する演算子であることを意味する。なお，$\mathscr{T}_c$ を $\mathscr{T}_c f(x) = f(x-c)$，つまり，

$$\mathscr{T}_c\,\langle x| = \langle x-c| \tag{5.2.61}$$

によって定義すると，

$$\langle x|\,\hat{T}_c = \mathscr{T}_c\,\langle x| \tag{5.2.62}$$

と表せる[30]。(5.2.62) を (5.2.55) と比べると，$\hbar_x = -i\frac{d}{dx}$ より，

$$\mathscr{T}_c = e^{-ic\hbar_x} \tag{5.2.63}$$

と書けることがわかる。$\mathscr{T}_c$ は $\hat{T}_c$ の座標表示である。

==========

補足・計算例 36.

1 変数関数の関数空間

区間 $(-\infty,\infty)$ において変数を x とする関数 $|f\rangle$ 全体のなす内積空間 V を考える。

例 1：反転演算子 $\hat{P}$ を平面波 $|k_x\rangle$ に作用させると，

$$\begin{aligned}\hat{P}\,|k_x\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int_{-\infty}^{\infty} dx\, e^{ik_x x}\hat{P}\,|x\rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int_{-\infty}^{\infty} dx\, e^{ik_x x}\,|-x\rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int_{-\infty}^{\infty} dx\, e^{-ik_x x}\,|x\rangle \\ &= |-k_x\rangle\end{aligned} \tag{5.2.64}$$

[30]補足・計算例 19 の例 2 以降，並進演算子はを $\mathscr{T}_c$ のように表して使ってきましたが，その $\hat{T}_c$ との関係は (5.2.62) によって与えられます。

を得る。

例 2：位置演算子 $\hat{x}$，波数演算子 $\hat{k}_x$，並進演算子 $\hat{T}_c$ を反転演算子 $\hat{P}$ によって $\hat{P}^\dagger\hat{x}\hat{P}$，$\hat{P}^\dagger\hat{k}_x\hat{P}$，$\hat{P}^\dagger\hat{T}_c\hat{P}$ のように変換すると[31]，

$$
\begin{aligned}
\hat{P}^\dagger\hat{x}\hat{P} &= \int_{-\infty}^{\infty} dx\, x\hat{P}^\dagger\,|x\rangle\langle x|\,\hat{P} = \int_{-\infty}^{\infty} dx\, x\,|-x\rangle\langle -x| = -\int_{-\infty}^{\infty} dx\, x\,|x\rangle\langle x| = -\hat{x} \\
\hat{P}^\dagger\hat{k}_x\hat{P} &= \int_{-\infty}^{\infty} dx\,\hat{P}^\dagger\,|x\rangle\left(-i\frac{d}{dx}\right)\langle x|\,\hat{P} = \int_{-\infty}^{\infty} dx\,|-x\rangle\left(-i\frac{d}{dx}\right)\langle -x| \\
&= -\int_{-\infty}^{\infty} dx\,|x\rangle\left(-i\frac{d}{dx}\right)\langle x| = -\hat{k}_x \\
\hat{P}^\dagger\hat{T}_c\hat{P} &= \int_{-\infty}^{\infty} dx\,\hat{P}^\dagger\,|x\rangle\langle x-c|\,\hat{P} = \int_{-\infty}^{\infty} dx\,|-x\rangle\langle -x+c| = \int_{-\infty}^{\infty} dx\,|x\rangle\langle x+c| = \hat{T}_{-c}
\end{aligned}
\tag{5.2.65}
$$

を得る。なお，これらの結果より，$\hat{P}$ は $\hat{x}$，$\hat{k}_x$，$\hat{T}_c$ のいずれとも交換しないことがわかる。

例 3：位置演算子 $\hat{x}$，波数演算子 $\hat{k}_x$，反転演算子 $\hat{P}$ を並進演算子 $\hat{T}_c$ によって $\hat{T}_c^\dagger\hat{x}\hat{T}_c$，$\hat{T}_c^\dagger\hat{k}_x\hat{T}_c$，$\hat{T}_c^\dagger\hat{P}\hat{T}_c$ のように変換すると，

$$
\begin{aligned}
\hat{T}_c^\dagger\hat{x}\hat{T}_c &= \int_{-\infty}^{\infty} dx\, x\hat{T}_c^\dagger\,|x\rangle\langle x|\,\hat{T}_c = \int_{-\infty}^{\infty} dx\, x\,|x-c\rangle\langle x-c| = \int_{-\infty}^{\infty} dx\,(x+c)\,|x\rangle\langle x| \\
&= \int_{-\infty}^{\infty} dx\, x\,|x\rangle\langle x| + c\int_{-\infty}^{\infty} dx\,|x\rangle\langle x| = \hat{x} + c\hat{I} \\
\hat{T}_c^\dagger\hat{k}_x\hat{T}_c &= \int_{-\infty}^{\infty} dx\,\hat{T}_c^\dagger\,|x\rangle\left(-i\frac{d}{dx}\right)\langle x|\,\hat{T}_c = \int_{-\infty}^{\infty} dx\,|x-c\rangle\left(-i\frac{d}{dx}\right)\langle x-c| \\
&= -\int_{-\infty}^{\infty} dx\,|x\rangle\left(-i\frac{d}{dx}\right)\langle x| = \hat{k}_x \\
\hat{T}_c^\dagger\hat{P}\hat{T}_c &= \int_{-\infty}^{\infty} dx\,\hat{T}_c^\dagger\,|-x\rangle\langle x|\,\hat{T}_c = \int_{-\infty}^{\infty} dx\,|-x-c\rangle\langle x-c| \\
&= \int_{-\infty}^{\infty} dx\,|-(x+c)-c\rangle\langle x+c-c| = \hat{P}_{-c}
\end{aligned}
\tag{5.2.66}
$$

を得る。ここで，$\hat{P}_{-c}$ は $x = -c$ を対称の中心とする反転演算子であり，関数 $f(x)$ に対して $\hat{P}_{-c} : f(x+c-c) \mapsto f(-(x+c)-c)$ と作用する。なお，これらの結果より，$\hat{T}_c$ は $\hat{k}_x$ とは交換するが，$\hat{x}$，$\hat{P}$ とは交換しないことがわかる。

==========

[31] ユニタリ演算子 $\hat{U}$ によって $|f\rangle$，$|g\rangle$ を $|f'\rangle = \hat{U}\,|f\rangle$，$|g'\rangle = \hat{U}\,|g\rangle$ に変換したときに，$\langle f|\hat{X}'|g\rangle = \langle f'|\hat{X}|g'\rangle$ となるような演算子 $\hat{X}'$ は $\hat{X}' = \hat{U}^\dagger\hat{X}\hat{U}$ で与えられます。量子力学では，$|f\rangle$，$|g\rangle$ を $|f'\rangle = \hat{U}\,|f\rangle$，$|g'\rangle = \hat{U}\,|g\rangle$ に変換して $\hat{X}$ はそのまま用いる方式と，$|f\rangle$，$|g\rangle$ はそのままにして $\hat{X}$ のほうを $\hat{X}' = \hat{U}^\dagger\hat{X}\hat{U}$ に変換して用いる方式の 2 通りが主に用いられます。前者を**シュレーディンガー描像**，後者を**ハイゼンベルク描像**とよびます。また，$\hat{U} = \hat{U}_1\hat{U}_2$ と分けて，$\hat{X}$ を $\hat{U}_1$ で $\hat{U}_1^\dagger\hat{X}\hat{U}_1$ に変換し，$|f\rangle$，$|g\rangle$ を $\hat{U}_2$ で $\hat{U}_2\,|f\rangle$，$\hat{U}_2\,|g\rangle$ に変換して用いる方式を**相互作用描像**とよびます。

5.2.5 シュツルム–リウヴィル理論

本項では，第 7 章の波動・電磁気学・量子力学への応用の際に必要となる**シュツルム–リウヴィル理論** について述べる。なお，本項の内容が第 1 章から第 6 章までの他の箇所で必要となることはない。

区間 $[a, b]$ において関数 $y = f(x)$ の満たす 2 階同次線形微分方程式

$$p_0(x)y'' + p_1(x)y' + p_2(x)y + \lambda y = 0 \tag{5.2.67}$$

を考える。ここで，$p_0(x)$，$p_1(x)$，$p_2(x)$ は実関数であり，λ はスカラーである。ただし，$a \leq x \leq b$ において $p_0(x) > 0$ とする。**重み関数** $w(x)$ を

$$w(x) = \frac{1}{p_0(x)} \exp\left(\int^x dx' \, \frac{p_1(x')}{p_0(x')}\right) \tag{5.2.68}$$

によって定義すると，(5.2.67) は

$$\frac{d}{dx}p(x)\frac{d}{dx}f(x) + q(x)f(x) + \lambda w(x)f(x) = 0 \tag{5.2.69}$$

と表せる。ここで，$p(x) = w(x)p_0(x)$，$q(x) = w(x)p_2(x)$ である。あるいは，演算子 $\mathscr{L}$ を

$$\mathscr{L} = \frac{1}{w(x)}\left(-\frac{d}{dx}p(x)\frac{d}{dx} - q(x)\right) \tag{5.2.70}$$

によって定義すると，(5.2.69) は

$$\mathscr{L}f(x) = \lambda f(x) \tag{5.2.71}$$

と書ける。(5.2.71) からわかるように，λ は演算子 $\mathscr{L}$ の固有値であり，$f(x)$ は固有値 λ に属する固有関数である。(5.2.69)，(5.2.71) を**シュツルム–リウヴィル型**の微分方程式という。

シュツルム–リウヴィル型の微分方程式は適当な境界条件を満たす関数全体のなす内積空間におけるエルミート演算子の固有値問題として扱えることを示そう。境界条件は，実数の定数 α_1，α_2，β_1，β_2 を用いて，

$$\begin{cases} \alpha_1 f(a) + \alpha_2 f'(a) = 0 & (\alpha_1 = \alpha_2 = 0 \text{ は除く}) \\ \beta_1 f(b) + \beta_2 f'(b) = 0 & (\beta_1 = \beta_2 = 0 \text{ は除く}) \end{cases} \tag{5.2.72}$$

であるとする。(5.2.72) を満たす関数の全体 V は線形空間となる[32]。(5.2.72) を**ロビン境界条件**という。また，(5.2.72) の特別な場合として，$f(a)=0$，$f(b)=0$ を**ディリクレ境界条件** (**固定境界条件**)，$f'(a)=0$，$f'(b)=0$ を**ノイマン境界条件** (**自然境界条件**)，$f(a)=0$，$f'(b)=0$ または $f'(a)=0$，$f(b)=0$ を**混合境界条件**という[33]。さらに，§5.1.1 で扱った関数空間の内積 (5.1.3) を重み関数 $w(x)$ により

$$(\,|f\rangle\,,\,|g\rangle) = \int_a^b w(x)dx\, f(x)^* g(x) \tag{5.2.73}$$

と一般化する。(5.2.73) を**重み付き内積**という[34]。重み付き内積の場合，(5.2.8)，(5.2.11)，(5.2.12) は

$$|f\rangle = \int_a^b w(x)dx\, f(x)\,|x\rangle \qquad \langle x|\xi\rangle = \frac{1}{w(x)}\delta(x-\xi) \qquad \hat{I} = \int_a^b w(x)dx\,|x\rangle\langle x| \tag{5.2.74}$$

のように修正される[35]。V の演算子 $\hat{L}$ を

$$\hat{L} = \int_a^b w(x)dx\,|x\rangle\,\mathscr{L}\,\langle x| \tag{5.2.75}$$

によって定義すると，

$$\hat{L}\text{ は }V\text{ のエルミート演算子} \tag{5.2.76}$$

である。$\hat{L}$ を用いると (5.2.71) は

$$\hat{L}\,|f\rangle = \lambda\,|f\rangle \tag{5.2.77}$$

と表せる。つまり, シュツルム–リウヴィル型の微分方程式は, 重み付き内積 (5.2.73) を導入することにより，エルミート演算子 $\hat{L}$ の固有値問題とみなすことができる。

[32] (5.2.72) の境界条件は右辺が 0 となっています。このような境界条件を**同次境界条件**といいます。そうでないとき，**非同次境界条件**といいます。同次境界条件を満たす関数の全体は線形空間となるのに対し，非同次境界条件を満たす関数の全体は一般には線形空間とはならないことに注意しましょう。

[33] (5.2.72) とは異なる種類の境界条件ですが，**周期的境界条件** $f(a)=f(b)$, $p(a)f'(a)=p(b)f'(b)$ の場合にもシュツルム–リウヴィル型の微分方程式をエルミート演算子の固有値問題として扱うことができます。

[34] 重み付き内積については補章 C.1 を参照してください。

[35] 変数変換 $u=u(x)=\int^x w(x')dx'$ を行うと, $w(x)dx=du$ および $\frac{1}{w(x)}\delta(x-\xi)=\delta(u(x)-u(\xi))$ となります。(5.2.74) の第 2 式 $\langle x|\xi\rangle=\frac{1}{w(x)}\delta(x-\xi)$ はこの変数変換に伴う修正だと考えることもできます。実際，$|u\rangle=|x\rangle$ と選べば，変数を u とする関数全体のなす関数空間では重み関数を 1 とした場合のデルタ関数の公式が成り立ちます。

[(5.2.76) の証明] $\hat{L}$ がエルミート演算子の定義 $(|f\rangle, \hat{L}|g\rangle) = (\hat{L}|f\rangle, |g\rangle)$，つまり，$\langle f|\hat{L}|g\rangle = \langle g|\hat{L}|f\rangle^*$ を満たすことを示す。境界条件 (5.2.72) より，

$$
\begin{aligned}
\langle f|\hat{L}|g\rangle &= \int_a^b w(x)dx\, f(x)^* \mathscr{L} g(x) = \int_a^b dx\, f(x)^* \left(-\frac{d}{dx}p(x)\frac{d}{dx} - q(x)\right) g(x) \\
&= -[f(x)^* p(x) g'(x)]_a^b + \int_a^b dx \left(\frac{df(x)^*}{dx} p(x) \frac{dg(x)}{dx} - f(x)^* q(x) g(x)\right) \\
&\overset{①}{=} \underbrace{-[f(x)^* p(x) g'(x)]_a^b + [p(x) f'(x)^* g(x)]_a^b}_{0} \\
&\qquad\qquad + \int_a^b dx \left(-\left(\frac{d}{dx}p(x)\frac{df(x)^*}{dx}\right) g(x) - f(x)^* q(x) g(x)\right) \\
&= \left(\int_a^b dx\, g(x)^* \left(-\frac{d}{dx}p(x)\frac{d}{dx} - q(x)\right) f(x)\right)^* \\
&= \left(\int_a^b w(x)dx\, g(x)^* \mathscr{L} f(x)\right)^* = \langle g|\hat{L}|f\rangle^*
\end{aligned}
\tag{5.2.78}
$$

を得る。等式①の右辺の境界項が 0 となるのは，

$$
\begin{aligned}
&-[f(x)^* p(x) g'(x)]_a^b + [p(x) f'(x)^* g(x)]_a^b \\
&\quad = p(a)(f(a)^* g'(a) - f'(a)^* g(a)) - p(b)(f(b)^* g'(b) - f'(b)^* g(b))
\end{aligned}
\tag{5.2.79}
$$

と書くと明らかなように，境界条件 (5.2.72) により $f(a)^* : f'(a)^* = g(a) : g'(a)$，$f(b)^* : f'(b)^* = g(b) : g'(b)$ であることによる。以上より，$\hat{L}$ は V のエルミート演算子であることが示された。 ■

物理への応用においてシュツルム–リウヴィル型の微分方程式の解として現れるいくつかの関数は特に重要である[36]。これらを以下に挙げる。なお，(1) から (5) における n は零または正の整数 $(n = 0, 1, 2, \cdots)$ である。

(1) エルミート多項式

エルミート多項式 $H_n(x)$ は**エルミートの微分方程式**

$$
y'' - 2xy' + 2ny = 0 \qquad \text{区間：}(-\infty, \infty) \tag{5.2.80}
$$

[36]物理への応用に際して特に重要となるこれらの関数の詳細については参考文献 [12] を参照してください。

の独立な解の一つである[37]。このとき,

$$
\begin{aligned}
&p_0(x)=1 \qquad p_1(x)=-2x \qquad p_2(x)=0 \qquad \lambda=2n \\
&w(x)=e^{-x^2} \qquad p(x)=e^{-x^2} \qquad q(x)=0 \\
&\mathscr{L}=-e^{x^2}\frac{d}{dx}e^{-x^2}\frac{d}{dx}
\end{aligned}
\tag{5.2.81}
$$

である。$\mathscr{L}$ の固有値 $\lambda=2n$ に属する正規化された固有関数を $\varphi_n(x)$ とすると

$$
\varphi_n(x)=\frac{1}{\sqrt{\sqrt{\pi}2^n n!}}H_n(x) \tag{5.2.82}
$$

と表せる。

(2) ルジャンドル多項式

ルジャンドル多項式 $P_n(x)$ は**ルジャンドルの微分方程式**

$$
(1-x^2)y''-2xy'+n(n+1)y=0 \qquad \text{区間：}[-1,1] \tag{5.2.83}
$$

の独立な解の一つである[38]。このとき,

$$
\begin{aligned}
&p_0(x)=1-x^2 \qquad p_1(x)=-2x \qquad p_2(x)=0 \qquad \lambda=n(n+1) \\
&w(x)=1 \qquad p(x)=1-x^2 \qquad q(x)=0 \\
&\mathscr{L}=-\frac{d}{dx}(1-x^2)\frac{d}{dx}
\end{aligned}
\tag{5.2.84}
$$

である。$\mathscr{L}$ の固有値 $\lambda=n(n+1)$ に属する正規化された固有関数を $\varphi_n(x)$ とすると

$$
\varphi_n(x)=\sqrt{\frac{2n+1}{2}}P_n(x) \tag{5.2.85}
$$

と表せる。

(3) ルジャンドル陪関数

ルジャンドル陪関数 $P_n^m(x)$ は**ルジャンドルの陪微分方程式**

$$
\begin{aligned}
(1-x^2)y''-2xy'-\frac{m^2}{1-x^2}y+n(n+1)y=0 \qquad &\text{区間：}[-1,1] \\
&(m=-n,-n+1,\cdots,n-1,n)
\end{aligned}
\tag{5.2.86}
$$

[37]エルミートの微分方程式のもう一つの独立な解として第 2 種エルミート関数 $h_n(x)$ があります。

[38]ルジャンドルの微分方程式のもう一つの独立な解として第 2 種ルジャンドル関数 $Q_n(x)$ があります。

の独立な解の一つである[39]。このとき，

$$
\begin{aligned}
&p_0(x) = 1 - x^2 \qquad p_1(x) = -2x \qquad p_2(x) = -\frac{m^2}{1-x^2} \qquad \lambda = n(n+1) \\
&w(x) = 1 \qquad p(x) = 1 - x^2 \qquad q(x) = -\frac{m^2}{1-x^2} \\
&\mathscr{L} = -\frac{d}{dx}(1-x^2)\frac{d}{dx} + \frac{m^2}{1-x^2}
\end{aligned}
\tag{5.2.87}
$$

である。m が与えられたとき，$\mathscr{L}$ の固有値 $\lambda = n(n+1)$ に属する正規化された固有関数を $\varphi_n^m(x)$ とすると

$$
\varphi_n^m(x) = \sqrt{\frac{2n+1}{2}\frac{(n-m)!}{(n+m)!}}P_n^m(x) \tag{5.2.88}
$$

と表せる。

(4) ラゲール多項式

ラゲール多項式 $L_n(x)$ は**ラゲールの微分方程式**

$$
xy'' + (1-x)y' + ny = 0 \qquad \text{区間：}[0, \infty) \tag{5.2.89}
$$

の独立な解の一つである[40]。このとき，

$$
\begin{aligned}
&p_0(x) = x \qquad p_1(x) = 1 - x \qquad p_2(x) = 0 \qquad \lambda = n \\
&w(x) = e^{-x} \qquad p(x) = xe^{-x} \qquad q(x) = 0 \\
&\mathscr{L} = -e^x\frac{d}{dx}xe^{-x}\frac{d}{dx}
\end{aligned}
\tag{5.2.90}
$$

である。$\mathscr{L}$ の固有値 $\lambda = n$ に属する正規化された固有関数を $\varphi_n(x)$ とすると

$$
\varphi_n(x) = \frac{1}{n!}L_n(x) \tag{5.2.91}
$$

と表せる。

(5) ラゲール陪多項式

ラゲール陪多項式 $L_n^k(x)$ は**ラゲールの陪微分方程式**

$$
\begin{aligned}
xy'' + (k+1-x)y' + (n-k)y = 0 \qquad &\text{区間：}[0, \infty) \\
&(k = 0, 1, 2, \cdots, n)
\end{aligned}
\tag{5.2.92}
$$

[39] ルジャンドルの陪微分方程式のもう一つの独立な解として第 2 種ルジャンドル陪関数 $Q_n^m(x)$ があります。

[40] ラゲールの微分方程式のもう一つの独立な解として第 2 種ラゲール関数 $l_n(x)$ があります。

の独立な解の一つである[41]。このとき，

$$
\begin{aligned}
&p_0(x) = x \qquad p_1(x) = k+1-x \qquad p_2(x) = 0 \qquad \lambda = n-k \\
&w(x) = x^k e^{-x} \qquad p(x) = x^{k+1}e^{-x} \qquad q(x) = 0 \\
&\mathscr{L} = -x^{-k}e^{x}\frac{d}{dx}x^{k+1}e^{-x}\frac{d}{dx}
\end{aligned}
\tag{5.2.93}
$$

である。k が与えられたとき，$\mathscr{L}$ の固有値 $\lambda = n-k$ に属する正規化された固有関数を $\varphi_n^k(x)$ とすると

$$
\varphi_n^k(x) = \sqrt{\frac{(n-k)!}{(n!)^3}}L_n^k(x) \tag{5.2.94}
$$

と表せる。

(6) 正弦関数・余弦関数
正弦関数 $\sin(\alpha x)$，余弦関数 $\cos(\alpha x)$ は微分方程式

$$
y'' + \alpha^2 y = 0 \qquad \text{区間：}[\,a, b\,] \tag{5.2.95}
$$

の独立な解である。このとき，

$$
\begin{aligned}
&p_0(x) = 1 \qquad p_1(x) = 0 \qquad p_2(x) = 0 \qquad \lambda = \alpha^2 \\
&w(x) = 1 \qquad p(x) = 1 \qquad q(x) = 0 \\
&\mathscr{L} = -\frac{d^2}{dx^2}
\end{aligned}
\tag{5.2.96}
$$

である。$\zeta = \alpha x$ とすると，(5.2.95) は

$$
y'' + y = 0 \tag{5.2.97}
$$

となる。(5.2.97) の一般解 $y = f(\zeta)$ は，A，B を任意定数として，

$$
f(\zeta) = A\sin\zeta + B\cos\zeta \tag{5.2.98}
$$

によって与えられる。したがって，

$$
f(\alpha x) = A\sin(\alpha x) + B\cos(\alpha x) \tag{5.2.99}
$$

は (5.2.95) の解であり，(5.2.71) に対応して，

$$
-\frac{d^2}{dx^2}f(\alpha x) = \alpha^2 f(\alpha x) \tag{5.2.100}
$$

[41] ラゲールの陪微分方程式のもう一つの独立な解として第 2 種ラゲール陪関数 $l_n^k(x)$ があります。

と書ける。固有値 α^2 は境界条件 (5.2.72) から決まる。例えば，区間として $[0,1]$ を考えよう。ディリクレ境界条件 $f(0)=0$，$f(1)=0$ を要請すると，$B=0$，$\alpha_n = n\pi\,(n=1,2,\cdots)$ となる。このとき，正規化された固有関数を $\varphi_n(x)$ とすると，

$$\varphi_n(x) = \sqrt{2}\sin(\alpha_n x) \tag{5.2.101}$$

と表せる。一方, ノイマン境界条件 $f'(0)=0$, $f'(1)=0$ を要請すると, $A=0$, $\alpha_n = n\pi\,(n=0,1,2,\cdots)$ となる。このとき，正規化された固有関数を $\varphi_n(x)$ とすると，

$$\varphi_n(x) = \begin{cases} 1 & (n=0) \\ \sqrt{2}\cos(\alpha_n x) & (n=1,2,\cdots) \end{cases} \tag{5.2.102}$$

と表せる。

(7) ベッセル関数・ノイマン関数

ベッセル関数 $J_m(\alpha x)$，**ノイマン関数** $Y_m(\alpha x)$ は**ベッセルの微分方程式**

$$y'' + \frac{1}{x}y' + \left(\alpha^2 - \frac{m^2}{x^2}\right)y = 0 \qquad \text{区間：}[a,b] \tag{5.2.103}$$

$$(m \text{ は任意の整数},\ a \geq 0)$$

の独立な解である[42]。このとき，

$$\begin{aligned} &p_0(x) = 1 \qquad p_1(x) = \frac{1}{x} \qquad p_2(x) = -\frac{m^2}{x^2} \qquad \lambda = \alpha^2 \\ &w(x) = x \qquad p(x) = x \qquad q(x) = -\frac{m^2}{x} \\ &\mathscr{L} = -\frac{1}{x}\frac{d}{dx}x\frac{d}{dx} + \frac{m^2}{x^2} \end{aligned} \tag{5.2.104}$$

である。$\zeta = \alpha x$ とすると，(5.2.103) は

$$y'' + \frac{1}{\zeta}y' + \left(1 - \frac{m^2}{\zeta^2}\right)y = 0 \tag{5.2.105}$$

となる。(5.2.105) の一般解 $y = f(\zeta)$ は，A，B を任意定数として，

$$f(\zeta) = AJ_m(\zeta) + BY_m(\zeta) \tag{5.2.106}$$

[42]通常，単にベッセルの微分方程式というときは (5.2.103) の $\alpha = 1$ の場合を指します。そのため，(5.2.103) をパラメトリックなベッセルの微分方程式ということがあります。

によって与えられる。したがって，

$$f(\alpha x) = AJ_m(\alpha x) + BY_m(\alpha x) \tag{5.2.107}$$

は (5.2.103) の解であり，(5.2.71) に対応して，

$$\left(-\frac{d^2}{dx^2} - \frac{1}{x}\frac{d}{dx} + \frac{m^2}{x^2}\right) f(\alpha x) = \alpha^2 f(\alpha x) \tag{5.2.108}$$

あるいは，

$$\left(-\frac{1}{x}\frac{d}{dx}x\frac{d}{dx} + \frac{m^2}{x^2}\right) f(\alpha x) = \alpha^2 f(\alpha x) \tag{5.2.109}$$

と書ける。固有値 α^2 は境界条件 (5.2.72) から決まる。例えば，区間として $[0,1]$ を考えよう。この場合, $Y_m(\alpha x)$ は $x=0$ において発散するため, (5.2.107) において $B=0$ である[43]。$x=1$ においてディリクレ境界条件 $J_m(j_{mn})=0$ を要請すると，$j_{mn}\,(n=1,2,\cdots)$ は $J_m(\zeta)$ の n 番目の零点 $\zeta = j_{mn}$ として決まる。このとき，与えられた m に対して正規化された固有関数を $\varphi_n^m(x)$ とすると，

$$\varphi_n^m(x) = \sqrt{\frac{2}{J_{m+1}(j_{mn})^2}}\,J_m(j_{mn}x) \tag{5.2.110}$$

と表せる。一方，$x=1$ においてノイマン境界条件 $J'_m(j'_{mn})=0$ を要請すると，$j'_{mn}\,(n=1,2,\cdots)$ は $J'_m(\zeta)$ の n 番目の零点 $\zeta = j'_{mn}$ として決まる[44]。このとき，与えられた m に対して正規化された固有関数を $\varphi_n^m(x)$ とすると，

$$\varphi_n^m(x) = \sqrt{\frac{2}{(1-m^2/j'^2_{mn})J_m(j'_{mn})^2}}\,J_m(j'_{mn}x) \tag{5.2.111}$$

と表せる[45]。

(8) 球ベッセル関数・球ノイマン関数

球ベッセル関数 $j_l(\alpha x)$，**球ノイマン関数** $y_l(\alpha x)$ は微分方程式

$$y'' + \frac{2}{x}y' + \left(\alpha^2 - \frac{l(l+1)}{x^2}\right)y = 0 \qquad \text{区間：}[a,b] \qquad (l=0,1,2,\cdots,\ a\geq 0) \tag{5.2.112}$$

[43]区間 $[a,b]$ の端点 $x=a$ が正の場合 ($x=0$ が区間に含まれない場合)，(5.2.107) において $B=0$ とは限らず，一般には解を表すのに $Y_m(\alpha x)$ も必要となります。

[44]解として定数関数を含める場合は $j'_{01}=0$ とし，含めない場合は $j'_{01}=3.8317\cdots$ とします。前者の場合，$\varphi_{01}(x)=\sqrt{2}$ です。j'_{01} としてどちらの場合が想定されているかは考えている問題によりますので注意が必要です。

[45](5.2.110)，(5.2.111) の正規化因子の求め方については参考文献 [13] の第 14 章を参照してください。

の独立な解である。このとき，

$$
\begin{aligned}
&p_0(x)=1 \qquad p_1(x)=\frac{2}{x} \qquad p_2(x)=-\frac{l(l+1)}{x^2} \qquad \lambda=\alpha^2 \\
&w(x)=x^2 \qquad p(x)=x^2 \qquad q(x)=-l(l+1) \\
&\mathscr{L}=-\frac{1}{x^2}\frac{d}{dx}x^2\frac{d}{dx}+\frac{l(l+1)}{x^2}
\end{aligned}
\tag{5.2.113}
$$

である。$\zeta=\alpha x$ とすると，(5.2.112) は

$$
y''+\frac{2}{\zeta}y'+\left(1-\frac{l(l+1)}{\zeta^2}\right)y=0 \tag{5.2.114}
$$

となる。(5.2.114) の一般解 $y=f(\zeta)$ は，A，B を任意定数として，

$$
f(\zeta)=Aj_l(\zeta)+By_l(\zeta) \tag{5.2.115}
$$

によって与えられる。したがって，

$$
f(\alpha x)=Aj_l(\alpha x)+By_l(\alpha x) \tag{5.2.116}
$$

は (5.2.112) の解であり，(5.2.71) に対応して，

$$
\left(-\frac{d^2}{dx^2}-\frac{2}{x}\frac{d}{dx}+\frac{l(l+1)}{x^2}\right)f(\alpha x)=\alpha^2 f(\alpha x) \tag{5.2.117}
$$

あるいは，

$$
\left(-\frac{1}{x^2}\frac{d}{dx}x^2\frac{d}{dx}+\frac{l(l+1)}{x^2}\right)f(\alpha x)=\alpha^2 f(\alpha x) \tag{5.2.118}
$$

と書ける。固有値 α^2 は境界条件 (5.2.72) から決まる。例えば，区間として $[0,1]$ を考えよう。この場合, $y_l(\alpha x)$ は $x=0$ において発散するため, (5.2.116) において $B=0$ である[46]。$x=1$ においてディリクレ境界条件 $j_l(\alpha_{ln})=0$ を要請すると，$\alpha_{ln}\,(n=1,2,\cdots)$ は $j_l(\zeta)$ の n 番目の零点 $\zeta=\alpha_{ln}$ として決まる。このとき，与えられた l に対して正規化された固有関数を $\varphi_n^l(x)$ とすると，

$$
\varphi_n^l(x)=\sqrt{\frac{2}{j_{l+1}(\alpha_{ln})^2}}\,j_l(\alpha_{ln}x) \tag{5.2.119}
$$

[46]区間 $[a,b]$ の端点 $x=a$ が正の場合 ($x=0$ が区間に含まれない場合)，(5.2.116) において $B=0$ とは限らず，一般には解を表すのに $y_l(\alpha x)$ も必要となります。

と表せる。一方，$x=1$ においてノイマン境界条件 $j_l'(\alpha_{ln}')=0$ を要請すると，$\alpha_{ln}'\,(n=1,2,\cdots)$ は $j_l'(\zeta)$ の n 番目の零点 $\zeta=\alpha_{ln}'$ として決まる[47]。このとき，与えられた l に対して正規化された固有関数を $\varphi_n^l(x)$ とすると，

$$\varphi_n^l(x)=\sqrt{\frac{2}{(1-l(l+1)/\alpha_{ln}'^2)j_l(\alpha_{ln}')^2}}\,j_l(\alpha_{ln}'x) \tag{5.2.120}$$

と表せる。

5.3 多変数関数の関数空間

5.3.1 スピン自由度をもつ 3 変数関数の関数空間

区間 $(-\infty,\infty)$ において，変数を x とする関数の全体のなす関数空間を V_x とする。同様に，変数を y，z とする関数の全体のなす関数空間を V_y，V_z とする。さらに，ベクトル $|\uparrow\rangle$，$|\downarrow\rangle$ によって張られる内積空間を $V_{\rm spin}$ とし，$\{\,|\uparrow\rangle\,,\,|\downarrow\rangle\}$ は $V_{\rm spin}$ の正規直交基底であるとする。これらを用いてテンソル積 $V=V_x\otimes V_y\otimes V_z\otimes V_{\rm spin}$ を構成する[48]。3 次元空間の位置ベクトルを $\boldsymbol{r}=x\,\boldsymbol{e}_x+y\,\boldsymbol{e}_y+z\,\boldsymbol{e}_z$，スピン変数を $\sigma=\uparrow,\downarrow$ として，スピン自由度をもつ 3 次元デルタ関数 $|\boldsymbol{r}\,\sigma\rangle$ を

$$|\boldsymbol{r}\,\sigma\rangle=\,|x\rangle\otimes\,|y\rangle\otimes\,|z\rangle\otimes\,|\sigma\rangle \tag{5.3.1}$$

によって定義する。(5.3.1) は $|\boldsymbol{r}\rangle=\,|x\rangle\otimes\,|y\rangle\otimes\,|z\rangle$ とおくと $|\boldsymbol{r}\,\sigma\rangle=\,|\boldsymbol{r}\rangle\otimes\,|\sigma\rangle$ と表すこともできる。$|\boldsymbol{r}\,\sigma\rangle$ について

$$\langle\boldsymbol{r}\,\sigma|\boldsymbol{r}'\sigma'\rangle=\delta(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}')\delta_{\sigma\sigma'} \tag{5.3.2}$$

が成り立つ。ここで，

$$\delta(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}')=\delta(x-x')\delta(y-y')\delta(z-z') \tag{5.3.3}$$

であり，$\delta_{\sigma\sigma'}$ はクロネッカーのデルタである。また，波数ベクトルを $\boldsymbol{k}=k_x\,\boldsymbol{e}_x+k_y\,\boldsymbol{e}_y+k_z\,\boldsymbol{e}_z$ として，スピン自由度をもつ 3 次元平面波 $|\boldsymbol{k}\,\sigma\rangle$ を

$$|\boldsymbol{k}\,\sigma\rangle=\,|k_x\rangle\otimes\,|k_y\rangle\otimes\,|k_z\rangle\otimes\,|\sigma\rangle \tag{5.3.4}$$

[47]解として定数関数を含める場合は $\alpha_{01}'=0$ とし，含めない場合は $\alpha_{01}'=4.4934\cdots$ とします。前者の場合，$\varphi_{01}(x)=\sqrt{3}$ です。α_{01}' としてどちらの場合が想定されているかは考えている問題によりますので注意が必要です。

[48]ここでの V_x，V_y，V_z は補足・計算例 33 の例 2 で考えたものの無限次元版です。

によって定義する。(5.3.4) は $|\boldsymbol{k}\rangle = |k_x\rangle \otimes |k_y\rangle \otimes |k_z\rangle$ とおくと $|\boldsymbol{k}\,\sigma\rangle = |\boldsymbol{k}\rangle \otimes |\sigma\rangle$ と表すこともできる。$|\boldsymbol{k}\,\sigma\rangle$ について

$$\langle \boldsymbol{r}|\boldsymbol{k}\rangle = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} e^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}} \qquad \langle \boldsymbol{k}\,\sigma|\boldsymbol{k}'\sigma'\rangle = \delta(\boldsymbol{k}-\boldsymbol{k}')\delta_{\sigma\sigma'} \tag{5.3.5}$$

が成り立つ。ここで,

$$\delta(\boldsymbol{k}-\boldsymbol{k}') = \delta(k_x - k_x')\delta(k_y - k_y')\delta(k_z - k_z') \tag{5.3.6}$$

である。$|\boldsymbol{r}\,\sigma\rangle$, $|\boldsymbol{k}\,\sigma\rangle$ に関する完全性関係は

$$\hat{I} = \sum_\sigma \int d^3r\ |\boldsymbol{r}\,\sigma\rangle\langle \boldsymbol{r}\,\sigma| \qquad \hat{I} = \sum_\sigma \int d^3k\ |\boldsymbol{k}\,\sigma\rangle\langle \boldsymbol{k}\,\sigma| \tag{5.3.7}$$

である。位置演算子 $\hat{\boldsymbol{r}} = \hat{x}\,\boldsymbol{e}_x + \hat{y}\,\boldsymbol{e}_y + \hat{z}\,\boldsymbol{e}_z$ および波数演算子 $\hat{\boldsymbol{k}} = \hat{k}_x\,\boldsymbol{e}_x + \hat{k}_y\,\boldsymbol{e}_y + \hat{k}_z\,\boldsymbol{e}_z$ を

$$\hat{\boldsymbol{r}} = \sum_\sigma \int d^3r\,\boldsymbol{r}\,|\boldsymbol{r}\,\sigma\rangle\langle \boldsymbol{r}\,\sigma| \qquad \begin{cases} \hat{x} = \displaystyle\sum_\sigma \int d^3r\,x\,|\boldsymbol{r}\,\sigma\rangle\langle \boldsymbol{r}\,\sigma| \\ \hat{y} = \displaystyle\sum_\sigma \int d^3r\,y\,|\boldsymbol{r}\,\sigma\rangle\langle \boldsymbol{r}\,\sigma| \\ \hat{z} = \displaystyle\sum_\sigma \int d^3r\,z\,|\boldsymbol{r}\,\sigma\rangle\langle \boldsymbol{r}\,\sigma| \end{cases} \tag{5.3.8}$$

$$\hat{\boldsymbol{k}} = \sum_\sigma \int d^3r\ |\boldsymbol{r}\,\sigma\rangle\,(-i\boldsymbol{\nabla})\,\langle \boldsymbol{r}\,\sigma| \qquad \begin{cases} \hat{k}_x = \displaystyle\sum_\sigma \int d^3r\ |\boldsymbol{r}\,\sigma\rangle\,(-i\partial_x)\,\langle \boldsymbol{r}\,\sigma| \\ \hat{k}_y = \displaystyle\sum_\sigma \int d^3r\ |\boldsymbol{r}\,\sigma\rangle\,(-i\partial_y)\,\langle \boldsymbol{r}\,\sigma| \\ \hat{k}_z = \displaystyle\sum_\sigma \int d^3r\ |\boldsymbol{r}\,\sigma\rangle\,(-i\partial_z)\,\langle \boldsymbol{r}\,\sigma| \end{cases} \tag{5.3.9}$$

によって定義する。$\hat{\boldsymbol{r}}$ および $\hat{\boldsymbol{k}}$ はスピン自由度に対して恒等演算子として作用するため，混乱の生じない限り，V_{spin} の恒等演算子 $\sum_\sigma |\sigma\rangle\langle\sigma|$ を省略した形

$$\hat{\boldsymbol{r}} = \int d^3r\,\boldsymbol{r}\,|\boldsymbol{r}\rangle\langle \boldsymbol{r}| \qquad \hat{\boldsymbol{k}} = \int d^3r\ |\boldsymbol{r}\rangle\,(-i\boldsymbol{\nabla})\,\langle \boldsymbol{r}| \tag{5.3.10}$$

を用いてもよい。$\hat{\boldsymbol{r}}$, $\hat{\boldsymbol{k}}$ はともにエルミート演算子である。これらの性質として

$$\hat{\boldsymbol{r}}\,|\boldsymbol{r}\,\sigma\rangle = \boldsymbol{r}\,|\boldsymbol{r}\,\sigma\rangle \qquad \langle \boldsymbol{r}\,\sigma|\,\hat{\boldsymbol{k}} = -i\boldsymbol{\nabla}\,\langle \boldsymbol{r}\,\sigma| \qquad \hat{\boldsymbol{k}}\,|\boldsymbol{k}\,\sigma\rangle = \boldsymbol{k}\,|\boldsymbol{k}\,\sigma\rangle \tag{5.3.11}$$

および

$$[\,\hat{x},\hat{k}_x\,]=i\hat{I}\qquad[\,\hat{y},\hat{k}_y\,]=i\hat{I}\qquad[\,\hat{z},\hat{k}_z\,]=i\hat{I}\qquad(\text{その他は}\hat{0})\tag{5.3.12}$$

などが重要である[49]。なお，(5.3.11) の第 2 式の右辺における $-i\boldsymbol{\nabla}$ を必要に応じて $\boldsymbol{\mathscr{k}}=-i\boldsymbol{\nabla}$ とおき，

$$\langle\boldsymbol{r}\,\sigma|\,\hat{\boldsymbol{k}}=\boldsymbol{\mathscr{k}}\,\langle\boldsymbol{r}\,\sigma|\tag{5.3.13}$$

と表すことにする。$\boldsymbol{\mathscr{k}}=\mathscr{k}_x\,\boldsymbol{e}_x+\mathscr{k}_y\,\boldsymbol{e}_y+\mathscr{k}_z\,\boldsymbol{e}_z$ とすると，$\mathscr{k}_x=-i\partial_x$，$\mathscr{k}_y=-i\partial_y$，$\mathscr{k}_z=-i\partial_z$ である。$\boldsymbol{\mathscr{k}}$ は $\hat{\boldsymbol{k}}$ の座標表示である[50]。

5.3.2　反転演算子・鏡映演算子・並進演算子

反転演算子 $\hat{P}$ を

$$\hat{P}=\sum_\sigma\int d^3r\;|-\boldsymbol{r}\,\sigma\rangle\langle\boldsymbol{r}\,\sigma|\tag{5.3.14}$$

によって定義する[51]。つまり，

$$\hat{P}\,|\boldsymbol{r}\,\sigma\rangle=\,|-\boldsymbol{r}\,\sigma\rangle\tag{5.3.15}$$

と定める[52]。$\hat{P}$ はスピン自由度に対して恒等演算子として作用する。(5.3.14) より，$\hat{P}^\dagger=\hat{P}$，$\hat{P}^\dagger=\hat{P}^{-1}$，つまり，$\hat{P}$ はエルミート演算子であると同時にユニタリ演算子であることがわかる。また，

$$\hat{P}\,|f\rangle=\sum_\sigma\int d^3r\,f(-\boldsymbol{r},\sigma)\,|\boldsymbol{r}\,\sigma\rangle\tag{5.3.16}$$

---

[49] $\sum_\sigma\int d^3r\;|\boldsymbol{r}\,\sigma\rangle\langle\boldsymbol{r}\,\sigma|=\hat{I}$ なので，(5.3.9) と (5.3.11) の第 2 式は同じです。

[50] 補足・計算例 19 の (2.2.66) 以降，波数演算子を $\mathscr{k}_x$，$\mathscr{k}_y$，$\mathscr{k}_z$ のように表して使ってきましたが，その $\hat{\boldsymbol{k}}$ との関係は (5.3.13) によって与えられます。厳密にいうと $\hat{\boldsymbol{k}}\neq\boldsymbol{\mathscr{k}}$ ですので注意しましょう。なお，$\langle\boldsymbol{r}\,\sigma|\,\hat{\boldsymbol{k}}=\boldsymbol{\mathscr{k}}\,\langle\boldsymbol{r}\,\sigma|$ の (2.3.22) との類似から $\boldsymbol{\mathscr{k}}$ を基底 $\{\,|\boldsymbol{r}\,\sigma\rangle\}$ による $\hat{\boldsymbol{k}}$ の表現ということもあります。

[51] 定義 (5.3.14) からわかるように，$\hat{P}$ は V_{spin} の演算子としては恒等演算子 $\sum_\sigma\,|\sigma\rangle\langle\sigma|$ です。スピン角運動量などは反転によって符号が変わらないベクトルだからです。このようなベクトルを**軸性ベクトル**といいます。これに対して，位置ベクトルや波数ベクトルは反転によって符号が変わります。このようなベクトルを**極性ベクトル**といいます。

[52] $\sum_\sigma\int d^3r\;|\boldsymbol{r}\,\sigma\rangle\langle\boldsymbol{r}\,\sigma|=\hat{I}$ なので，(5.3.14) と (5.3.15) は同じです。

と表せるから，

$$\langle \boldsymbol{r}\,\sigma|\hat{P}|f\rangle = f(-\boldsymbol{r},\sigma) \tag{5.3.17}$$

である。(5.3.17) は $\hat{P}$ が関数 $|f\rangle$ を原点 $\boldsymbol{r}=\boldsymbol{0}$ を対称の中心として反転させる演算子であることを意味する。$\hat{P}^2=\hat{I}$ であるから，$\hat{P}$ の固有値は $+1$ および -1 である。固有値 $+1$ に対応する固有空間は $f(-\boldsymbol{r},\sigma)=f(\boldsymbol{r},\sigma)$，つまり，偶関数全体のなす部分空間であり，一方，固有値 -1 に対応する固有空間は $f(-\boldsymbol{r},\sigma)=-f(\boldsymbol{r},\sigma)$，つまり，奇関数全体のなす部分空間である。なお，$\mathscr{P}$ を $\mathscr{P}f(\boldsymbol{r},\sigma)=f(-\boldsymbol{r},\sigma)$，つまり，

$$\mathscr{P}\,\langle \boldsymbol{r}\,\sigma| = \langle -\boldsymbol{r}\,\sigma| \tag{5.3.18}$$

によって定義すると，

$$\langle \boldsymbol{r}\,\sigma|\,\hat{P} = \mathscr{P}\,\langle \boldsymbol{r}\,\sigma| \tag{5.3.19}$$

と表せる。

鏡映演算子 $\hat{M}_{\boldsymbol{n}}$ を

$$\hat{M}_{\boldsymbol{n}} = \sum_{\sigma}\int d^3r\ |M_{\boldsymbol{n}}\boldsymbol{r}\,\sigma\rangle\langle \boldsymbol{r}\,\sigma| \tag{5.3.20}$$

によって定義する。つまり，

$$\hat{M}_{\boldsymbol{n}}\,|\boldsymbol{r}\,\sigma\rangle = |M_{\boldsymbol{n}}\boldsymbol{r}\,\sigma\rangle \tag{5.3.21}$$

と定める[53]。ただし，鏡映面は原点 $\boldsymbol{r}=\boldsymbol{0}$ を通る平面であるとする。$\boldsymbol{n}$ は鏡映面の単位法線ベクトル

$$\boldsymbol{n} = n_x\,\boldsymbol{e}_x + n_y\,\boldsymbol{e}_y + n_z\,\boldsymbol{e}_z \tag{5.3.22}$$

であり[54]，(5.3.20)，(5.3.21) の右辺の $M_{\boldsymbol{n}}$ は位置ベクトル $\boldsymbol{r}$ に対する鏡映操作

$$M_{\boldsymbol{n}}\boldsymbol{r} = \boldsymbol{r} - 2\boldsymbol{n}\boldsymbol{n}^\dagger\boldsymbol{r} \tag{5.3.23}$$

である[55]。$\hat{M}_{\boldsymbol{n}}$ はスピン自由度に対して恒等演算子として作用する。$M_{\boldsymbol{n}}^{-1}=M_{\boldsymbol{n}}$ および (5.3.22) より，$\hat{M}_{\boldsymbol{n}}^\dagger=\hat{M}_{\boldsymbol{n}}$，$\hat{M}_{\boldsymbol{n}}^\dagger=\hat{M}_{\boldsymbol{n}}^{-1}$，つまり，$\hat{M}_{\boldsymbol{n}}$ はエルミート演算子

[53] $\sum_\sigma\int d^3r\ |\boldsymbol{r}\,\sigma\rangle\langle\boldsymbol{r}\,\sigma| = \hat{I}$ なので，(5.3.20) と (5.3.21) は同じです。

[54] $\boldsymbol{n}$ が天頂角 θ，方位角 ϕ の方向を向くならば，$\boldsymbol{n}=\sin\theta\cos\phi\,\boldsymbol{e}_x+\sin\theta\sin\phi\,\boldsymbol{e}_y+\cos\theta\,\boldsymbol{e}_z$ です。

[55] $\boldsymbol{n}\boldsymbol{n}^\dagger$ は $\boldsymbol{n}$ の方向への正射影です。$\boldsymbol{n}^\dagger\boldsymbol{r}=\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{r}$ なので，$\boldsymbol{n}\boldsymbol{n}^\dagger\boldsymbol{r}$ を $(\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{r})\boldsymbol{n}$ と書いた方がなじみがあるかもしれません。なお，$\boldsymbol{n}\boldsymbol{n}^\dagger=(-\boldsymbol{n})(-\boldsymbol{n})^\dagger$ なので，$M_{\boldsymbol{n}}$ と $M_{-\boldsymbol{n}}$ は同じ鏡映操作を表します。

であると同時にユニタリ演算子であることがわかる。また，

$$\hat{M}_{\boldsymbol{n}}\,|f\rangle = \sum_{\sigma}\int d^3r\, f(M_{\boldsymbol{n}}^{-1}\boldsymbol{r},\sigma)\,|\boldsymbol{r}\,\sigma\rangle \tag{5.3.24}$$

と表せるから，

$$\langle\boldsymbol{r}\,\sigma|\hat{M}_{\boldsymbol{n}}|f\rangle = f(M_{\boldsymbol{n}}^{-1}\boldsymbol{r},\sigma) \tag{5.3.25}$$

である。(5.3.25) は $\hat{M}_{\boldsymbol{n}}$ が関数 $|f\rangle$ を $\boldsymbol{n}$ を単位法線ベクトルとする原点を通る平面に関して鏡映を行う演算子であることを意味する。$\hat{M}_{\boldsymbol{n}}^2 = \hat{I}$ であるから，$\hat{M}_{\boldsymbol{n}}$ の固有値は $+1$ および -1 である。固有値 $+1$ に対応する固有空間は $f(M_{\boldsymbol{n}}^{-1}\boldsymbol{r},\sigma) = f(\boldsymbol{r},\sigma)$，つまり，鏡映面に関して対称な関数全体のなす部分空間であり，一方，固有値 -1 に対応する固有空間は $f(M_{\boldsymbol{n}}^{-1}\boldsymbol{r},\sigma) = -f(\boldsymbol{r},\sigma)$，つまり，鏡映面に関して反対称な関数全体のなす部分空間である。なお，$\mathscr{M}_{\boldsymbol{n}}$ を $\mathscr{M}_{\boldsymbol{n}}f(\boldsymbol{r},\sigma) = f(M_{\boldsymbol{n}}^{-1}\boldsymbol{r},\sigma)$，つまり，

$$\mathscr{M}_{\boldsymbol{n}}\,\langle\boldsymbol{r}\,\sigma| = \langle M_{\boldsymbol{n}}^{-1}\boldsymbol{r}\,\sigma| \tag{5.3.26}$$

によって定義すると，

$$\langle\boldsymbol{r}\,\sigma|\,\hat{M}_{\boldsymbol{n}} = \mathscr{M}_{\boldsymbol{n}}\,\langle\boldsymbol{r}\,\sigma| \tag{5.3.27}$$

と表せる。

並進演算子 $\hat{T}_{\boldsymbol{c}}$ を

$$\hat{T}_{\boldsymbol{c}} = e^{-i\boldsymbol{c}\cdot\hat{\boldsymbol{k}}} \tag{5.3.28}$$

によって定義する。ここで，$\boldsymbol{c} = c_x\,\boldsymbol{e}_x + c_y\,\boldsymbol{e}_y + c_z\,\boldsymbol{e}_z$ である。$\hat{T}_{\boldsymbol{c}}$ はスピン自由度に対して恒等演算子として作用する。$\hat{\boldsymbol{k}}$ はエルミート演算子であるから，$\hat{T}_{\boldsymbol{c}}$ はユニタリ演算子である。また，$\hat{T}_{\boldsymbol{c}}$ の固有ベクトルは $\hat{\boldsymbol{k}}$ のものと同じ $|\boldsymbol{k}\,\sigma\rangle$ であり，固有値は $\boldsymbol{k}$ である。つまり，

$$\hat{T}_{\boldsymbol{c}}\,|\boldsymbol{k}\,\sigma\rangle = e^{-i\boldsymbol{c}\cdot\boldsymbol{k}}\,|\boldsymbol{k}\,\sigma\rangle \tag{5.3.29}$$

である。$\hat{T}_{\boldsymbol{c}}$ は

$$\hat{T}_{\boldsymbol{c}} = \sum_{\sigma}\int d^3r\;|\boldsymbol{r}+\boldsymbol{c}\,\sigma\rangle\langle\boldsymbol{r}\,\sigma| \tag{5.3.30}$$

と表すこともできる。したがって，

$$\hat{T}_{\boldsymbol{c}}\,|\boldsymbol{r}\,\sigma\rangle = |\boldsymbol{r}+\boldsymbol{c}\,\sigma\rangle \tag{5.3.31}$$

である[56]。関数 $f(\boldsymbol{r},\sigma)=\langle \boldsymbol{r}\,\sigma|f\rangle$ に $\hat{T}_{\boldsymbol{c}}$ を作用させると，

$$\langle \boldsymbol{r}\,\sigma|\hat{T}_{\boldsymbol{c}}|f\rangle = f(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{c},\sigma) \tag{5.3.32}$$

となる。(5.3.32) は $\hat{T}_{\boldsymbol{c}}$ が関数 $|f\rangle$ を $\boldsymbol{c}$ だけ平行移動する演算子であることを意味する。なお，$\mathscr{T}_{\boldsymbol{c}}$ を $\mathscr{T}_{\boldsymbol{c}}f(\boldsymbol{r},\sigma)=f(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{c},\sigma)$，つまり，

$$\mathscr{T}_{\boldsymbol{c}}\,\langle \boldsymbol{r}\,\sigma| = \langle \boldsymbol{r}-\boldsymbol{c}\,\sigma| \tag{5.3.33}$$

によって定義すると，

$$\langle \boldsymbol{r}\,\sigma|\,\hat{T}_{\boldsymbol{c}} = \mathscr{T}_{\boldsymbol{c}}\,\langle \boldsymbol{r}\,\sigma| \tag{5.3.34}$$

と表せる。$\hbar\!\!\!/ = -i\boldsymbol{\nabla}$ を用いると

$$\mathscr{T}_{\boldsymbol{c}} = e^{-i\boldsymbol{c}\cdot\hbar\!\!\!/} \tag{5.3.35}$$

と書ける。$\mathscr{T}_{\boldsymbol{c}}$ は $\hat{T}_{\boldsymbol{c}}$ の座標表示である。

5.3.3 軌道角運動量演算子とスピン角運動量演算子

軌道角運動量演算子 $\hat{\boldsymbol{l}}=\hat{l}_x\,\boldsymbol{e}_x+\hat{l}_y\,\boldsymbol{e}_y+\hat{l}_z\,\boldsymbol{e}_z$ を

$$\hat{\boldsymbol{l}}=\hat{\boldsymbol{r}}\times\hat{\boldsymbol{k}} \qquad \hat{l}_x=\hat{y}\hat{k}_z-\hat{z}\hat{k}_y \qquad \hat{l}_y=\hat{z}\hat{k}_x-\hat{x}\hat{k}_z \qquad \hat{l}_z=\hat{x}\hat{k}_y-\hat{y}\hat{k}_x \tag{5.3.36}$$

によって定義する[57]。これらは

$$\hat{\boldsymbol{l}} = \sum_\sigma \int d^3r\ |\boldsymbol{r}\,\sigma\rangle\,(-i\boldsymbol{r}\times\boldsymbol{\nabla})\,\langle \boldsymbol{r}\,\sigma| \qquad \begin{cases} \hat{l}_x = \displaystyle\sum_\sigma \int d^3r\ |\boldsymbol{r}\,\sigma\rangle\,[-i(y\partial_z - z\partial_y)]\,\langle \boldsymbol{r}\,\sigma| \\ \hat{l}_y = \displaystyle\sum_\sigma \int d^3r\ |\boldsymbol{r}\,\sigma\rangle\,[-i(z\partial_x - x\partial_z)]\,\langle \boldsymbol{r}\,\sigma| \\ \hat{l}_z = \displaystyle\sum_\sigma \int d^3r\ |\boldsymbol{r}\,\sigma\rangle\,[-i(x\partial_y - y\partial_x)]\,\langle \boldsymbol{r}\,\sigma| \end{cases} \tag{5.3.37}$$

[56] $\sum_\sigma \int d^3r\ |\boldsymbol{r}\,\sigma\rangle\langle \boldsymbol{r}\,\sigma| = \hat{I}$ なので，(5.3.30) と (5.3.31) は同じです。

[57] 補足・計算例 18 で軌道角運動量演算子やスピン角運動量演算子について述べましたが，軌道角運動量演算子については天下り的に (2.2.34) を与えました。(2.2.34) が (5.3.36) から導かれることを補足・計算例 37 の例 6 で示します。

と表せる。$\hat{\boldsymbol{l}}$ はスピン自由度に対して恒等演算子として作用するため，混乱の生じない限り，V_{spin} の恒等演算子 $\sum_\sigma |\sigma\rangle\langle\sigma|$ を省略した形

$$\hat{\boldsymbol{l}} = \int d^3r\, |\boldsymbol{r}\rangle\, (-i\boldsymbol{r}\times\boldsymbol{\nabla})\, \langle\boldsymbol{r}| \tag{5.3.38}$$

を用いてもよい。(5.3.36) から明らかなように, $\hat{\boldsymbol{l}}$ はエルミート演算子である。また,

$$\langle\boldsymbol{r}\,\sigma|\,\hat{\boldsymbol{l}} = \boldsymbol{\ell}\,\langle\boldsymbol{r}\,\sigma| \qquad \begin{cases} \langle\boldsymbol{r}\,\sigma|\,\hat{l}_x = \ell_x\,\langle\boldsymbol{r}\,\sigma| \\ \langle\boldsymbol{r}\,\sigma|\,\hat{l}_y = \ell_y\,\langle\boldsymbol{r}\,\sigma| \\ \langle\boldsymbol{r}\,\sigma|\,\hat{l}_z = \ell_z\,\langle\boldsymbol{r}\,\sigma| \end{cases} \tag{5.3.39}$$

と書ける。ここで，$\boldsymbol{\ell} = \ell_x\,\boldsymbol{e}_x + \ell_y\,\boldsymbol{e}_y + \ell_z\,\boldsymbol{e}_z$ として,

$$\boldsymbol{\ell} = -i\boldsymbol{r}\times\boldsymbol{\nabla} \qquad \begin{cases} \ell_x = -i(y\partial_z - z\partial_y) \\ \ell_y = -i(z\partial_x - x\partial_z) \\ \ell_z = -i(x\partial_y - y\partial_x) \end{cases} \tag{5.3.40}$$

である[58]。$\boldsymbol{\ell}$ は $\hat{\boldsymbol{l}}$ の座標表示である[59]。

スピン角運動量演算子 $\hat{\boldsymbol{s}} = \hat{s}_x\,\boldsymbol{e}_x + \hat{s}_y\,\boldsymbol{e}_y + \hat{s}_z\,\boldsymbol{e}_z$ を

$$\hat{\boldsymbol{s}} = \frac{1}{2}\int d^3r\,[\,|\boldsymbol{r}\ \uparrow\rangle\ \ |\boldsymbol{r}\ \downarrow\rangle\,]\boldsymbol{\sigma}\begin{bmatrix}\langle\boldsymbol{r}\ \uparrow| \\ \langle\boldsymbol{r}\ \downarrow|\end{bmatrix} \qquad \begin{cases} \hat{s}_x = \dfrac{1}{2}\displaystyle\int d^3r\,[\,|\boldsymbol{r}\ \uparrow\rangle\ \ |\boldsymbol{r}\ \downarrow\rangle\,]\sigma_x\begin{bmatrix}\langle\boldsymbol{r}\ \uparrow| \\ \langle\boldsymbol{r}\ \downarrow|\end{bmatrix} \\ \hat{s}_y = \dfrac{1}{2}\displaystyle\int d^3r\,[\,|\boldsymbol{r}\ \uparrow\rangle\ \ |\boldsymbol{r}\ \downarrow\rangle\,]\sigma_y\begin{bmatrix}\langle\boldsymbol{r}\ \uparrow| \\ \langle\boldsymbol{r}\ \downarrow|\end{bmatrix} \\ \hat{s}_z = \dfrac{1}{2}\displaystyle\int d^3r\,[\,|\boldsymbol{r}\ \uparrow\rangle\ \ |\boldsymbol{r}\ \downarrow\rangle\,]\sigma_z\begin{bmatrix}\langle\boldsymbol{r}\ \uparrow| \\ \langle\boldsymbol{r}\ \downarrow|\end{bmatrix} \end{cases} \tag{5.3.41}$$

によって定義する。ここで，$\boldsymbol{\sigma} = \sigma_x\,\boldsymbol{e}_x + \sigma_y\,\boldsymbol{e}_y + \sigma_z\,\boldsymbol{e}_z$ は**パウリ行列**であり，σ_x，σ_y，σ_z は

$$\sigma_x = \begin{bmatrix}0 & 1 \\ 1 & 0\end{bmatrix} \qquad \sigma_y = \begin{bmatrix}0 & -i \\ i & 0\end{bmatrix} \qquad \sigma_z = \begin{bmatrix}1 & 0 \\ 0 & -1\end{bmatrix} \tag{5.3.42}$$

[58] $\sum_\sigma \int d^3r\, |\boldsymbol{r}\,\sigma\rangle\langle\boldsymbol{r}\,\sigma| = \hat{I}$ なので，(5.3.37) と (5.3.39) は同じです。

[59] 補足・計算例 19 の例 8 以降，軌道角運動量演算子を ℓ_x，ℓ_y，ℓ_z のように表して使ってきましたが，その $\hat{\boldsymbol{l}}$ との関係は (5.3.39) によって与えられます。厳密にいうと $\hat{\boldsymbol{l}} \neq \boldsymbol{\ell}$ ですので注意しましょう。なお，$\langle\boldsymbol{r}\,\sigma|\,\hat{\boldsymbol{l}} = \boldsymbol{\ell}\,\langle\boldsymbol{r}\,\sigma|$ の (2.3.22) との類似から $\boldsymbol{\ell}$ を基底 $\{\,|\boldsymbol{r}\,\sigma\rangle\}$ による $\hat{\boldsymbol{l}}$ の表現ということもあります。波数演算子の場合と同様に，$\boldsymbol{\ell}$ を $\hat{\boldsymbol{l}}$ の座標表示といいます。

によって定義される。(5.3.42) の導出は第 6 章の §6.3.2 で述べる。$\hat{\boldsymbol{s}}$ は位置 $\boldsymbol{r}$ の自由度に対して恒等演算子として作用するため，混乱の生じない限り，$V_x \otimes V_y \otimes V_z$ の恒等演算子 $\int d^3r\ |\boldsymbol{r}\rangle\langle\boldsymbol{r}|$ を省略した形

$$\hat{\boldsymbol{s}} = \frac{1}{2}[\ |\uparrow\rangle\ \ |\downarrow\rangle\ ]\boldsymbol{\sigma}\begin{bmatrix}\langle\uparrow| \\ \langle\downarrow|\end{bmatrix} \tag{5.3.43}$$

を用いてもよい。(5.3.41) から明らかなように，$\hat{\boldsymbol{s}}$ はエルミート演算子である。また，$\boldsymbol{\mathscr{s}} = \mathscr{s}_x\,\boldsymbol{e}_x + \mathscr{s}_y\,\boldsymbol{e}_y + \mathscr{s}_z\,\boldsymbol{e}_z$ を $\boldsymbol{\mathscr{s}} = \frac{1}{2}\boldsymbol{\sigma}$ によって定義すると，

$$\begin{bmatrix}\langle\boldsymbol{r}\ \uparrow| \\ \langle\boldsymbol{r}\ \downarrow|\end{bmatrix}\hat{\boldsymbol{s}} = \boldsymbol{\mathscr{s}}\begin{bmatrix}\langle\boldsymbol{r}\ \uparrow| \\ \langle\boldsymbol{r}\ \downarrow|\end{bmatrix} \qquad \begin{cases}\begin{bmatrix}\langle\boldsymbol{r}\ \uparrow| \\ \langle\boldsymbol{r}\ \downarrow|\end{bmatrix}\hat{s}_x = \mathscr{s}_x\begin{bmatrix}\langle\boldsymbol{r}\ \uparrow| \\ \langle\boldsymbol{r}\ \downarrow|\end{bmatrix} \\ \begin{bmatrix}\langle\boldsymbol{r}\ \uparrow| \\ \langle\boldsymbol{r}\ \downarrow|\end{bmatrix}\hat{s}_y = \mathscr{s}_y\begin{bmatrix}\langle\boldsymbol{r}\ \uparrow| \\ \langle\boldsymbol{r}\ \downarrow|\end{bmatrix} \\ \begin{bmatrix}\langle\boldsymbol{r}\ \uparrow| \\ \langle\boldsymbol{r}\ \downarrow|\end{bmatrix}\hat{s}_z = \mathscr{s}_z\begin{bmatrix}\langle\boldsymbol{r}\ \uparrow| \\ \langle\boldsymbol{r}\ \downarrow|\end{bmatrix}\end{cases} \tag{5.3.44}$$

と書ける[60]。なお，パウリ行列について，

$$\sigma_x^2 = \sigma_y^2 = \sigma_z^2 = I_2 \quad \sigma_x\sigma_y = -\sigma_y\sigma_x = i\sigma_z \quad \sigma_y\sigma_z = -\sigma_z\sigma_y = i\sigma_x \quad \sigma_z\sigma_x = -\sigma_x\sigma_z = i\sigma_y \tag{5.3.45}$$

および

$$(\boldsymbol{a}\cdot\boldsymbol{\sigma})(\boldsymbol{b}\cdot\boldsymbol{\sigma}) = (\boldsymbol{a}\cdot\boldsymbol{b})I_2 + i(\boldsymbol{a}\times\boldsymbol{b})\cdot\boldsymbol{\sigma} \tag{5.3.46}$$

が成り立つ。ここで，I_2 は 2 次の単位行列であり，また，$\boldsymbol{a} = a_x\,\boldsymbol{e}_x + a_y\,\boldsymbol{e}_y + a_z\,\boldsymbol{e}_z$，$\boldsymbol{b} = b_x\,\boldsymbol{e}_x + b_y\,\boldsymbol{e}_y + b_z\,\boldsymbol{e}_z$ である。

(5.3.36) で定義した $\hat{\boldsymbol{l}} = \hat{l}_x\,\boldsymbol{e}_x + \hat{l}_y\,\boldsymbol{e}_y + \hat{l}_z\,\boldsymbol{e}_z$ や (5.3.41) で定義した $\hat{\boldsymbol{s}} = \hat{s}_x\,\boldsymbol{e}_x + \hat{s}_y\,\boldsymbol{e}_y + \hat{s}_z\,\boldsymbol{e}_z$ を $\hat{\boldsymbol{J}} = \hat{J}_x\,\boldsymbol{e}_x + \hat{J}_y\,\boldsymbol{e}_y + \hat{J}_z\,\boldsymbol{e}_z$ と表すことにすると，$\hat{J}_x$，$\hat{J}_y$，$\hat{J}_z$ について

$$[\,\hat{J}_x, \hat{J}_y\,] = i\hat{J}_z \qquad [\,\hat{J}_y, \hat{J}_z\,] = i\hat{J}_x \qquad [\,\hat{J}_z, \hat{J}_x\,] = i\hat{J}_y \tag{5.3.47}$$

が成り立つ。また，$\hat{\boldsymbol{J}}$ の 2 乗を

$$\hat{\boldsymbol{J}}^2 = \hat{J}_x^2 + \hat{J}_y^2 + \hat{J}_z^2 \tag{5.3.48}$$

[60]補足・計算例 19 の例 9 以降，スピン角運動量演算子を $\mathscr{s}_x$，$\mathscr{s}_y$，$\mathscr{s}_z$ のように表して使ってきましたが，その $\hat{\boldsymbol{s}}$ との関係は (5.3.44) によって与えられます。(5.3.44) は，$\boldsymbol{\mathscr{s}}$ が基底 $\{\,|\uparrow\rangle\,, |\downarrow\rangle\}$ による $\hat{\boldsymbol{s}}$ の行列表現であることを意味しており，もちろん $\hat{\boldsymbol{s}} \neq \boldsymbol{\mathscr{s}}$ です。

によって定義すると，

$$[\,\hat{\boldsymbol{J}}^2, \hat{J}_x\,] = 0 \qquad [\,\hat{\boldsymbol{J}}^2, \hat{J}_y\,] = 0 \qquad [\,\hat{\boldsymbol{J}}^2, \hat{J}_z\,] = 0 \tag{5.3.49}$$

が成り立つ。

[(5.3.47) の証明] まず $\hat{\boldsymbol{J}} = \hat{\boldsymbol{l}}$ として $[\,\hat{l}_x, \hat{l}_y\,] = i\hat{l}_z$ を示す。(5.3.12) を用いると，

$$\begin{aligned}[\,\hat{l}_x, \hat{l}_y\,] &= [\,\hat{y}\hat{k}_z - \hat{z}\hat{k}_y, \hat{z}\hat{k}_x - \hat{x}\hat{k}_z\,] = [\,\hat{y}\hat{k}_z, \hat{z}\hat{k}_x\,] + [\,\hat{z}\hat{k}_y, \hat{x}\hat{k}_z\,] \\ &= [\,\hat{k}_z, \hat{z}\,]\hat{y}\hat{k}_x + [\,\hat{z}, \hat{k}_z\,]\hat{x}\hat{k}_y = i(\hat{x}\hat{k}_y - \hat{y}\hat{k}_x) = i\hat{l}_z\end{aligned} \tag{5.3.50}$$

を得る。$[\,\hat{l}_y, \hat{l}_z\,] = i\hat{l}_x$，$[\,\hat{l}_z, \hat{l}_x\,] = i\hat{l}_y$ についても同様に示せる。次に $\hat{\boldsymbol{J}} = \hat{\boldsymbol{s}}$ として $[\,\hat{s}_x, \hat{s}_y\,] = i\hat{s}_z$ を示す。パウリ行列の性質 (5.3.45) より，

$$[\,\sigma_x, \sigma_y\,] = \sigma_x\sigma_y - \sigma_y\sigma_x = 2\sigma_x\sigma_y = 2i\sigma_z \tag{5.3.51}$$

であるから，$[\,\hat{s}_x, \hat{s}_y\,] = i\hat{s}_z$ が成り立つことがわかる。$[\,\hat{s}_y, \hat{s}_z\,] = i\hat{s}_x$，$[\,\hat{s}_z, \hat{s}_x\,] = i\hat{s}_y$ についても同様に示せる。 ■

[(5.3.49) の証明] $[\,\hat{\boldsymbol{J}}^2, \hat{J}_x\,] = \hat{0}$ を示す。(5.3.47) を用いて左辺を計算すると，

$$\begin{aligned}[\,\hat{\boldsymbol{J}}^2, \hat{J}_x\,] &= [\,\hat{J}_x^2 + \hat{J}_y^2 + \hat{J}_z^2, \hat{J}_x\,] = [\,\hat{J}_x^2, \hat{J}_x\,] + [\,\hat{J}_y^2, \hat{J}_x\,] + [\,\hat{J}_z^2, \hat{J}_x\,] \\ &= \hat{J}_y[\,\hat{J}_y, \hat{J}_x\,] + [\,\hat{J}_y, \hat{J}_x\,]\hat{J}_y + \hat{J}_z[\,\hat{J}_z, \hat{J}_x\,] + [\,\hat{J}_z, \hat{J}_x\,]\hat{J}_z \\ &= \hat{J}_y(-i\hat{J}_z) + (-i\hat{J}_z)\hat{J}_y + \hat{J}_z(i\hat{J}_y) + (i\hat{J}_y)\hat{J}_z = \hat{0}\end{aligned} \tag{5.3.52}$$

を得る。$[\,\hat{\boldsymbol{J}}^2, \hat{J}_y\,] = \hat{0}$，$[\,\hat{\boldsymbol{J}}^2, \hat{J}_z\,] = \hat{0}$ についても同様に示せる。 ■

5.3.4 回転演算子

3 次元空間においてある方向を向く単位ベクトル $\boldsymbol{n}$ を

$$\boldsymbol{n} = n_x\,\boldsymbol{e}_x + n_y\,\boldsymbol{e}_y + n_z\,\boldsymbol{e}_z \tag{5.3.53}$$

として[61]，$\boldsymbol{n}$ で定まる回転軸のまわりに関数 $|f\rangle$ を ψ だけ回転する**回転演算子**を角運動量演算子 $\hat{\boldsymbol{J}} = \hat{J}_x\,\boldsymbol{e}_x + \hat{J}_y\,\boldsymbol{e}_y + \hat{J}_z\,\boldsymbol{e}_z$ を用いて

$$\hat{R}_{\boldsymbol{n}}(\psi) = e^{-i\psi\boldsymbol{n}\cdot\hat{\boldsymbol{J}}} \tag{5.3.54}$$

によって定義する。$\hat{\boldsymbol{J}}$ はエルミート演算子であるから，$\hat{R}_{\boldsymbol{n}}(\psi)$ はユニタリ演算子である。§5.3.53 ですでに述べたように，$\hat{\boldsymbol{J}}$ の代表的な例として軌道角運動量演算

[61] $\boldsymbol{n}$ が天頂角 θ，方位角 ϕ の方向を向くならば，$\boldsymbol{n} = \sin\theta\cos\phi\,\boldsymbol{e}_x + \sin\theta\sin\phi\,\boldsymbol{e}_y + \cos\theta\,\boldsymbol{e}_z$ です。

子 $\hat{\boldsymbol{l}}$ やスピン角運動量演算子 $\hat{\boldsymbol{s}}$ がある。特に断らないかぎり，回転演算子を作用させる対象が位置 $\boldsymbol{r}$ の自由度のみに関係している場合は $\hat{\boldsymbol{J}} = \hat{\boldsymbol{l}}$，スピン自由度のみに関係している場合は $\hat{\boldsymbol{J}} = \hat{\boldsymbol{s}}$，位置 $\boldsymbol{r}$ の自由度とスピン自由度の両方に関係している場合は $\hat{\boldsymbol{J}} = \hat{\boldsymbol{l}} + \hat{\boldsymbol{s}}$ と考えることにする[62]。

まず，$\hat{\boldsymbol{J}} = \hat{\boldsymbol{l}}$ として 3 次元空間における回転演算子 $\hat{R}_{\boldsymbol{n}}(\psi) = e^{-i\psi\boldsymbol{n}\cdot\hat{\boldsymbol{l}}}$ を考える。$\hat{R}_{\boldsymbol{n}}(\psi)$ はスピン自由度に対して恒等演算子として作用する。$\mathscr{R}_{\boldsymbol{n}}(\psi) = e^{-i\psi\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{\ell}}$ とおくと，

$$\langle \boldsymbol{r}\,\sigma|\,\hat{R}_{\boldsymbol{n}}(\psi) = \mathscr{R}_{\boldsymbol{n}}(\psi)\,\langle \boldsymbol{r}\,\sigma| \tag{5.3.55}$$

である。$\mathscr{R}_{\boldsymbol{n}}(\psi)$ は $\hat{R}_{\boldsymbol{n}}(\psi)$ の座標表示である。位置ベクトル $\boldsymbol{r} = x\,\boldsymbol{e}_x + y\,\boldsymbol{e}_y + z\,\boldsymbol{e}_z$ に対する回転操作を $R_{\boldsymbol{n}}(\psi)$，基底 $e = \{\boldsymbol{e}_x, \boldsymbol{e}_y, \boldsymbol{e}_z\}$ による $R_{\boldsymbol{n}}(\psi)$ の行列表現を $R^e_{\boldsymbol{n}}(\psi)$ として，**ロドリゲスの回転公式**

$$R_{\boldsymbol{n}}(\psi)\boldsymbol{r} = \underbrace{\boldsymbol{r} + \sin\psi\,(\boldsymbol{n}\times\boldsymbol{r}) + (1-\cos\psi)(\boldsymbol{n}\boldsymbol{n}^\dagger\boldsymbol{r} - \boldsymbol{r})}_{\boldsymbol{n}\boldsymbol{n}^\dagger\boldsymbol{r} + \cos\psi\,(\boldsymbol{r} - \boldsymbol{n}\boldsymbol{n}^\dagger\boldsymbol{r}) + \sin\psi\,(\boldsymbol{n}\times\boldsymbol{r})} = [\,\boldsymbol{e}_x\,\boldsymbol{e}_y\,\boldsymbol{e}_z\,]R^e_{\boldsymbol{n}}(\psi)\begin{bmatrix} x \\ y \\ z \end{bmatrix}$$

$$R^e_{\boldsymbol{n}}(\psi) = \begin{bmatrix} (1-\cos\psi)n_x^2 + \cos\psi & (1-\cos\psi)n_xn_y - \sin\psi\,n_z & (1-\cos\psi)n_xn_z + \sin\psi\,n_y \\ (1-\cos\psi)n_yn_x + \sin\psi\,n_z & (1-\cos\psi)n_y^2 + \cos\psi & (1-\cos\psi)n_yn_z - \sin\psi\,n_x \\ (1-\cos\psi)n_zn_x - \sin\psi\,n_y & (1-\cos\psi)n_zn_y + \sin\psi\,n_x & (1-\cos\psi)n_z^2 + \cos\psi \end{bmatrix} \tag{5.3.56}$$

を用いると[63]，

$$\hat{R}_{\boldsymbol{n}}(\psi) = \sum_\sigma \int d^3r\ |R_{\boldsymbol{n}}(\psi)\boldsymbol{r}\,\sigma\rangle\langle \boldsymbol{r}\,\sigma| \tag{5.3.57}$$

と表せる。つまり，

$$\hat{R}_{\boldsymbol{n}}(\psi)\,|\boldsymbol{r}\,\sigma\rangle = |R_{\boldsymbol{n}}(\psi)\boldsymbol{r}\,\sigma\rangle \tag{5.3.58}$$

である[64]。

[(5.3.57) の証明] (5.3.58) あるいはそのエルミート共役

$$\langle \boldsymbol{r}\,\sigma|\,\hat{R}_{\boldsymbol{n}}(\psi)^\dagger = \langle R_{\boldsymbol{n}}(\psi)\boldsymbol{r}\,\sigma| \tag{5.3.59}$$

[62] $\hat{\boldsymbol{l}} + \hat{\boldsymbol{s}}$ は $\hat{\boldsymbol{l}} \otimes \hat{I}_{V_{\rm spin}} + \hat{I}_{V_x\otimes V_y\otimes V_z} \otimes \hat{\boldsymbol{s}}$ のことです。

[63] ロドリゲスの回転公式は $R_{\boldsymbol{n}}(\psi)\boldsymbol{r} = \boldsymbol{n}\boldsymbol{n}^\dagger\boldsymbol{r} + \cos\psi\,(\boldsymbol{r} - \boldsymbol{n}\boldsymbol{n}^\dagger\boldsymbol{r}) + \sin\psi\,(\boldsymbol{n}\times\boldsymbol{r})$ と書いた方がわかりやすいと思います。$\boldsymbol{n}\boldsymbol{n}^\dagger$ は $\boldsymbol{n}$ の方向への正射影です。$\boldsymbol{n}^\dagger\boldsymbol{r} = \boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{r}$ なので，$\boldsymbol{n}\boldsymbol{n}^\dagger\boldsymbol{r}$ を $(\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{r})\boldsymbol{n}$ と書いた方がなじみがあるかもしれません。$\boldsymbol{r} - \boldsymbol{n}\boldsymbol{n}^\dagger\boldsymbol{r}$ は $\boldsymbol{r}$ の $\boldsymbol{n}$ に垂直な成分ですので，$\sin\psi$ の後ろの $\boldsymbol{n}\times\boldsymbol{r}$ を $\boldsymbol{n}\times(\boldsymbol{r} - \boldsymbol{n}\boldsymbol{n}^\dagger\boldsymbol{r})$ と考えるとロドリゲスの回転公式の幾何学的イメージをつかみやすいと思います。

[64] $\sum_\sigma \int d^3r\ |\boldsymbol{r}\,\sigma\rangle\langle \boldsymbol{r}\,\sigma| = \hat{I}$ なので，(5.3.57) と (5.3.58) は同じです。

を示せばよい。$\boldsymbol{n}=\boldsymbol{e}_z$ ととると，$\boldsymbol{n}\cdot\hat{\boldsymbol{l}}=\hat{l}_z$ である。補章 B.2 の (B.2.2) より，

$$\langle \boldsymbol{r}\,\sigma|\,\hat{l}_z=\ell_z\,\langle \boldsymbol{r}\,\sigma|=-i\partial_\phi\,\langle \boldsymbol{r}\,\sigma| \tag{5.3.60}$$

であるから，

$$\langle \boldsymbol{r}\,\sigma|\,\hat{R}_{\boldsymbol{e}_z}(\psi)^\dagger=\langle \boldsymbol{r}\,\sigma|\,\hat{R}_{\boldsymbol{e}_z}(-\psi)=e^{i\psi\ell_z}\,\langle \boldsymbol{r}\,\sigma|=e^{\psi\partial_\phi}\,\langle \boldsymbol{r}\,\sigma| \tag{5.3.61}$$

である。$\langle \boldsymbol{r}\,\sigma|=\langle r,\theta,\phi,\sigma|$ と書くと $e^{\psi\partial_\phi}\,\langle r,\theta,\phi,\sigma|=\langle r,\theta,\phi+\psi,\sigma|=\langle R_{\boldsymbol{e}_z}(\psi)\boldsymbol{r}\,\sigma|$ であるから[65]，

$$\langle \boldsymbol{r}\,\sigma|\,\hat{R}_{\boldsymbol{e}_z}(\psi)^\dagger=\langle R_{\boldsymbol{e}_z}(\psi)\boldsymbol{r}\,\sigma| \tag{5.3.62}$$

つまり，

$$\hat{R}_{\boldsymbol{e}_z}(\psi)\,|\boldsymbol{r}\,\sigma\rangle=|R_{\boldsymbol{e}_z}(\psi)\boldsymbol{r}\,\sigma\rangle \tag{5.3.63}$$

を得る。以上より，(5.3.57) が示された。 ■

(5.3.57) より，

$$\hat{R}_{\boldsymbol{n}}(\psi)\,|f\rangle=\sum_\sigma\int d^3r\,f(R_{\boldsymbol{n}}(\psi)^{-1}\boldsymbol{r},\sigma)\,|\boldsymbol{r}\,\sigma\rangle \tag{5.3.64}$$

と書けるから，

$$\langle \boldsymbol{r}\,\sigma|\hat{R}_{\boldsymbol{n}}(\psi)|f\rangle=f(R_{\boldsymbol{n}}(\psi)^{-1}\boldsymbol{r},\sigma) \tag{5.3.65}$$

である。また，(5.3.55) より，(5.3.65) は

$$\mathscr{R}_{\boldsymbol{n}}(\psi)f(\boldsymbol{r},\sigma)=f(R_{\boldsymbol{n}}(\psi)^{-1}\boldsymbol{r},\sigma) \tag{5.3.66}$$

と表せる。あるいは，

$$\mathscr{R}_{\boldsymbol{n}}(\psi)\,\langle \boldsymbol{r}\,\sigma|=\langle R_{\boldsymbol{n}}(\psi)^{-1}\boldsymbol{r}\,\sigma| \tag{5.3.67}$$

である。

次に，$\hat{\boldsymbol{J}}=\hat{\boldsymbol{s}}$ としてスピン空間における回転演算子 $e^{-i\psi\boldsymbol{n}\cdot\hat{\boldsymbol{s}}}$ を考える。$e^{-i\psi\boldsymbol{n}\cdot\hat{\boldsymbol{s}}}$ は位置 $\boldsymbol{r}$ の自由度に対して恒等演算子として作用し，

$$\begin{bmatrix}\langle \boldsymbol{r}\ \uparrow|\\ \langle \boldsymbol{r}\ \downarrow|\end{bmatrix}e^{-i\psi\boldsymbol{n}\cdot\hat{\boldsymbol{s}}}=e^{-i\psi\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{s}}\begin{bmatrix}\langle \boldsymbol{r}\ \uparrow|\\ \langle \boldsymbol{r}\ \downarrow|\end{bmatrix} \tag{5.3.68}$$

[65] $e^{\psi\partial_\phi}\,\langle r,\theta,\phi,\sigma|=\sum_{n=0}^{\infty}\frac{\psi^n}{n!}\partial_\phi^n\,\langle r,\theta,\phi,\sigma|$ は $\langle r,\theta,\phi+\psi,\sigma|$ のテイラー展開です。

である。さらに,

$$e^{-i\psi \boldsymbol{n}\cdot\hat{\boldsymbol{s}}} = \cos\frac{\psi}{2}\,\hat{I} - 2i\sin\frac{\psi}{2}\,\boldsymbol{n}\cdot\hat{\boldsymbol{s}} \tag{5.3.69}$$

あるいは

$$e^{-i\psi \boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{\mathfrak{s}}} = \cos\frac{\psi}{2}\,I_2 - 2i\sin\frac{\psi}{2}\,\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{\mathfrak{s}} \tag{5.3.70}$$

が成り立つから，(5.3.68) は,

$$\begin{bmatrix} \langle \boldsymbol{r}\ \uparrow| \\ \langle \boldsymbol{r}\ \downarrow| \end{bmatrix} e^{-i\psi \boldsymbol{n}\cdot\hat{\boldsymbol{s}}} = \left(\cos\frac{\psi}{2}\,I_2 - 2i\sin\frac{\psi}{2}\,\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{\mathfrak{s}}\right)\begin{bmatrix} \langle \boldsymbol{r}\ \uparrow| \\ \langle \boldsymbol{r}\ \downarrow| \end{bmatrix} \tag{5.3.71}$$

と書ける。
[(5.3.69) の証明] (5.3.69) あるいは (5.3.70) をパウリ行列 (5.3.42) で表した

$$e^{-i\frac{\psi}{2}\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{\sigma}} = \cos\frac{\psi}{2}\,I_2 - i\sin\frac{\psi}{2}\,\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{\sigma} \tag{5.3.72}$$

が成り立つことを示せばよい。パウリ行列の性質 (5.3.46) において $\boldsymbol{a} = \boldsymbol{b} = \boldsymbol{n}$ とおくと,

$$(\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{\sigma})^2 = I_2 \tag{5.3.73}$$

であるから,

$$(\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{\sigma})^k = \begin{cases} I_2 & (k:\text{偶数}) \\ \boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{\sigma} & (k:\text{奇数}) \end{cases} \tag{5.3.74}$$

となる。したがって,

$$\begin{aligned} e^{-i\frac{\psi}{2}\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{\sigma}} &= \sum_{k=0}^{\infty}\frac{(-i\psi/2)^k}{k!}(\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{\sigma})^k \\ &= \left(1 - \frac{(\psi/2)^2}{2!} + \frac{(\psi/2)^4}{4!} - \cdots\right)I_2 - i\left(\psi/2 - \frac{(\psi/2)^3}{3!} + \frac{(\psi/2)^5}{5!} - \cdots\right)\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{\sigma} \\ &= \cos\frac{\psi}{2}\,I_2 - i\sin\frac{\psi}{2}\,\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{\sigma} \end{aligned} \tag{5.3.75}$$

を得る。 ■

5.3.5　スカラー演算子とベクトル演算子

演算子 $\hat{S}$ が

$$\hat{S} = \sum_{\sigma} \int d^3r \, [\, |\boldsymbol{r}\ \uparrow\rangle \ \ |\boldsymbol{r}\ \downarrow\rangle \,] S \begin{bmatrix} \langle \boldsymbol{r}\ \uparrow| \\ \langle \boldsymbol{r}\ \downarrow| \end{bmatrix} \tag{5.3.76}$$

と表されるとする。回転演算子 $\hat{R}_{\boldsymbol{n}}(\psi) = e^{-i\psi \boldsymbol{n}\cdot\hat{\boldsymbol{J}}}$ によって $\hat{S}$ を $\hat{R}_{\boldsymbol{n}}(\psi)^\dagger \hat{S} \hat{R}_{\boldsymbol{n}}(\psi)$ と変換しても $\hat{S}$ が不変のとき，つまり，

$$\hat{R}_{\boldsymbol{n}}(\psi)^\dagger \hat{S} \hat{R}_{\boldsymbol{n}}(\psi) = \hat{S} \tag{5.3.77}$$

が成り立つならば，$\hat{S}$ は**スカラー演算子**であるという。例えば，位置演算子 $\hat{\boldsymbol{r}}$，波数演算子 $\hat{\boldsymbol{k}}$，角運動量演算子 $\hat{\boldsymbol{J}}$ などについて，その 2 乗 $\hat{\boldsymbol{r}}^2$，$\hat{\boldsymbol{k}}^2$，$\hat{\boldsymbol{J}}^2$ はスカラー演算子である。$\hat{\boldsymbol{r}}^2$ に対して $S = r^2$ である。$\hat{\boldsymbol{k}}^2$ に対して $S = -\boldsymbol{\nabla}^2$ である。$\hat{\boldsymbol{J}} = \hat{\boldsymbol{l}}$ のとき $\hat{\boldsymbol{l}}^2$ に対して $S = (-i\boldsymbol{r} \times \boldsymbol{\nabla})^2$ であり，$\hat{\boldsymbol{J}} = \hat{\boldsymbol{s}}$ のとき $\hat{\boldsymbol{s}}^2$ に対して $S = \frac{3}{4} I_2$ である。また，$\hat{\boldsymbol{r}}$，$\hat{\boldsymbol{k}}$，$\hat{\boldsymbol{J}}$ などの内積によって表される演算子もスカラー演算子である[66]。例えば，$\hat{\boldsymbol{l}} \cdot \hat{\boldsymbol{s}}$ はスカラー演算子であり，$\hat{\boldsymbol{J}} = \hat{\boldsymbol{l}} + \hat{\boldsymbol{s}}$ のとき $\hat{\boldsymbol{l}} \cdot \hat{\boldsymbol{s}}$ に対して $S = \frac{1}{2}(-i\boldsymbol{r} \times \boldsymbol{\nabla}) \cdot \boldsymbol{\sigma}$ である[67]。

演算子 $\hat{\boldsymbol{V}} = \hat{V}_x \, \boldsymbol{e}_x + \hat{V}_y \, \boldsymbol{e}_y + \hat{V}_z \, \boldsymbol{e}_z$ が，$\boldsymbol{\mathscr{V}} = \mathscr{V}_x \, \boldsymbol{e}_x + \mathscr{V}_y \, \boldsymbol{e}_y + \mathscr{V}_z \, \boldsymbol{e}_z$ によって，

$$\hat{\boldsymbol{V}} = \int d^3r \, [\, |\boldsymbol{r}\ \uparrow\rangle \ \ |\boldsymbol{r}\ \downarrow\rangle \,] \boldsymbol{\mathscr{V}} \begin{bmatrix} \langle \boldsymbol{r}\ \uparrow| \\ \langle \boldsymbol{r}\ \downarrow| \end{bmatrix} \qquad \begin{cases} \hat{V}_x = \displaystyle\int d^3r \, [\, |\boldsymbol{r}\ \uparrow\rangle \ \ |\boldsymbol{r}\ \downarrow\rangle \,] \mathscr{V}_x \begin{bmatrix} \langle \boldsymbol{r}\ \uparrow| \\ \langle \boldsymbol{r}\ \downarrow| \end{bmatrix} \\ \hat{V}_y = \displaystyle\int d^3r \, [\, |\boldsymbol{r}\ \uparrow\rangle \ \ |\boldsymbol{r}\ \downarrow\rangle \,] \mathscr{V}_y \begin{bmatrix} \langle \boldsymbol{r}\ \uparrow| \\ \langle \boldsymbol{r}\ \downarrow| \end{bmatrix} \\ \hat{V}_z = \displaystyle\int d^3r \, [\, |\boldsymbol{r}\ \uparrow\rangle \ \ |\boldsymbol{r}\ \downarrow\rangle \,] \mathscr{V}_z \begin{bmatrix} \langle \boldsymbol{r}\ \uparrow| \\ \langle \boldsymbol{r}\ \downarrow| \end{bmatrix} \end{cases} \tag{5.3.78}$$

と表されるとする[68]。回転演算子 $\hat{R}_{\boldsymbol{n}}(\psi)$ によって $\hat{\boldsymbol{V}}$ を $\hat{R}_{\boldsymbol{n}}(\psi)^\dagger \hat{\boldsymbol{V}} \hat{R}_{\boldsymbol{n}}(\psi)$ と変換するとき，

$$\hat{R}_{\boldsymbol{n}}(\psi)^\dagger \hat{\boldsymbol{V}} \hat{R}_{\boldsymbol{n}}(\psi) = R_{\boldsymbol{n}}(\psi) \hat{\boldsymbol{V}} \tag{5.3.79}$$

---

[66] $\hat{\boldsymbol{r}}^2$，$\hat{\boldsymbol{k}}^2$，$\hat{\boldsymbol{J}}^2$ なども自分自身との内積を表す演算子とみることができます。

[67] $\hat{\boldsymbol{l}} \cdot \hat{\boldsymbol{s}}$ は量子力学で**スピン軌道相互作用**を扱う際に現れる演算子です。

[68] $\hat{\boldsymbol{V}}$ が $\hat{\boldsymbol{s}}$ などの場合，$\mathscr{V}_x$，$\mathscr{V}_y$，$\mathscr{V}_z$ は 2 行 2 列の行列になります。

が成り立つならば，$\hat{\boldsymbol{V}}$ は**ベクトル演算子**であるという。なお，(5.3.79) の右辺において，$R_{\boldsymbol{n}}(\psi)$ は $\hat{\boldsymbol{V}}$ に対して

$$R_{\boldsymbol{n}}(\psi)\hat{\boldsymbol{V}} = R_{\boldsymbol{n}}(\psi)[\,\boldsymbol{e}_x\,\boldsymbol{e}_y\,\boldsymbol{e}_z\,]\begin{bmatrix}\hat{V}_x\\ \hat{V}_y\\ \hat{V}_z\end{bmatrix} = [\,\boldsymbol{e}_x\,\boldsymbol{e}_y\,\boldsymbol{e}_z\,]R^e_{\boldsymbol{n}}(\psi)\begin{bmatrix}\hat{V}_x\\ \hat{V}_y\\ \hat{V}_z\end{bmatrix} \tag{5.3.80}$$

と作用する。ここで，$R^e_{\boldsymbol{n}}(\psi)$ は基底 $e = \{\boldsymbol{e}_x, \boldsymbol{e}_y, \boldsymbol{e}_z\}$ による $R_{\boldsymbol{n}}(\psi)$ の行列表現 (5.3.56) である。例えば，位置演算子 $\hat{\boldsymbol{r}}$，波数演算子 $\hat{\boldsymbol{k}}$，角運動量演算子 $\hat{\boldsymbol{J}}$ などはベクトル演算子である[69]。$\hat{\boldsymbol{r}}$ に対して $\boldsymbol{\mathscr{V}} = \boldsymbol{r}$ である。$\hat{\boldsymbol{k}}$ に対して $\boldsymbol{\mathscr{V}} = -i\boldsymbol{\nabla}$ である。$\hat{\boldsymbol{J}} = \hat{\boldsymbol{l}}$ に対して $\boldsymbol{\mathscr{V}} = -i\boldsymbol{r}\times\boldsymbol{\nabla}$ であり，$\hat{\boldsymbol{J}} = \hat{\boldsymbol{s}}$ に対して $\boldsymbol{\mathscr{V}} = \frac{1}{2}\boldsymbol{\sigma}$ である。

ベクトル演算子 $\hat{\boldsymbol{V}}$ に対して

$$\begin{aligned}&\hat{R}_{\boldsymbol{n}}(\psi)^\dagger\hat{\boldsymbol{V}}\hat{R}_{\boldsymbol{n}}(\psi) = R_{\boldsymbol{n}}(\psi)\hat{\boldsymbol{V}}\\ &\quad\Leftrightarrow\quad i[\,\boldsymbol{n}\cdot\hat{\boldsymbol{J}}, \hat{\boldsymbol{V}}\,] = \boldsymbol{n}\times\hat{\boldsymbol{V}}\quad \text{あるいは}\quad [\,\hat{J}_a, \hat{V}_b\,] = i\sum_c \varepsilon_{abc}\hat{V}_c\end{aligned} \tag{5.3.81}$$

が成り立つ[70]。ここで，ε_{abc} は**レヴィ-チヴィタ記号**であり，

$$\varepsilon_{abc} = \begin{cases} 1 & ((a,b,c) = (1,2,3),(2,3,1),(3,1,2))\\ -1 & ((a,b,c) = (1,3,2),(2,1,3),(3,2,1))\\ 0 & (\text{上記以外})\end{cases} \tag{5.3.82}$$

によって定義される。ただし，a，b，c の値 1，2，3 は x，y，z を表すものとする。[(5.3.81) の証明] まず，$\hat{R}_{\boldsymbol{n}}(\psi)^\dagger\hat{\boldsymbol{V}}\hat{R}_{\boldsymbol{n}}(\psi) = R_{\boldsymbol{n}}(\psi)\hat{\boldsymbol{V}}$ から $i[\,\boldsymbol{n}\cdot\hat{\boldsymbol{J}}, \hat{\boldsymbol{V}}\,] = \boldsymbol{n}\times\hat{\boldsymbol{V}}$ を導く。$\hat{R}_{\boldsymbol{n}}(\psi) = e^{-i\psi\boldsymbol{n}\cdot\hat{\boldsymbol{J}}}$ において $\psi\to 0$ の極限をとると，

$$\begin{aligned}\lim_{\psi\to 0}\frac{1}{\psi}\Big(\hat{R}_{\boldsymbol{n}}(\psi)^\dagger\hat{\boldsymbol{V}}\hat{R}_{\boldsymbol{n}}(\psi) - \hat{\boldsymbol{V}}\Big) &= \lim_{\psi\to 0}\frac{1}{\psi}\Big((\hat{I} + i\psi\boldsymbol{n}\cdot\hat{\boldsymbol{J}})\hat{\boldsymbol{V}}(\hat{I} - i\psi\boldsymbol{n}\cdot\hat{\boldsymbol{J}}) - \hat{\boldsymbol{V}}\Big)\\ &= i[\,\boldsymbol{n}\cdot\hat{\boldsymbol{J}}, \hat{\boldsymbol{V}}\,] = i\sum_{ab}[\,\hat{J}_a, \hat{V}_b\,]\,n_a\,\boldsymbol{e}_b\end{aligned} \tag{5.3.83}$$

である。一方，

$$R_{\boldsymbol{n}}(\psi)\hat{\boldsymbol{V}} = \boldsymbol{n}\boldsymbol{n}^\dagger\hat{\boldsymbol{V}} + \cos\psi\,(\hat{\boldsymbol{V}} - \boldsymbol{n}\boldsymbol{n}^\dagger\hat{\boldsymbol{V}}) + \sin\psi\,(\boldsymbol{n}\times\hat{\boldsymbol{V}}) \tag{5.3.84}$$

[69] $\hat{\boldsymbol{r}}$，$\hat{\boldsymbol{k}}$，$\hat{\boldsymbol{l}}$ は，スピン自由度に対しては恒等演算子として作用します。一方，$\hat{\boldsymbol{s}}$ は，位置 $\boldsymbol{r}$ の自由度に対しては恒等演算子として作用します。

[70] $\hat{\boldsymbol{V}}$ が $\hat{\boldsymbol{J}}$ のとき, (5.3.81) の交換関係は $\hat{\boldsymbol{J}}$ の交換関係 (5.3.47) そのものです。したがって, (5.3.81) より，$\hat{\boldsymbol{J}}$ はベクトル演算子だということがわかります。

より，

$$\lim_{\psi\to 0}\frac{1}{\psi}\Big(R_{\boldsymbol{n}}(\psi)\hat{\boldsymbol{V}}-\hat{\boldsymbol{V}}\Big)=\lim_{\psi\to 0}\frac{1}{\psi}\Big(\boldsymbol{n}\boldsymbol{n}^\dagger\hat{\boldsymbol{V}}+\cos\psi\,(\hat{\boldsymbol{V}}-\boldsymbol{n}\boldsymbol{n}^\dagger\hat{\boldsymbol{V}})+\sin\psi\,(\boldsymbol{n}\times\hat{\boldsymbol{V}})-\hat{\boldsymbol{V}}\Big)$$
$$=\boldsymbol{n}\times\hat{\boldsymbol{V}}=-\sum_{abc}\varepsilon_{abc}\hat{V}_c\,n_a\,\boldsymbol{e}_b \tag{5.3.85}$$

である。したがって，

$$i[\,\boldsymbol{n}\cdot\hat{\boldsymbol{J}},\hat{\boldsymbol{V}}\,]=\boldsymbol{n}\times\hat{\boldsymbol{V}}\quad\text{あるいは}\quad[\,\hat{J}_a,\hat{V}_b\,]=i\sum_c\varepsilon_{abc}\hat{V}_c \tag{5.3.86}$$

を得る。次に，$i[\,\boldsymbol{n}\cdot\hat{\boldsymbol{J}},\hat{\boldsymbol{V}}\,]=\boldsymbol{n}\times\hat{\boldsymbol{V}}$ から $\hat{R}_{\boldsymbol{n}}(\psi)^\dagger\hat{\boldsymbol{V}}\hat{R}_{\boldsymbol{n}}(\psi)=R_{\boldsymbol{n}}(\psi)\hat{\boldsymbol{V}}$ を導く。単位ベクトル $\boldsymbol{n}$ と任意のベクトルとの外積の性質より[71]，$k=1,2,3,4,\cdots$ に対して，

$$\underbrace{\boldsymbol{n}\times(\boldsymbol{n}\times(\cdots\times(\boldsymbol{n}\times}_{k\text{ 重}}\hat{\boldsymbol{V}})\cdots))=\begin{cases}(-1)^{(k-1)/2}\boldsymbol{n}\times\hat{\boldsymbol{V}} & (k=1,3,\cdots)\\(-1)^{(k-2)/2}(\boldsymbol{n}\boldsymbol{n}^\dagger\hat{\boldsymbol{V}}-\hat{\boldsymbol{V}}) & (k=2,4,\cdots)\end{cases} \tag{5.3.87}$$

であるから[72]，

$$\hat{\boldsymbol{V}}+\sum_{k=1}^{\infty}\frac{\psi^k}{k!}\underbrace{\boldsymbol{n}\times(\boldsymbol{n}\times(\cdots\times(\boldsymbol{n}\times}_{k\text{ 重}}\hat{\boldsymbol{V}})\cdots))$$
$$=\hat{\boldsymbol{V}}+\sin\psi\,(\boldsymbol{n}\times\hat{\boldsymbol{V}})+(1-\cos\psi)(\boldsymbol{n}\boldsymbol{n}^\dagger\hat{\boldsymbol{V}}-\hat{\boldsymbol{V}})=R_{\boldsymbol{n}}(\psi)\hat{\boldsymbol{V}} \tag{5.3.88}$$

を得る。一方，$i[\,\boldsymbol{n}\cdot\hat{\boldsymbol{J}},\hat{\boldsymbol{V}}\,]=\boldsymbol{n}\times\hat{\boldsymbol{V}}$ であるから，(5.3.88) の左辺は

$$\sum_{k=0}^{\infty}\frac{(i\psi)^k}{k!}\underbrace{[\,\boldsymbol{n}\cdot\hat{\boldsymbol{J}},\cdots[\,\boldsymbol{n}\cdot\hat{\boldsymbol{J}}}_{k\text{ 重}},\hat{\boldsymbol{V}}\,]\cdots]\overset{①}{=}e^{i\psi\boldsymbol{n}\cdot\hat{\boldsymbol{J}}}\hat{\boldsymbol{V}}e^{-i\psi\boldsymbol{n}\cdot\hat{\boldsymbol{J}}}=\hat{R}_{\boldsymbol{n}}(\psi)^\dagger\hat{\boldsymbol{V}}\hat{R}_{\boldsymbol{n}}(\psi) \tag{5.3.89}$$

となる。等式①においてアダマールの補題 (2.2.58) を用いた。したがって，(5.3.88) と (5.3.89) より，

$$\hat{R}_{\boldsymbol{n}}(\psi)^\dagger\hat{\boldsymbol{V}}\hat{R}_{\boldsymbol{n}}(\psi)=R_{\boldsymbol{n}}(\psi)\hat{\boldsymbol{V}} \tag{5.3.90}$$

[71]単位ベクトル $\boldsymbol{n}$ と $\boldsymbol{n}$ に垂直なベクトル $\boldsymbol{V}_\perp=\boldsymbol{V}-\boldsymbol{n}\boldsymbol{n}^\dagger\boldsymbol{V}$ との外積 $\boldsymbol{n}\times\boldsymbol{V}_\perp$ は $\boldsymbol{n}$ の方向を回転軸として $\boldsymbol{V}_\perp$ を反時計回りに $\pi/2$ 回転させたベクトルです。したがって，$\boldsymbol{V}_\perp$ に対して $\boldsymbol{n}$ との外積を $\boldsymbol{n}\times(\boldsymbol{n}\times(\cdots\times(\boldsymbol{n}\times\boldsymbol{V}_\perp)\cdots))$ のように繰り返すと反時計回りに次々と $\pi/2$ の回転を行っていくことになります。あるいは，ラグランジュの公式 $\boldsymbol{a}\times(\boldsymbol{b}\times\boldsymbol{c})=(\boldsymbol{a}\cdot\boldsymbol{c})\boldsymbol{b}-(\boldsymbol{a}\cdot\boldsymbol{b})\boldsymbol{c}$ において，$\boldsymbol{a}=\boldsymbol{b}=\boldsymbol{n}$，$\boldsymbol{c}=\boldsymbol{V}$ として，$\boldsymbol{n}\times(\boldsymbol{n}\times\boldsymbol{V})=\boldsymbol{n}\boldsymbol{n}^\dagger\boldsymbol{V}-\boldsymbol{V}=-\boldsymbol{V}_\perp$ を用いて説明することもできます。

[72](5.3.87) は $\hat{\boldsymbol{V}}$ を $\hat{\boldsymbol{V}}-\boldsymbol{n}\boldsymbol{n}^\dagger\hat{\boldsymbol{V}}$ に置き換えれば $k=0$ の場合も含めることができます。

を得る。以上より，(5.3.81) が示された。 ■

ベクトル演算子 $\hat{\boldsymbol{V}}$ と $\hat{\boldsymbol{W}}$ の内積 $\hat{\boldsymbol{V}}\cdot\hat{\boldsymbol{W}}$ はスカラー演算子である。つまり，

$$\hat{R}_{\boldsymbol{n}}(\psi)^{\dagger}(\hat{\boldsymbol{V}}\cdot\hat{\boldsymbol{W}})\hat{R}_{\boldsymbol{n}}(\psi)=\hat{\boldsymbol{V}}\cdot\hat{\boldsymbol{W}} \tag{5.3.91}$$

が成り立つ。

[(5.3.91) の証明] (5.3.91) を示すには，$\hat{\boldsymbol{J}}$ と $\hat{\boldsymbol{V}}\cdot\hat{\boldsymbol{W}}$ が可換であることをいえばよい。例えば，$\hat{J}_x$ について，

$$\begin{aligned}[\,\hat{J}_x,\hat{\boldsymbol{V}}\cdot\hat{\boldsymbol{W}}\,]&=[\,\hat{J}_x,\hat{V}_x\hat{W}_x\,]+[\,\hat{J}_x,\hat{V}_y\hat{W}_y\,]+[\,\hat{J}_x,\hat{V}_z\hat{W}_z\,]\\&=\hat{V}_y[\,\hat{J}_x,\hat{W}_y\,]+[\,\hat{J}_x,\hat{V}_y\,]\hat{W}_y+\hat{V}_z[\,\hat{J}_x,\hat{W}_z\,]+[\,\hat{J}_x,\hat{V}_z\,]\hat{W}_z\\&\overset{①}{=}\hat{V}_y(i\hat{W}_z)+(i\hat{V}_z)\hat{W}_y+\hat{V}_z(-i\hat{W}_y)+(-i\hat{V}_y)\hat{W}_z\\&=\hat{0}\end{aligned} \tag{5.3.92}$$

を得る。等式①において (5.3.81) の交換関係を用いた。$[\,\hat{\boldsymbol{V}}\cdot\hat{\boldsymbol{W}},\hat{J}_y\,]=\hat{0}$，$[\,\hat{\boldsymbol{V}}\cdot\hat{\boldsymbol{W}},\hat{J}_z\,]=\hat{0}$ も同様に示せる。 ■

==========

補足・計算例 37.

多変数関数の関数空間

例 1：補足・計算例 25 で取り上げた可換でない鏡映を関数に対する演算子として考えてみよう。xy 平面上の 2 変数関数全体のなす関数空間を $V=V_x\otimes V_y$ とし，V の鏡映演算子 $\hat{M}_\alpha$，$\hat{M}_\beta$ をデルタ関数 $|\boldsymbol{r}\rangle=|x\,\boldsymbol{e}_x+y\,\boldsymbol{e}_y\rangle$ に対する作用

$$\begin{aligned}\hat{M}_\alpha\,|x\,\boldsymbol{e}_x+y\,\boldsymbol{e}_y\rangle&=|x\,\boldsymbol{e}_x-y\,\boldsymbol{e}_y\rangle\\\hat{M}_\beta\,|x\,\boldsymbol{e}_x+y\,\boldsymbol{e}_y\rangle&=|y\,\boldsymbol{e}_x+x\,\boldsymbol{e}_y\rangle\end{aligned} \tag{5.3.93}$$

によって定義する。$\hat{M}_\alpha$ は $\boldsymbol{e}_x$ の方向の鏡映面 α(単位法線ベクトル $\boldsymbol{n}=\boldsymbol{e}_y$) に関する鏡映演算子であり，一方，$\hat{M}_\beta$ は $\boldsymbol{e}_x$ の方向に対して反時計回りに $\pi/4$ だけ傾いた鏡映面 β(単位法線ベクトル $\boldsymbol{n}=-\frac{1}{\sqrt{2}}\boldsymbol{e}_x+\frac{1}{\sqrt{2}}\boldsymbol{e}_y$) に関する鏡映演算子である。(5.3.93) より，

$$\begin{aligned}\hat{M}_\alpha\hat{M}_\beta\,|x\,\boldsymbol{e}_x+y\,\boldsymbol{e}_y\rangle&=\hat{M}_\alpha\,|y\,\boldsymbol{e}_x+x\,\boldsymbol{e}_y\rangle=|y\,\boldsymbol{e}_x-x\,\boldsymbol{e}_y\rangle\\\hat{M}_\beta\hat{M}_\alpha\,|x\,\boldsymbol{e}_x+y\,\boldsymbol{e}_y\rangle&=\hat{M}_\beta\,|x\,\boldsymbol{e}_x-y\,\boldsymbol{e}_y\rangle=|-y\,\boldsymbol{e}_x+x\,\boldsymbol{e}_y\rangle\end{aligned} \tag{5.3.94}$$

となる。つまり，$\hat{M}_\alpha\hat{M}_\beta$ は関数 $|f\rangle$ を時計回りに $\pi/2$ だけ回転する回転演算子であり，一方，$\hat{M}_\beta\hat{M}_\alpha$ は関数 $|f\rangle$ を反時計回りに $\pi/2$ だけ回転する回転演算子である。したがって，$\hat{M}_\alpha\hat{M}_\beta\neq\hat{M}_\beta\hat{M}_\alpha$，つまり，$[\,\hat{M}_\alpha,\hat{M}_\beta\,]\neq\hat{0}$ である。

例 2：xy 平面上の 2 変数関数全体のなす関数空間を $V=V_x\otimes V_y$ とし，V の並進演算子 $\hat{T}$ および回転演算子 $\hat{R}$ をデルタ関数 $|\boldsymbol{r}\rangle=|x\,\boldsymbol{e}_x+y\,\boldsymbol{e}_y\rangle$ に対する作用

$$\begin{aligned}\hat{T}\,|x\,\boldsymbol{e}_x+y\,\boldsymbol{e}_y\rangle&=|(x+c)\,\boldsymbol{e}_x+y\,\boldsymbol{e}_y\rangle\\\hat{R}\,|x\,\boldsymbol{e}_x+y\,\boldsymbol{e}_y\rangle&=|-y\,\boldsymbol{e}_x+x\,\boldsymbol{e}_y\rangle\end{aligned} \tag{5.3.95}$$

によって定義する。$\hat{T}$ は関数 $|f\rangle$ を x 軸の正の向きに c だけ平行移動する演算子であり，一方，$\hat{R}$ は関数 $|f\rangle$ を反時計回りに $\pi/2$ だけ回転する演算子である。このとき，$\hat{R}^\dagger\hat{T}\hat{R}$ はデルタ関数 $|\boldsymbol{r}\rangle = |x\,\boldsymbol{e}_x + y\,\boldsymbol{e}_y\rangle$ に対して，

$$\hat{R}^\dagger\hat{T}\hat{R}\,|x\,\boldsymbol{e}_x + y\,\boldsymbol{e}_y\rangle = \hat{R}^\dagger\hat{T}\,|-y\,\boldsymbol{e}_x + x\,\boldsymbol{e}_y\rangle = \hat{R}^\dagger\,|(-y+c)\,\boldsymbol{e}_x + x\,\boldsymbol{e}_y\rangle = |x\,\boldsymbol{e}_x + (y-c)\,\boldsymbol{e}_y\rangle \tag{5.3.96}$$

と作用する。(5.3.96) より，$\hat{R}^\dagger\hat{T}\hat{R}$ は関数 $|f\rangle$ を y 軸の負の向きに c だけ平行移動する演算子であることがわかる。また，位置演算子 $\hat{\boldsymbol{r}} = \hat{x}\,\boldsymbol{e}_x + \hat{y}\,\boldsymbol{e}_y$ を $\hat{T}$ により $\hat{T}^\dagger\hat{\boldsymbol{r}}\hat{T}$ と変換すると，

$$\begin{aligned}
\hat{T}^\dagger\hat{\boldsymbol{r}}\hat{T} &= \left(\int d^2r\,x\hat{T}^\dagger\,|x\,\boldsymbol{e}_x + y\,\boldsymbol{e}_y\rangle\langle x\,\boldsymbol{e}_x + y\,\boldsymbol{e}_y|\,\hat{T}\right)\boldsymbol{e}_x \\
&\qquad + \left(\int d^2r\,y\hat{T}^\dagger\,|x\,\boldsymbol{e}_x + y\,\boldsymbol{e}_y\rangle\langle x\,\boldsymbol{e}_x + y\,\boldsymbol{e}_y|\,\hat{T}\right)\boldsymbol{e}_y \\
&= \left(\int d^2r\,x\,|(x-c)\,\boldsymbol{e}_x + y\,\boldsymbol{e}_y\rangle\langle(x-c)\,\boldsymbol{e}_x + y\,\boldsymbol{e}_y|\right)\boldsymbol{e}_x \\
&\qquad + \left(\int d^2r\,y\,|(x-c)\,\boldsymbol{e}_x + y\,\boldsymbol{e}_y\rangle\langle(x-c)\,\boldsymbol{e}_x + y\,\boldsymbol{e}_y|\right)\boldsymbol{e}_y \\
&= \left(\int d^2r\,(x+c)\,|x\,\boldsymbol{e}_x + y\,\boldsymbol{e}_y\rangle\langle x\,\boldsymbol{e}_x + y\,\boldsymbol{e}_y|\right)\boldsymbol{e}_x \\
&\qquad + \left(\int d^2r\,y\,|x\,\boldsymbol{e}_x + y\,\boldsymbol{e}_y\rangle\langle x\,\boldsymbol{e}_x + y\,\boldsymbol{e}_y|\right)\boldsymbol{e}_y \\
&= \hat{\boldsymbol{r}} + c\,\boldsymbol{e}_x\,\hat{I}
\end{aligned} \tag{5.3.97}$$

となる。同様に，$\hat{\boldsymbol{r}} = \hat{x}\,\boldsymbol{e}_x + \hat{y}\,\boldsymbol{e}_y$ を $\hat{R}$ により $\hat{R}^\dagger\hat{\boldsymbol{r}}\hat{R}$ と変換すると，

$$\begin{aligned}
\hat{R}^\dagger\hat{\boldsymbol{r}}\hat{R} &= \left(\int d^2r\,x\hat{R}^\dagger\,|x\,\boldsymbol{e}_x + y\,\boldsymbol{e}_y\rangle\langle x\,\boldsymbol{e}_x + y\,\boldsymbol{e}_y|\,\hat{R}\right)\boldsymbol{e}_x \\
&\qquad + \left(\int d^2r\,y\hat{R}^\dagger\,|x\,\boldsymbol{e}_x + y\,\boldsymbol{e}_y\rangle\langle x\,\boldsymbol{e}_x + y\,\boldsymbol{e}_y|\,\hat{R}\right)\boldsymbol{e}_y \\
&= \left(\int d^2r\,x\,|y\,\boldsymbol{e}_x - x\,\boldsymbol{e}_y\rangle\langle y\,\boldsymbol{e}_x - x\,\boldsymbol{e}_y|\right)\boldsymbol{e}_x \\
&\qquad + \left(\int d^2r\,y\,|y\,\boldsymbol{e}_x - x\,\boldsymbol{e}_y\rangle\langle y\,\boldsymbol{e}_x - x\,\boldsymbol{e}_y|\right)\boldsymbol{e}_y \\
&= \left(\int d^2r\,(-y)\,|x\,\boldsymbol{e}_x + y\,\boldsymbol{e}_y\rangle\langle x\,\boldsymbol{e}_x + y\,\boldsymbol{e}_y|\right)\boldsymbol{e}_x \\
&\qquad + \left(\int d^2r\,x\,|x\,\boldsymbol{e}_x + y\,\boldsymbol{e}_y\rangle\langle x\,\boldsymbol{e}_x + y\,\boldsymbol{e}_y|\right)\boldsymbol{e}_y \\
&= -\hat{y}\,\boldsymbol{e}_x + \hat{x}\,\boldsymbol{e}_y = R\hat{\boldsymbol{r}}
\end{aligned} \tag{5.3.98}$$

となる。ここで，R は $R\boldsymbol{e}_x = \boldsymbol{e}_y$，$R\boldsymbol{e}_y = -\boldsymbol{e}_x$ により定義される位置ベクトル $\boldsymbol{r}$ に対する反時計回りの $\pi/2$ の回転操作を表す。 ■

例 3：位置演算子 $\hat{\boldsymbol{r}}$，波数演算子 $\hat{\boldsymbol{k}}$，軌道角運動量演算子 $\hat{\boldsymbol{l}}$ を反転演算子 $\hat{P}$ によって変換すると，

$$\hat{P}^\dagger\hat{\boldsymbol{r}}\hat{P} = -\hat{\boldsymbol{r}} \qquad \hat{P}^\dagger\hat{\boldsymbol{k}}\hat{P} = -\hat{\boldsymbol{k}} \qquad \hat{P}^\dagger\hat{\boldsymbol{l}}\hat{P} = \hat{\boldsymbol{l}} \tag{5.3.99}$$

となる。
[(5.3.99) の証明] まず，$\hat{P}^\dagger \hat{\boldsymbol{r}} \hat{P} = -\hat{\boldsymbol{r}}$ を示す。変数変換 $(x, y, x) \mapsto (-x, -y, -z)$ のヤコビアンは 1 であるから，

$$\begin{aligned}\hat{P}^\dagger \hat{\boldsymbol{r}} \hat{P} &= \sum_\sigma \int d^3r\, \boldsymbol{r} \hat{P}^\dagger \left|\boldsymbol{r}\,\sigma\right\rangle\!\left\langle\boldsymbol{r}\,\sigma\right| \hat{P} = \sum_\sigma \int d^3r\, \boldsymbol{r} \left|-\boldsymbol{r}\,\sigma\right\rangle\!\left\langle-\boldsymbol{r}\,\sigma\right| = \sum_\sigma \int d^3r\, (-\boldsymbol{r}) \left|\boldsymbol{r}\,\sigma\right\rangle\!\left\langle\boldsymbol{r}\,\sigma\right| \\ &= -\hat{\boldsymbol{r}}\end{aligned} \tag{5.3.100}$$

を得る。$\hat{P}^\dagger \hat{\boldsymbol{k}} \hat{P} = -\hat{\boldsymbol{k}}$ についても同様に，

$$\begin{aligned}\hat{P}^\dagger \hat{\boldsymbol{k}} \hat{P} &= \sum_\sigma \int d^3r\, \hat{P}^\dagger \left|\boldsymbol{r}\,\sigma\right\rangle (-i\boldsymbol{\nabla}) \left\langle\boldsymbol{r}\,\sigma\right| \hat{P} = \sum_\sigma \int d^3r\, \left|-\boldsymbol{r}\,\sigma\right\rangle (-i\boldsymbol{\nabla}) \left\langle-\boldsymbol{r}\,\sigma\right| \\ &= \sum_\sigma \int d^3r\, \left|\boldsymbol{r}\,\sigma\right\rangle (i\boldsymbol{\nabla}) \left\langle\boldsymbol{r}\,\sigma\right| = -\hat{\boldsymbol{k}}\end{aligned} \tag{5.3.101}$$

となる。ここで，変数変換 $(x, y, x) \mapsto (-x, -y, -z)$ によって $\boldsymbol{\nabla} \mapsto -\boldsymbol{\nabla}$ となることを用いた。$\hat{\boldsymbol{l}}$ は $\hat{\boldsymbol{l}} = \hat{\boldsymbol{r}} \times \hat{\boldsymbol{k}}$ によって定義されるから，

$$\hat{P}^\dagger \hat{\boldsymbol{l}} \hat{P} = \hat{P}^\dagger (\hat{\boldsymbol{r}} \times \hat{\boldsymbol{k}}) \hat{P} = \hat{P}^\dagger \hat{\boldsymbol{r}} \hat{P} \times \hat{P}^\dagger \hat{\boldsymbol{k}} \hat{P} = (-\hat{\boldsymbol{r}}) \times (-\hat{\boldsymbol{k}}) = \hat{\boldsymbol{r}} \times \hat{\boldsymbol{k}} = \hat{\boldsymbol{l}} \tag{5.3.102}$$

となる[73]。 ■

例 4：位置演算子 $\hat{\boldsymbol{r}}$，波数演算子 $\hat{\boldsymbol{k}}$，軌道角運動量演算子 $\hat{\boldsymbol{l}}$ を回転演算子 $\hat{R}_{\boldsymbol{n}}(\psi)$ によって変換すると，$\hat{\boldsymbol{r}}$，$\hat{\boldsymbol{k}}$，$\hat{\boldsymbol{l}}$ を $\hat{\boldsymbol{V}}$ によって表して，

$$\hat{R}_{\boldsymbol{n}}(\psi)^\dagger \hat{\boldsymbol{V}} \hat{R}_{\boldsymbol{n}}(\psi) = R_{\boldsymbol{n}}(\psi) \hat{\boldsymbol{V}} \tag{5.3.103}$$

が成り立つ。したがって，$\hat{\boldsymbol{r}}$，$\hat{\boldsymbol{k}}$，$\hat{\boldsymbol{l}}$ はベクトル演算子である。
[(5.3.103) の証明] $\hat{\boldsymbol{r}}$，$\hat{\boldsymbol{k}}$，$\hat{\boldsymbol{l}}$ はすべてスピン空間では恒等演算子として作用するから，

$$\hat{\boldsymbol{V}} = \sum_\sigma \int d^3r\, \left|\boldsymbol{r}\,\sigma\right\rangle \boldsymbol{\mathscr{V}} \left\langle\boldsymbol{r}\,\sigma\right| \tag{5.3.104}$$

と書ける。ここで，$\boldsymbol{\mathscr{V}}$ は $\hat{\boldsymbol{r}}$，$\hat{\boldsymbol{k}}$，$\hat{\boldsymbol{l}}$ に対して $\boldsymbol{r}$，$-i\boldsymbol{\nabla}$，$-i\boldsymbol{r} \times \boldsymbol{\nabla}$ を表す。$\hat{R}_{\boldsymbol{n}}(\psi)$ はユニタリ演算子，つまり，$\hat{R}_{\boldsymbol{n}}(\psi)^\dagger = \hat{R}_{\boldsymbol{n}}(\psi)^{-1}$ であるから，

$$\begin{aligned}\hat{R}_{\boldsymbol{n}}(\psi)^\dagger \hat{\boldsymbol{V}} \hat{R}_{\boldsymbol{n}}(\psi) &= \sum_\sigma \int d^3r\, \hat{R}_{\boldsymbol{n}}(\psi)^\dagger \left|\boldsymbol{r}\,\sigma\right\rangle \boldsymbol{\mathscr{V}} \left\langle\boldsymbol{r}\,\sigma\right| \hat{R}_{\boldsymbol{n}}(\psi) = \sum_\sigma \int d^3r\, \hat{R}_{\boldsymbol{n}}(\psi)^{-1} \left|\boldsymbol{r}\,\sigma\right\rangle \boldsymbol{\mathscr{V}} \left\langle\boldsymbol{r}\,\sigma\right| \hat{R}_{\boldsymbol{n}}(\psi) \\ &= \sum_\sigma \int d^3r\, \left|R_{\boldsymbol{n}}(\psi)^{-1}\boldsymbol{r}\,\sigma\right\rangle \boldsymbol{\mathscr{V}} \left\langle R_{\boldsymbol{n}}(\psi)^{-1}\boldsymbol{r}\,\sigma\right| = \sum_\sigma \int d^3r\, \left|\boldsymbol{r}\,\sigma\right\rangle R_{\boldsymbol{n}}(\psi) \boldsymbol{\mathscr{V}} \left\langle\boldsymbol{r}\,\sigma\right| \\ &= R_{\boldsymbol{n}}(\psi) \hat{\boldsymbol{V}}\end{aligned} \tag{5.3.105}$$

を得る。ここで，変数変換 $\boldsymbol{r} \mapsto R_{\boldsymbol{n}}(\psi)\boldsymbol{r}$ に伴い $\boldsymbol{\mathscr{V}}$ が $\boldsymbol{\mathscr{V}} \mapsto R_{\boldsymbol{n}}(\psi)\boldsymbol{\mathscr{V}}$ と変換されること，および，この変数変換のヤコビアンが 1 であることを用いた[74]。 ■

---

[73] $\hat{\boldsymbol{l}}$ については，変数変換 $(x, y, x) \mapsto (-x, -y, -z)$ によって $-i\boldsymbol{r} \times \boldsymbol{\nabla}$ は $-i\boldsymbol{r} \times \boldsymbol{\nabla} \mapsto -i\boldsymbol{r} \times \boldsymbol{\nabla}$ のように不変だからと考えても同じです。

[74] ここでは極性ベクトルの $\boldsymbol{r}$ と $-i\boldsymbol{\nabla}$ の外積として定義される軸性ベクトルの $-i\boldsymbol{r} \times \boldsymbol{\nabla}$ が変数変換 $\boldsymbol{r} \mapsto R_{\boldsymbol{n}}(\psi)\boldsymbol{r}$ に際して $-i\boldsymbol{r} \times \boldsymbol{\nabla} \mapsto R_{\boldsymbol{n}}(\psi)(-i\boldsymbol{r} \times \boldsymbol{\nabla})$ と変換されることを認めて (5.3.103) を証明しましたが，本当はこれが正しいことをきちんと示す必要があります。

例 5：位置演算子 $\hat{\boldsymbol{r}}$，波数演算子 $\hat{\boldsymbol{k}}$ と軌道角運動量演算子 $\hat{\boldsymbol{l}}$ の交換関係は，$\hat{\boldsymbol{r}}$，$\hat{\boldsymbol{k}}$ を $\hat{\boldsymbol{V}}$ によって表して，

$$[\,\hat{l}_a, \hat{V}_b\,] = i\sum_c \varepsilon_{abc}\hat{V}_c \tag{5.3.106}$$

である。
[(5.3.106) の証明] まず，$\hat{\boldsymbol{V}} = \hat{\boldsymbol{r}}$ とする。$\hat{l}_x = \hat{y}\hat{k}_z - \hat{z}\hat{k}_y$，$\hat{l}_y = \hat{z}\hat{k}_x - \hat{x}\hat{k}_z$，$\hat{l}_z = \hat{x}\hat{k}_y - \hat{y}\hat{k}_x$ より，$[\,\hat{l}_x, \hat{x}\,] = [\,\hat{l}_y, \hat{y}\,] = [\,\hat{l}_z, \hat{z}\,] = \hat{0}$ は明らかである。その他については，例えば $[\,\hat{l}_y, \hat{x}\,]$，$[\,\hat{l}_z, \hat{x}\,]$ を計算すると，

$$\begin{aligned}[\,\hat{l}_y, \hat{x}\,] &= [\,\hat{z}\hat{k}_x - \hat{x}\hat{k}_z, \hat{x}\,] = \hat{z}[\,\hat{k}_x, \hat{x}\,] = -i\hat{z} \\ [\,\hat{l}_z, \hat{x}\,] &= [\,\hat{x}\hat{k}_y - \hat{y}\hat{k}_x, \hat{x}\,] = -\hat{y}[\,\hat{k}_x, \hat{x}\,] = i\hat{y}\end{aligned} \tag{5.3.107}$$

を得る。次に，$\hat{\boldsymbol{V}} = \hat{\boldsymbol{k}}$ とする。$[\,\hat{l}_x, \hat{k}_x\,] = [\,\hat{l}_y, \hat{k}_y\,] = [\,\hat{l}_z, \hat{k}_z\,] = \hat{0}$ は明らかである。その他については，例えば $[\,\hat{l}_y, \hat{k}_x\,]$，$[\,\hat{l}_z, \hat{k}_x\,]$ を計算すると，

$$\begin{aligned}[\,\hat{l}_y, \hat{k}_x\,] &= [\,\hat{z}\hat{k}_x - \hat{x}\hat{k}_z, \hat{k}_x\,] = -[\,\hat{x}, \hat{k}_x\,]\hat{k}_z = -i\hat{k}_z \\ [\,\hat{l}_z, \hat{k}_x\,] &= [\,\hat{x}\hat{k}_y - \hat{y}\hat{k}_x, \hat{k}_x\,] = [\,\hat{x}, \hat{k}_x\,]\hat{k}_y = i\hat{k}_y\end{aligned} \tag{5.3.108}$$

を得る。残りのものについても同様に示せる。 ■

==========

5.4 場の演算子

5.4.1 場の演算子

位置ベクトル $\boldsymbol{r} = x\,\boldsymbol{e}_x + y\,\boldsymbol{e}_y + z\,\boldsymbol{e}_z$ の自由度およびスピン σ の自由度をもつ関数全体のなす関数空間を V として，その N 次の反対称テンソル空間 $\bigwedge^N V$ を構成する。スピン自由度をもつ 3 次元デルタ関数 $|\boldsymbol{r}\,\sigma\rangle$ のラベル $\boldsymbol{r}\,\sigma$ に関する生成消滅演算子 $\hat{\psi}_\sigma(\boldsymbol{r})^\dagger$，$\hat{\psi}_\sigma(\boldsymbol{r})$ を**場の演算子**という。つまり，$\hat{\psi}_\sigma(\boldsymbol{r})^\dagger$ を

$$\hat{\psi}_\sigma(\boldsymbol{r})^\dagger\,|\psi_1\cdots\psi_N\rangle = |\boldsymbol{r}\sigma\,\psi_1\cdots\psi_N\rangle \tag{5.4.1}$$

によって定義する[75]。(4.2.26) により，$\hat{\psi}_\sigma(\boldsymbol{r})^\dagger$，$\hat{\psi}_\sigma(\boldsymbol{r})$ の反交換関係は

$$\{\hat{\psi}_\sigma(\boldsymbol{r})^\dagger, \hat{\psi}_{\sigma'}(\boldsymbol{r}')^\dagger\} = 0 \qquad \{\hat{\psi}_\sigma(\boldsymbol{r}), \hat{\psi}_{\sigma'}(\boldsymbol{r}')\} = 0 \qquad \{\hat{\psi}_\sigma(\boldsymbol{r}), \hat{\psi}_{\sigma'}(\boldsymbol{r}')^\dagger\} = \delta(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}')\delta_{\sigma\sigma'} \tag{5.4.2}$$

である。ここで，$\langle\boldsymbol{r}\,\sigma|\boldsymbol{r}'\,\sigma'\rangle = \delta(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}')\delta_{\sigma\sigma'}$ を用いた。

[75] 正確にいうと $\hat{\psi}_\sigma(\boldsymbol{r})^\dagger$ は $\bigwedge V = \bigoplus_{N=0}^{\infty}\bigwedge^N V$ の演算子です。

5.4.2　1 体演算子と 2 体演算子

V の演算子

$$\hat{F}_1 = \sum_{\alpha\beta} \iint d^3r d^3r' \; |\boldsymbol{r}\,\alpha\rangle\, F_{\alpha\beta}(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}')\, \langle \boldsymbol{r}'\,\beta| \tag{5.4.3}$$

を $\bigwedge^N V$ の演算子として拡張して得られる 1 体演算子 $\hat{F}$ は

$$\hat{F} = \sum_{\alpha\beta} \iint d^3r d^3r' \, \hat{\psi}_\alpha(\boldsymbol{r})^\dagger F_{\alpha\beta}(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}') \hat{\psi}_\beta(\boldsymbol{r}') \tag{5.4.4}$$

によって与えられる。特に，$F_{\alpha\beta}(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}') = F_{\alpha\beta}(\boldsymbol{r})\delta(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}')$ と書けるとき[76]，

$$\hat{F} = \sum_{\alpha\beta} \int d^3r \, \hat{\psi}_\alpha(\boldsymbol{r})^\dagger F_{\alpha\beta}(\boldsymbol{r}) \hat{\psi}_\beta(\boldsymbol{r}) \tag{5.4.5}$$

と表される。さらに，$F_{\alpha\beta}(\boldsymbol{r}) = F(\boldsymbol{r})\delta_{\alpha\beta}$ と書けるとき[77]，

$$\hat{F} = \sum_{\alpha} \int d^3r \, \hat{\psi}_\alpha(\boldsymbol{r})^\dagger F(\boldsymbol{r}) \hat{\psi}_\alpha(\boldsymbol{r}) \tag{5.4.6}$$

と表される。また，$\hat{F}_1 = |\boldsymbol{r}\,\sigma\rangle\langle\boldsymbol{r}\,\sigma|$ を $\bigwedge^N V$ の演算子として拡張して得られる 1 体演算子 $\hat{\rho}_\sigma(\boldsymbol{r})$

$$\hat{\rho}_\sigma(\boldsymbol{r}) = \hat{\psi}_\sigma(\boldsymbol{r})^\dagger \hat{\psi}_\sigma(\boldsymbol{r}) \tag{5.4.7}$$

を**数密度演算子**という[78]。

$V \otimes V$ の演算子

$$\begin{aligned}\hat{G}_2 = \sum_{\alpha\beta\alpha'\beta'} \iint d^3r d^3r' \, G_{\alpha\beta\alpha'\beta'}(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}')(\, &|\boldsymbol{r}\alpha\rangle_1 \, \langle\boldsymbol{r}\beta|_1 \otimes |\boldsymbol{r}'\alpha'\rangle_2 \, \langle\boldsymbol{r}'\beta'|_2 \\ &+ |\boldsymbol{r}'\alpha'\rangle_1 \, \langle\boldsymbol{r}'\beta'|_1 \otimes |\boldsymbol{r}\alpha\rangle_2 \, \langle\boldsymbol{r}\beta|_2)\end{aligned} \tag{5.4.8}$$

を $\bigwedge^N V$ の演算子として拡張して得られる 2 体演算子 $\hat{G}$ は

$$\hat{G} = \sum_{\alpha\beta\alpha'\beta'} \iint d^3r d^3r' \, G_{\alpha\beta\alpha'\beta'}(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}') \hat{\psi}_\alpha(\boldsymbol{r})^\dagger \hat{\psi}_{\alpha'}(\boldsymbol{r}')^\dagger \hat{\psi}_{\beta'}(\boldsymbol{r}') \hat{\psi}_\beta(\boldsymbol{r}) \tag{5.4.9}$$

と表される。

---

[76] このような場合，$\hat{F}$ は**局所的演算子**であるといいます。位置演算子，波数演算子，軌道角運動量演算子，スピン角運動量演算子はすべて局所的演算子です。

[77] 位置演算子，波数演算子，軌道角運動量演算子はこの型の演算子です。スピン角運動量演算子はこの型ではありません。

[78] $\hat{\rho}_\sigma(\boldsymbol{r})$ は多電子系の量子力学でスピン σ をもつ電子の数密度を表す演算子です。

第 6 章　群の表現

本章では内積空間におけるユニタリ演算子の組がなす群の表現について述べる。通常，群の表現は準同型として定義されるが，本書では線形代数の視点から群の表現をユニタリ演算子の組の行列表現として定義することとした。なお，本章では単位元を E と表す群論での慣習に従い，恒等演算子を $\hat{E}$ のように表すこととした。

6.1　群

6.1.1　群の定義

集合 $\mathscr{G} = \{G_1, \cdots, G_g\}$ の任意の 2 つの元 G_i と G_j の間に積 G_iG_j が定義されており，

$$\begin{aligned}
&(1)\quad G_iG_j \in \mathscr{G} \\
&(2)\quad G_i(G_jG_k) = (G_iG_j)G_k \\
&(3)\quad G_1G_i = G_iG_1 = G_i \\
&(4)\quad G_iG_i^{-1} = G_i^{-1}G_i = G_1
\end{aligned} \tag{6.1.1}$$

の 4 つの性質を満たすとき，$\mathscr{G}$ は**群**であるという。群 $\mathscr{G}$ において，元の個数 g を**位数**[1]，G_1 を**単位元**，G_i^{-1} を G_i の**逆元**という。位数が有限の群を**有限群**といい，そうでない群を**無限群**という。本書では必要に応じて単位元 G_1 を E と表すことにする。$\mathscr{G}$ の部分集合 $\mathscr{H}$ が $\mathscr{G}$ の積に関して群となっているとき，$\mathscr{H}$ は $\mathscr{G}$ の**部分群**であるという。$\{E\}$ および $\mathscr{G}$ 自身は常に $\mathscr{G}$ の部分群である。$\mathscr{G}$ の積に関する重要な点として，積は可換とは限らないこと，つまり，任意の G_i，G_j について $G_iG_j = G_jG_i$ とは限らないことに注意されたい。任意の G_i，G_j について $G_iG_j = G_jG_i$ である群を**可換群**あるいは**アーベル群**という[2]。そうでない群を**非可換群**あるいは**非アー**

[1]群 $\mathscr{G}$ の位数は $|\mathscr{G}|$ と表されることもあります。§6.1 では位数が有限の群である**有限群**について述べます。位数が有限でない群については §6.3 で**回転群**を取り上げます。回転群は連続的なパラメータによって指定される元のなす群です。このような群を**連続群**といいます。

[2]補足・計算例 32 の (3.3.76) で定義した巡回演算子 $\hat{C}$ により生成されるユニタリ演算子の組 $\mathrm{C}_n = \{\hat{E}, \hat{C}, \hat{C}^2, \cdots, \hat{C}^{n-1}\}$ は可換群をなします。C_n を n 位の**巡回群**といいます。

ベル群という。

$\mathcal{S}$ を $\mathcal{G}$ の部分集合とするとき，$\mathcal{G}$ の元 G_i を $\mathcal{S}$ のすべての元に左あるいは右から掛けて得られる集合を $G_i\mathcal{S}$ あるいは $\mathcal{S}G_i$ と表す。つまり，

$$\begin{aligned} G_i\mathcal{S} &= \{G_iG_p \,|\, G_p \in \mathcal{S}\} \\ \mathcal{S}G_i &= \{G_pG_i \,|\, G_p \in \mathcal{S}\} \end{aligned} \tag{6.1.2}$$

と表す。(6.1.2) において $\mathcal{S}$ が $\mathcal{G}$ 自身であるとき，次の**組み換え定理**が成り立つ。任意の $G_i \in \mathcal{G}$ について

$$G_i\mathcal{G} = \mathcal{G} \qquad\qquad \mathcal{G}G_i = \mathcal{G} \tag{6.1.3}$$

である。つまり，G_i を $\mathcal{G}$ のすべての元に左あるいは右から掛けて得られる集合 $G_i\mathcal{G}$ あるいは $\mathcal{G}G_i$ の中には $\mathcal{G}$ の元が 1 度，そしてただ 1 度だけ現れる。

$\mathcal{G}$ の元を表の列見出し行 (第 0 行) と行見出し列 (第 0 列) に並べ，行見出しが G_i の行 (第 i 行) と列見出しが G_j の列 (第 j 列) の交点に G_iG_j を配置して得られる表を $\mathcal{G}$ の**積表**という。例として位数 6 の非可換群である $\mathrm{C_{3v}} = \{E, C_3, C_3^2, \sigma_v, \sigma_v', \sigma_v''\}$ の積表を以下に示す[3]。

$\mathrm{C_{3v}}$	E	C_3	C_3^2	σ_v	σ_v'	σ_v''
E	E	C_3	C_3^2	σ_v	σ_v'	σ_v''
C_3	C_3	C_3^2	E	σ_v''	σ_v	σ_v'
C_3^2	C_3^2	E	C_3	σ_v'	σ_v''	σ_v
σ_v	σ_v	σ_v'	σ_v''	E	C_3	C_3^2
σ_v'	σ_v'	σ_v''	σ_v	C_3^2	E	C_3
σ_v''	σ_v''	σ_v	σ_v'	C_3	C_3^2	E

表 6.1: $\mathrm{C_{3v}}$ の積表

6.1.2 共役類

$\mathcal{G}$ の 2 つの元 G_i と G_j に対して，

$$G_j = G_pG_iG_p^{-1} \tag{6.1.4}$$

[3] $\mathrm{C_{3v}}$ はアンモニア分子の対称性を表す群ですが，ここではそのことには立ち入らずに群の積に関する構造のみに着目しています。

となるような $G_p \in \mathscr{G}$ が存在するとき，G_i と G_j は互いに**共役**であるという。さらに，$G_k = G_q G_j G_q^{-1}$ とすると，$G_k = G_q G_p G_i G_p^{-1} G_q^{-1} = (G_q G_p) G_i (G_q G_p)^{-1}$ となるから，G_i と G_k も互いに共役である。そこで，G_i に共役な元すべてを合わせた $\mathscr{G}$ の部分集合 $\mathscr{C}(G_i)$ を G_i の**共役類**といい，G_i を共役類 $\mathscr{C}(G_i)$ の**代表**という。代表は同じ類に属する元であればどの元であってもよいことに注意せよ[4]。$G_i G_j$ と $G_j G_i$ は互いに共役であるから，積表から容易に共役類を見い出すことができる。単位元 E はそれ自身で共役類 $\{E\}$ をなす[5]。また，$\mathscr{G}$ が可換群のとき，その共役類は各元のみにより構成される $\{G_i\}\,(i = 1, \cdots, g)$ の g 個である。$\mathscr{G}$ の共役類の個数を n_c と表す。群が $\mathscr{G}$ であることを明示する場合は $n_c(\mathscr{G})$ と表すことにする。共役類に番号を付す場合は $\mathscr{C}_\kappa\ (\kappa = 1, \cdots, n_c)$ のように表し，$\mathscr{C}_\kappa$ に属する元の個数を h_κ と表すことにする。明らかに $n_c \leq g$ (等号は $\mathscr{G}$ が可換群のときに限る) が成り立つ。共役類の定義より，任意の $G_p \in \mathscr{G}$ について

$$\mathscr{C}_\kappa = G_p \mathscr{C}_\kappa G_p^{-1} \tag{6.1.5}$$

が成り立つ。より一般に，a_κ を零または正の整数として $\mathscr{C} = \sum_\kappa a_\kappa \mathscr{C}_\kappa$ とおくと，

$$\mathscr{C} = G_p \mathscr{C} G_p^{-1} \tag{6.1.6}$$

が成り立つ。逆に，任意の $G_p \in \mathscr{G}$ について (6.1.6) が成り立つならば，$\mathscr{C}$ は共役類の和として $\mathscr{C} = \sum_\kappa a_\kappa \mathscr{C}_\kappa$ と表される。2 つの共役類 $\mathscr{C}_\mu$ と $\mathscr{C}_\nu$ の積 $\mathscr{C}_\mu \mathscr{C}_\nu$ をそれぞれの共役類に属する元の積がつくる集合と定義する。このとき，任意の $G_p \in \mathscr{G}$ について $G_p \mathscr{C}_\mu \mathscr{C}_\nu G_p^{-1} = G_p \mathscr{C}_\mu G_p^{-1} G_p \mathscr{C}_\nu G_p^{-1} = \mathscr{C}_\mu \mathscr{C}_\nu$ であるから，

$$\mathscr{C}_\mu \mathscr{C}_\nu = \sum_\kappa c_{\mu\nu}^\kappa \mathscr{C}_\kappa \tag{6.1.7}$$

と表せる。ここで，$c_{\mu\nu}^\kappa$ は零または正の整数である。

6.1.3 剰余類・正規部分群・商群

位数 h の部分群 $\mathscr{H} \subsetneq \mathscr{G}$ に対して，G_p と G_q を $\mathscr{H}$ に属さない 2 つの元とする。$G_p \neq G_q$ のとき，$\mathscr{H} G_p = \mathscr{H} G_q$ であるか，または，$\mathscr{H} G_p \cap \mathscr{H} G_q = \varnothing$ であるかのいずれかである。また，任意の $\mathscr{H} G_p$ に属する元の個数は h である。したがって，

$$\mathscr{G} = \mathscr{H} G_1 + \cdots + \mathscr{H} G_k \qquad (k = g/h) \tag{6.1.8}$$

[4] G_i と G_j が互いに共役であれば，これらのうちどちらを代表としても構いません。また，この類を表す記号いついても $\mathscr{C}(G_i) = \mathscr{C}(G_j)$ であるということになります。

[5] $\{E\}$ は $\mathscr{G}$ の部分群ですが (これを自明な部分群といいます)，それ以外の共役類は E を元としてもたないことからもわかるように $\mathscr{G}$ の部分群とはなり得ません。

と表せる。$\mathscr{H}G_p\,(p=1,\cdots,g/h)$ を $\mathscr{G}$ における $\mathscr{H}$ の**右剰余類**といい，(6.1.8) を $\mathscr{G}$ の $\mathscr{H}$ による**右剰余類分解**という。(6.1.8) より，h は g の約数でなければならない。これを**ラグランジュの定理**という。また，g/h を $\mathscr{G}$ における $\mathscr{H}$ の**指数**という。**左剰余類**，**左剰余類分解**についても同様に定義する。

部分群 $\mathscr{H}\subseteq\mathscr{G}$ が任意の $G_p\in\mathscr{G}$ について

$$\mathscr{H}=G_p\mathscr{H}G_p^{-1}\quad \text{あるいは}\quad \mathscr{H}G_p=G_p\mathscr{H} \tag{6.1.9}$$

を満たすとき，$\mathscr{H}$ は $\mathscr{G}$ の**正規部分群**であるという。$\{E\}$ および $\mathscr{G}$ 自身は常に正規部分群である。$\{E\}$ および $\mathscr{G}$ 以外の正規部分群をもたない群を**単純群**といい，そうでない群を**非単純群**という。可換群は単純群である。(6.1.6) より，正規部分群は共役類の和として表される。つまり，正規部分群とは共役類の和として表される部分群のことである。定義 (6.1.9) より正規部分群 $\mathscr{H}$ に関する右剰余類と左剰余類は一致するから，これらを $\mathscr{H}$ に関する**剰余類**とよぶことにする。2 つの剰余類 $\mathscr{H}G_p$ と $\mathscr{H}G_q$ の積 $(\mathscr{H}G_p)(\mathscr{H}G_q)$ をそれぞれの剰余類に属する元の積がなす集合と定義すると，

$$(\mathscr{H}G_p)(\mathscr{H}G_q)=\mathscr{H}G_pG_q \tag{6.1.10}$$

が成り立つ。そこで，

$$\mathscr{G}/\mathscr{H}=\{\mathscr{H}G_1,\cdots,\mathscr{H}G_k\}\qquad (k=g/h) \tag{6.1.11}$$

とおくと，$\mathscr{G}/\mathscr{H}$ は剰余類の積に関して位数 g/h の群をなす。$\mathscr{G}/\mathscr{H}$ を $\mathscr{G}$ の $\mathscr{H}$ による**商群**という。

==========

補足・計算例 38.

群・共役類・正規部分群・商群

例 1：$\mathrm{C_{3v}}=\{E,C_3,C_3^2,\sigma_v,\sigma_v',\sigma_v''\}$ は正三角形の対称性を表す群 (鏡映操作を許す場合) とみなすことができる。このときの対称操作

$$\begin{aligned}
E&:\ \text{恒等操作}\\
C_3&:\ \text{反時計回りの } 2\pi/3 \text{ の回転操作}\\
C_3^2&:\ \text{反時計回りの } 4\pi/3 \text{ の回転操作 (= 時計回りの } 2\pi/3 \text{ の回転操作)}\\
\sigma_v&:\ \text{直線 OA に関する鏡映操作}\\
\sigma_v'&:\ \text{直線 OB に関する鏡映操作}\\
\sigma_v''&:\ \text{直線 OC に関する鏡映操作}
\end{aligned} \tag{6.1.12}$$

を図 6.1 に示す[6]。対称操作の積 G_iG_j は，まず G_j を行ったあとで G_i を行うものと約束すると，表 6.1 に示した関係が成り立つことがわかる。また，表 6.1 より $\mathrm{C_{3v}}$ の共役類は $\{E\}$，$\{C_3,C_3^2\}$，

[6] $\mathrm{C_{3v}}$ はアンモニア分子 $\mathrm{NH_3}$ の対称性を表す群とみなすこともできます。3 個の H 原子は正三角形の頂点 A，B，C に，また，N 原子は O を通る紙面に垂直な直線上の適当な位置にあると考えます。

$\{\sigma_v, \sigma_v', \sigma_v''\}$ の 3 個である。したがって，$\mathrm{C_{3v}}$ は $\{E\}$ および $\mathrm{C_{3v}}$ 自身以外の唯一の正規部分群 $\mathrm{C_3} = \{E, C_3, C_3^2\}$ をもつ非単純群である[7]。$\mathrm{C_{3v}}$ の $\mathrm{C_3}$ による商群は $\mathrm{C_{3v}}/\mathrm{C_3} = \{\mathrm{C_3}, \mathrm{C_3}\sigma_v\}$ となる。

例 2：$\mathrm{C_{3v}}$ の部分群 $\mathrm{C_3} = \{E, C_3, C_3^2\}$ は正三角形の対称性を表す群 (鏡映操作を許さない場合) とみなすことができる。$\mathrm{C_3}$ の対称操作は図 6.1 に示してある上の 3 つである。$\mathrm{C_3}$ の積表は表 6.1 において見出し E, C_3, C_3^2 による部分で与えられる。対称操作の積について $G_iG_j = G_jG_i$ が成り立つことがわかる。つまり，$\mathrm{C_3}$ は可換群であり，その共役類は $\{E\}$，$\{C_3\}$，$\{C_3^2\}$ の 3 個である。したがって，$\mathrm{C_3}$ は $\{E\}$ および $\mathrm{C_3}$ 自身以外の正規部分群をもたない単純群である。

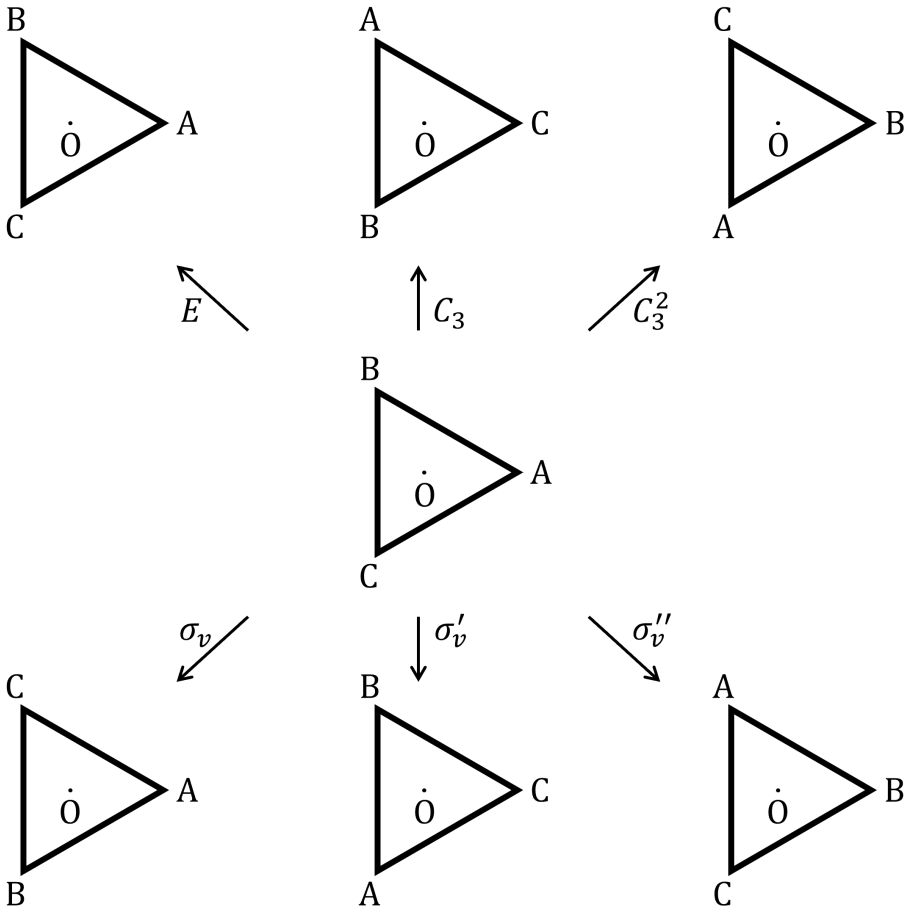


図 6.1: $\mathrm{C_{3v}}$ の対称操作

==========

[7] $\mathrm{C_3}$ は 3 位の巡回群です。

6.2 群の表現

6.2.1 ユニタリ演算子のなす群の表現

内積空間 V においてユニタリ演算子のなす群 $\mathscr{G} = \{\hat{G}_1, \cdots, \hat{G}_g\}$ を考える[8]。V の正規直交基底 $e = \{|e_1\rangle, \cdots, |e_n\rangle\}$ による $\hat{G}_1, \cdots, \hat{G}_g$ の行列表現の組 $D = \{D(\hat{G}_1), \cdots, D(\hat{G}_g)\}$ を基底 e による群 $\mathscr{G}$ の**ユニタリ表現**あるいは単に**表現**という[9]。また，V を $\mathscr{G}$ の**表現空間**，$n = \dim V$ を**表現の次元**，基底 e を**表現の基底**という。$\hat{G}_p \neq \hat{G}_q$ のとき $D(\hat{G}_p) \neq D(\hat{G}_q)$ であるような表現は**忠実**あるいは**忠実な表現**であるという。表現には正規直交基底の選び方による任意性があるが，異なる正規直交基底による行列表現は互いに相似であるから，これらはすべて本質的に同じである。2 つの表現が互いに相似なときこれらは**同値な表現**であるといい，そうでないとき**異値な表現**であるという。以下では，V の部分空間 W が $\hat{G}_1, \cdots, \hat{G}_g$ のすべてに関する共通の不変部分空間である場合，つまり，W が $\mathscr{G}$ に関する不変部分空間である場合には，V に対して与えた上述の定義を W に対しても用いることにする。

ユニタリ演算子は正規演算子であるから，それぞれの $\hat{G}_p$ は対角化可能である[10]。特に $\mathscr{G}$ が可換群の場合，$\hat{G}_1, \cdots, \hat{G}_g$ は同時対角化可能である。しかし，$\mathscr{G}$ が非可換群の場合，$\hat{G}_1, \cdots, \hat{G}_g$ は同時対角化可能であるとは限らない[11]。そこで非可換群の場合は可能な限り次数の小さなブロックからなる同時ブロック対角化を目標とすることになる。つまり，$\hat{G}_1, \cdots, \hat{G}_g$ のすべてに関する既約不変部分空間 $W^{(\alpha)}$ を決定し，$W^{(\alpha)}$ の正規直交基底 $e^{(\alpha)} = \{|e_1^{(\alpha)}\rangle, \cdots, |e_{d_\alpha}^{(\alpha)}\rangle\}$ による既約な行列表現 $D^{(\alpha)} = \{D^{(\alpha)}(\hat{G}_1), \cdots, D^{(\alpha)}(\hat{G}_g)\}$ を求めるのである。$W^{(\alpha)}$ を $\mathscr{G}$ に関する既約不変部分空間という。$W^{(\alpha)}$ における群 $\mathscr{G}$ の表現を**既約表現**といい，$D^{(\alpha)}$ あるいは単に α と表す。また，$d_\alpha = \dim W^{(\alpha)}$ を**既約表現の次元**，基底 $e^{(\alpha)}$ を**既約表現の基底**という。既約表現についても，互いに相似なものを**同値な既約表現**，そうでないものを**異値な既約表現**という。既約表現でない表現を**可約表現**という。V が $\mathscr{G}$ に関する既約不変部分空間の組 $W^{(1)}, \cdots, W^{(\rho)}$ の直交直和

$$V = W^{(1)} \oplus \cdots \oplus W^{(\rho)} \tag{6.2.1}$$

[8]内積空間として 3 変数関数の関数空間 $V_x \otimes V_y \otimes V_z$ を，また，ユニタリ演算子として回転演算子，鏡映演算子，反転演算子を考えるとイメージをつかみやすいと思います。

[9]群の表現を一般的に定義するには準同型という考え方を使うのですが，本書では群として主にユニタリ演算子のなす群を考え，それらの正規直交基底による行列表現，つまり，ユニタリ表現を群の表現と定義することにします。正規直交基底によるユニタリ演算子の行列表現はユニタリ行列ですので，ユニタリ表現はユニタリ行列の組だということになります。

[10]$\hat{G}_p$ ごとに異なる正規直交基底を選んでもよいとすればです。正規演算子がその固有ベクトルからなる正規直交基底により必ず対角化できることについては §3.3.2 を参照してください。

[11]複数の演算子の同時対角化については §2.4.3 を参照してください。

であるとき，

$$D = D^{(1)} \oplus \cdots \oplus D^{(\rho)} \tag{6.2.2}$$

と表し，可約表現 D は既約表現 $D^{(1)}, \cdots, D^{(\rho)}$ の直和である，あるいは，既約表現 $D^{(1)}, \cdots, D^{(\rho)}$ の直和に**既約分解**されるという。可約表現を既約分解する手続きを**簡約**という。直交直和分解 (6.2.1) に対応して，$W^{(1)}, \cdots, W^{(\rho)}$ への正射影の組 $\hat{P}^{(1)}, \cdots, \hat{P}^{(\rho)}$ は

$$\hat{E} = \hat{P}^{(1)} + \cdots + \hat{P}^{(\rho)} \tag{6.2.3}$$

を満たす。$W^{(\alpha)}$ は $\mathscr{G}$ に関する不変部分空間であるから，$\hat{P}^{(\alpha)}$ は $\hat{G}_1, \cdots, \hat{G}_g$ のすべてと可換である。$\hat{G}_1^{(\alpha)} = \hat{P}^{(\alpha)}\hat{G}_1, \cdots, \hat{G}_g^{(\alpha)} = \hat{P}^{(\alpha)}\hat{G}_g$ とおくと，$\hat{G}_1^{(\alpha)}, \cdots, \hat{G}_g^{(\alpha)}$ は $W^{(\alpha)}$ を全空間とみなしての $\hat{G}_1, \cdots, \hat{G}_g$ に対応するユニタリ演算子である[12]。

$\mathscr{H}$ を $\mathscr{G}$ の部分群とするとき，$\mathscr{G}$ に関する既約不変部分空間は $\mathscr{H}$ に関する既約不変部分空間であるとは限らないことに注意せよ。$\mathscr{G}$ に関する既約不変部分空間が $\mathscr{H}$ に関する既約不変部分空間でないとき，この部分空間における $\mathscr{G}$ の既約表現は $\mathscr{H}$ の可約表現となる。

6.2.2 シューアの補題と大直交性定理

§2.6 では演算子の組を考え，それらの行列表現の同時ブロック対角化について述べた。特に，§2.6.2 では同時ブロック対角化に関連して基本的な役割を果たす**シューアの補題** (2.6.7)，(2.6.8) について述べた。ここでは対象とする演算子の組としてユニタリ演算子のなす群 $\mathscr{G} = \{\hat{G}_1, \cdots, \hat{G}_g\}$ を考える。(2.6.7) より，λ を複素数として，

$$\begin{aligned} &W^{(\alpha)}\text{は}\mathscr{G}\text{に関する既約不変部分空間である} \\ &\Rightarrow W^{(\alpha)}\text{において}\hat{G}_1^{(\alpha)}, \cdots, \hat{G}_g^{(\alpha)}\text{すべてと可換な線形変換は}\lambda\hat{P}^{(\alpha)}\text{に限る} \end{aligned} \tag{6.2.4}$$

が成り立つ。また，$W^{(\alpha)}$，$W^{(\beta)}$ を $\mathscr{G}$ に関する 2 つの既約不変部分空間，$\hat{M}$ を $W^{(\alpha)}$ から $W^{(\beta)}$ への線形写像とするとき，(2.6.8) より，

$$\hat{M}\hat{G}_p^{(\alpha)} = \hat{G}_p^{(\beta)}\hat{M}\ (p = 1, \cdots, g) \Rightarrow \hat{M} = \hat{0}\ \text{または}\hat{M}\ \text{は可逆} \tag{6.2.5}$$

[12] $\hat{G}_1^{(\alpha)}, \cdots, \hat{G}_g^{(\alpha)}$ は $\hat{G}_1, \cdots, \hat{G}_g$ の $W^{(\alpha)}$ への制限です。

が成り立つ[13]。シューアの補題 (6.2.4) および (6.2.5) より，既約表現 α, β について，

$$\sum_{p=1}^{g} D_{ij}^{(\alpha)}(\hat{G}_p)^* D_{kl}^{(\beta)}(\hat{G}_p) = \begin{cases} \dfrac{g}{d_\alpha}\delta_{ik}\delta_{jl} & (\alpha\text{と}\beta\text{は同値}) \\ 0 & (\alpha\text{と}\beta\text{は異値}) \end{cases} \tag{6.2.6}$$

が成り立つ。ここで，$D_{ij}^{(\gamma)}(\hat{G}_p) = \langle e_i^{(\gamma)}|\hat{G}_p^{(\gamma)}|e_j^{(\gamma)}\rangle = \langle e_i^{(\gamma)}|\hat{G}_p|e_j^{(\gamma)}\rangle$ $(\gamma = \alpha, \beta)$ である。(6.2.6) を**大直交性定理**という。

[(6.2.6) の証明] $W^{(\alpha)}$ から $W^{(\beta)}$ への線形写像 $\hat{A}$ を

$$\hat{A} = \sum_{p=1}^{g} \hat{G}_p^{(\beta)\dagger}\, |e_i^{(\beta)}\rangle\langle e_k^{(\alpha)}|\, \hat{G}_p^{(\alpha)} \tag{6.2.7}$$

とおくと，組み換え定理により，

$$\hat{G}_p^{(\beta)\dagger}\hat{A}\hat{G}_p^{(\alpha)} = \sum_{p'=1}^{g} \hat{G}_p^{(\beta)\dagger}\hat{G}_{p'}^{(\alpha)\dagger}\, |e_i^{(\beta)}\rangle\langle e_k^{(\alpha)}|\, \hat{G}_{p'}^{(\alpha)}\hat{G}_p^{(\alpha)} = \hat{A} \tag{6.2.8}$$

つまり，$\hat{A}\hat{G}_p^{(\alpha)} = \hat{G}_p^{(\beta)}\hat{A}$ が成り立つ。まず，$W^{(\alpha)} = W^{(\beta)}$ とすると，(6.2.4) より $\hat{A} = \lambda\hat{P}^{(\alpha)}$ でなければならない。したがって，$\langle e_j^{(\alpha)}|\hat{A}|e_l^{(\alpha)}\rangle = \lambda\,\langle e_j^{(\alpha)}|\hat{P}^{(\alpha)}|e_l^{(\alpha)}\rangle = \lambda\delta_{jl}$ であるから，

$$\sum_{p=1}^{g} \langle e_j^{(\alpha)}|\hat{G}_p^{(\alpha)\dagger}|e_i^{(\alpha)}\rangle\ \langle e_k^{(\alpha)}|\hat{G}_p^{(\alpha)}|e_l^{(\alpha)}\rangle = \sum_{p=1}^{g} D_{ij}^{(\alpha)}(\hat{G}_p)^* D_{kl}^{(\alpha)}(\hat{G}_p) = \lambda\delta_{jl} \tag{6.2.9}$$

である。(6.2.9) において $j = l$ として，j について和をとると，

$$\begin{aligned} d_\alpha\lambda &= \sum_{j=1}^{d_\alpha}\sum_{p=1}^{g} \langle e_j^{(\alpha)}|\hat{G}_p^{(\alpha)\dagger}|e_i^{(\alpha)}\rangle\ \langle e_k^{(\alpha)}|\hat{G}_p^{(\alpha)}|e_j^{(\alpha)}\rangle \\ &= \sum_{p=1}^{g}\sum_{j=1}^{d_\alpha} \langle e_k^{(\alpha)}|\hat{G}_p^{(\alpha)}|e_j^{(\alpha)}\rangle\ \langle e_j^{(\alpha)}|\hat{G}_p^{(\alpha)\dagger}|e_i^{(\alpha)}\rangle \\ &= \sum_{p=1}^{g} \langle e_k^{(\alpha)}|\hat{G}_p^{(\alpha)}\hat{G}_p^{(\alpha)\dagger}|e_i^{(\alpha)}\rangle = \sum_{p=1}^{g} \langle e_k^{(\alpha)}|e_i^{(\alpha)}\rangle = \sum_{p=1}^{g}\delta_{ki} = g\delta_{ik} \end{aligned} \tag{6.2.10}$$

となる。したがって，

$$\sum_{p=1}^{g} D_{ij}^{(\alpha)}(\hat{G}_p)^* D_{kl}^{(\alpha)}(\hat{G}_p) = \frac{g}{d_\alpha}\delta_{ik}\delta_{jl} \tag{6.2.11}$$

[13]本書では $W^{(\alpha)}$ と $W^{(\beta)}$ はともに同一の線形空間 V の部分空間であるとして説明していますが，$W^{(\alpha)}$ と $W^{(\beta)}$ のそれぞれが独立した線形空間であるとしても (6.2.5) は成り立ちます。

を得る。次に $W^{(\alpha)} \neq W^{(\beta)}$ とする。α と β が同値であれば，例えば $W^{(\beta)}$ の基底を適当に変換することにより $D^{(\alpha)}(\hat{G}_p) = D^{(\beta)}(\hat{G}_p)$ とすることができるから，(6.2.11) はそのままの形で成り立つ。一方，α と β が異値のときは (6.2.5) より $\hat{A} = \hat{0}$ でなければならないから，(6.2.7) より，

$$\sum_{p=1}^{g} \langle e_j^{(\beta)} | \hat{G}_p^{(\beta)\dagger} | e_i^{(\beta)} \rangle \, \langle e_k^{(\alpha)} | \hat{G}_p^{(\alpha)} | e_l^{(\alpha)} \rangle = 0 \tag{6.2.12}$$

つまり，

$$\sum_{p=1}^{g} D_{ij}^{(\beta)}(\hat{G}_p)^* D_{kl}^{(\alpha)}(\hat{G}_p) = 0 \tag{6.2.13}$$

を得る。以上より，(6.2.6) が示された。 ■

6.2.3 指標の第 1 種および第 2 種直交性

$\hat{G}_p^{(\alpha)}$ のトレース $\mathrm{tr}\, \hat{G}_p^{(\alpha)}$ を $\chi^{(\alpha)}(\hat{G}_p)$ と表す。つまり，

$$\chi^{(\alpha)}(\hat{G}_p) = \sum_{i=1}^{d_\alpha} D_{ii}^{(\alpha)}(\hat{G}_p) \tag{6.2.14}$$

とおく。$\hat{G}_p$ に複素数 $\chi^{(\alpha)}(\hat{G}_p)$ を対応させる写像 $\chi^{(\alpha)} : \hat{G}_p \mapsto \chi^{(\alpha)}(\hat{G}_p)$ を表現 α の**指標**という。特に，単位元 $\hat{G}_1 = \hat{E}$ の指標の値は $\chi^{(\alpha)}(\hat{E}) = d_\alpha$ である。トレースの性質 (1.1.29) より，同じ共役類に属する元の指標の値は同じである。そこで，共役類 $\mathscr{C}_\kappa$ $(\kappa = 1, \cdots, n_c)$ に属する元の指標の値を $\chi^{(\alpha)}(\mathscr{C}_\kappa)$ と書くことにして，$\chi^{(\alpha)} = \{\chi^{(\alpha)}(\mathscr{C}_1), \cdots, \chi^{(\alpha)}(\mathscr{C}_{n_c})\}$ と表す。既約表現の指標を**既約指標**といい，(6.2.6) より，

$$\frac{1}{g} \sum_{p=1}^{g} \chi^{(\alpha)}(\hat{G}_p)^* \chi^{(\beta)}(\hat{G}_p) = \begin{cases} 1 & (\alpha と \beta は同値) \\ 0 & (\alpha と \beta は異値) \end{cases} \tag{6.2.15}$$

あるいは

$$\frac{1}{g} \sum_{\kappa=1}^{n_c} h_\kappa \chi^{(\alpha)}(\mathscr{C}_\kappa)^* \chi^{(\beta)}(\mathscr{C}_\kappa) = \begin{cases} 1 & (\alpha と \beta は同値) \\ 0 & (\alpha と \beta は異値) \end{cases} \tag{6.2.16}$$

が成り立つ。ここで，h_κ は $\mathscr{C}_\kappa$ に属する元の個数である。(6.2.16) を**指標の第 1 種直交性**という。

n_c 次元の列ベクトル空間 $\mathbb{C}^{n_c}$ において，n_c 個の複素数 $f(\mathscr{C}_1), \cdots, f(\mathscr{C}_{n_c})$ を成分とする列ベクトルを f とする[14]。つまり，f は共役類を変数とする複素数値関数である。このような関数を**類関数**という[15]。群の表現論において指標は最も重要な類関数である。類関数 f，g の内積を

$$(f, g) = \frac{1}{g}\sum_{\kappa=1}^{n_c} h_\kappa f(\mathscr{C}_\kappa)^* g(\mathscr{C}_\kappa) \tag{6.2.17}$$

によって定義すると，指標の第 1 種直交性 (6.2.16) は

$$(\chi^{(\alpha)}, \chi^{(\beta)}) = \delta_{\alpha\beta} \tag{6.2.18}$$

と書ける。つまり，$\{\chi^{(1)}, \cdots, \chi^{(n_r)}\}$ は内積 (6.2.17) の下で $\mathbb{C}^{n_c}$ の n_r 次元部分空間 $\mathrm{span}(\chi^{(1)}, \cdots, \chi^{(n_r)})$ の正規直交基底をなす。ここで，n_r は $\mathscr{G}$ の同値でない既約表現の個数である。n_r は $\mathbb{C}^{n_c}$ の次元 n_c を超えることはできないから $n_r \leq n_c$ である。実は，$n_c = n_r$，つまり，

$$\text{共役類の個数} = \text{既約表現の個数} \tag{6.2.19}$$

が成り立つ。(6.2.19) の証明は §6.2.5 の最後で行う。(6.2.18) および (6.2.19) より，既約指標の組 $\{\chi^{(1)}, \cdots, \chi^{(n_r)}\}$ は類関数のなす列ベクトル空間 $\mathbb{C}^{n_c}$ の正規直交基底であるから，任意の類関数 f は

$$f = \sum_{\alpha=1}^{n_r} \chi^{(\alpha)}(\chi^{(\alpha)}, f) \tag{6.2.20}$$

と表せる[16]。(6.2.20) を第 μ 成分について書くと

$$\begin{aligned} f(\mathscr{C}_\mu) &= \sum_{\alpha=1}^{n_r} \chi^{(\alpha)}(\mathscr{C}_\mu)\frac{1}{g}\sum_{\nu=1}^{n_c} h_\nu \chi^{(\alpha)}(\mathscr{C}_\nu)^* f(\mathscr{C}_\nu) \\ &= \sum_{\nu=1}^{n_c}\left(\frac{h_\nu}{g}\sum_{\alpha=1}^{n_r}\chi^{(\alpha)}(\mathscr{C}_\mu)\chi^{(\alpha)}(\mathscr{C}_\nu)^*\right) f(\mathscr{C}_\nu) \end{aligned} \tag{6.2.21}$$

[14] f は列ベクトルですので本書の書き方に合わせるなら太字で $\boldsymbol{f}$ と記すべきかもしれませんが，群の表現論での慣習にしたがって細字で表すことにします。また，f の成分も $f_1, \cdots, f_{n_c}$ と書く方がわかりやすいかもしれませんが，これについても慣習にしたがって $f(\mathscr{C}_1), \cdots, f(\mathscr{C}_{n_c})$ と表すことにします。

[15]「関数」というとその変数は連続な値をとるのがふつうですが，類関数は変数がとびとびなので「関数」という表現は少し違和感があるかもしれません。

[16] スカラーはベクトルの前に書くという流儀にしたがうならば，(6.2.20) は $f = \sum_{\alpha=1}^{n_r}(\chi^{(\alpha)}, f)\chi^{(\alpha)}$ と表すことになります。

である。f は任意であるから，

$$\frac{h_\nu}{g}\sum_{\alpha=1}^{n_r}\chi^{(\alpha)}(\mathscr{C}_\mu)\chi^{(\alpha)}(\mathscr{C}_\nu)^* = \delta_{\mu\nu} \tag{6.2.22}$$

を得る。(6.2.22) を**指標の第 2 種直交性**という[17]。(6.2.22) において $\mu = \nu = 1$ とすると，$\mathscr{C}_1 = \{\hat{E}\}$ に対して $h_1 = 1$，$\chi^{(\alpha)}(\mathscr{C}_1) = \chi^{(\alpha)}(\hat{E}) = d_\alpha$ より，

$$\sum_{\alpha=1}^{n_r} d_\alpha^2 = g \tag{6.2.23}$$

を得る。$\mathscr{G}$ の既約指標を表としてまとめたものを $\mathscr{G}$ の**指標表**という。指標表の列見出し行 (第 0 行) は共役類 (代表の左に共役類に属する元の個数を記したもの) であり，行見出し列 (第 0 列) は既約表現である。例として群 $\mathrm{C_{3v}} = \{E, C_3, C_3^2, \sigma_v, \sigma_v', \sigma_v''\}$ の指標表を以下に示す[18]。

$\mathrm{C_{3v}}$	E	$2C_3$	$3\sigma_v$
$\mathrm{A_1}$	1	1	1
$\mathrm{A_2}$	1	1	-1
E	2	-1	0

表 6.2: $\mathrm{C_{3v}}$ の指標表

なお，本書では上の表のように既約表現を**マリケン記号**を用いて表すことにする。マリケン記号では，1 次元の既約表現を A または B によって表し，2 次元の既約表現を E，3 次元の既約表現を T によって表す[19]。

V を $\mathscr{G}$ に関する既約不変部分空間 $W^{(1)}, \cdots, W^{(\rho)}$ の直交直和として表す。V における $\mathscr{G}$ の表現を $D = \{D(\hat{G}_1), \cdots, D(\hat{G}_g)\}$ とし，D の指標を $\chi = \{\chi(\mathscr{C}_1), \cdots, \chi(\mathscr{C}_{n_c})\}$ とする。このとき，$W^{(1)}, \cdots, W^{(\rho)}$ において既約表現 α に属する既約不変部分空間が現れる回数を q_α とすると，

$$\chi(\mathscr{C}_\kappa) = \sum_{\alpha=1}^{n_r} q_\alpha \chi^{(\alpha)}(\mathscr{C}_\kappa) \tag{6.2.24}$$

[17]指標の第 2 種直交性 (6.2.22) は $\mathbb{C}^{n_c}$ における正規直交基底 χ に関する完全性関係です。

[18]表 6.2 の求め方は補足・計算例 39 で説明します。

[19]既約表現を表す記号としてはマリケン記号とともによく使われるものにベーテ記号があります。

あるいは

$$\chi = \sum_{\alpha=1}^{n_r} q_\alpha \chi^{(\alpha)} \tag{6.2.25}$$

が成り立つ。指標の第 1 種直交性 (6.2.15) より $q_\alpha = (\chi^{(\alpha)}, \chi)$ であるから，

$$q_\alpha = \frac{1}{g} \sum_{\kappa=1}^{n_c} h_\kappa \chi^{(\alpha)}(\mathscr{C}_\kappa)^* \chi(\mathscr{C}_\kappa) \tag{6.2.26}$$

である。また，$(\chi, \chi) = \sum_{\alpha=1}^{n_r} \sum_{\beta=1}^{n_r} q_\alpha q_\beta (\chi^{(\alpha)}, \chi^{(\beta)}) = \sum_{\alpha=1}^{n_r} q_\alpha^2$ より，

$$(\chi, \chi) = \begin{cases} 1 & (D \text{ は既約}) \\ 2 \text{ 以上の整数} & (D \text{ は可約}) \end{cases} \tag{6.2.27}$$

である。つまり，

$$D \text{ は既約} \quad \Leftrightarrow \quad (\chi, \chi) = 1 \tag{6.2.28}$$

が成り立つ。

6.2.4 射影演算子

内積空間 V においてユニタリ演算子のなす群 $\mathscr{G} = \{\hat{G}_1, \cdots, \hat{G}_g\}$ およびその既約表現 $D^{(\alpha)} = \{D^{(\alpha)}(\hat{G}_1), \cdots, D^{(\alpha)}(\hat{G}_g)\}$ $(\alpha = 1, \cdots, n_r)$ を考える。$D^{(\alpha)}$ の次元を d_α として，演算子 $\hat{P}_i^{[\alpha]}$ $(i = 1, \cdots, d_\alpha)$ を

$$\hat{P}_i^{[\alpha]} = \frac{d_\alpha}{g} \sum_{p=1}^{g} D_{ii}^{(\alpha)}(\hat{G}_p)^* \hat{G}_p \tag{6.2.29}$$

によって定義する。また，演算子 $\hat{P}^{[\alpha]}$ を

$$\hat{P}^{[\alpha]} = \sum_{i=1}^{d_\alpha} \hat{P}_i^{[\alpha]} = \frac{d_\alpha}{g} \sum_{p=1}^{g} \chi^{(\alpha)}(\hat{G}_p)^* \hat{G}_p \tag{6.2.30}$$

によって定義する。ここで，$\chi^{(\alpha)}$ は既約表現 α の指標である。$\hat{P}_i^{[\alpha]}$ $(i = 1, \cdots, d_\alpha)$ および $\hat{P}^{[\alpha]}$ を既約表現 α の**射影演算子**という。$D_{ii}^{(\alpha)}(\hat{G}_p^\dagger) = D_{ii}^{(\alpha)}(\hat{G}_p)^*$ より，$\hat{P}_i^{[\alpha]\dagger} =$

$\hat{P}_i^{[\alpha]}$，つまり，$\hat{P}_i^{[\alpha]}$ はエルミート演算子である。したがって，$\hat{P}^{[\alpha]}$ もエルミート演算子である。また，

$$\hat{P}_i^{[\alpha]}\hat{P}_j^{[\beta]} = \begin{cases} \hat{P}_i^{[\alpha]} & (\alpha=\beta, i=j) \\ \hat{0} & (\text{上記以外}) \end{cases} \tag{6.2.31}$$

および

$$\hat{P}^{[\alpha]}\hat{P}^{[\beta]} = \begin{cases} \hat{P}^{[\alpha]} & (\alpha=\beta) \\ \hat{0} & (\alpha\neq\beta) \end{cases} \tag{6.2.32}$$

が成り立つ。したがって，$\hat{P}_i^{[\alpha]}\,(i=1,\cdots,d_\alpha)$ および $\hat{P}^{[\alpha]}$ は正射影である[20]。
[(6.2.32) の証明] (6.2.31) を示せばよい。

$$\begin{aligned}
\hat{P}_i^{[\alpha]}\hat{P}_j^{[\beta]} &\overset{①}{=} \hat{P}_i^{[\alpha]}\hat{P}_j^{[\beta]\dagger} = \frac{d_\alpha d_\beta}{g^2}\sum_{p=1}^{g}\sum_{q=1}^{g} D_{ii}^{(\alpha)}(\hat{G}_p)^* D_{jj}^{(\beta)}(\hat{G}_q)\hat{G}_p\hat{G}_q^\dagger \\
&= \frac{d_\alpha d_\beta}{g^2}\sum_{p=1}^{g}\sum_{q=1}^{g} D_{ii}^{(\alpha)}(\hat{G}_p)^* D_{jj}^{(\beta)}(\hat{G}_p\hat{G}_q^\dagger)\hat{G}_q \\
&= \frac{d_\alpha d_\beta}{g^2}\sum_{p=1}^{g}\sum_{q=1}^{g} D_{ii}^{(\alpha)}(\hat{G}_p)^* \left(\sum_{k=1}^{d_\alpha} D_{jk}^{(\beta)}(\hat{G}_p) D_{kj}^{(\beta)}(\hat{G}_q^\dagger)\right)\hat{G}_q \\
&= \frac{d_\alpha d_\beta}{g^2}\sum_{k=1}^{d_\alpha}\left(\sum_{p=1}^{g} D_{ii}^{(\alpha)}(\hat{G}_p)^* D_{jk}^{(\beta)}(\hat{G}_p)\right)\sum_{q=1}^{g} D_{kj}^{(\beta)}(\hat{G}_q)^*\hat{G}_q \\
&\overset{②}{=} \frac{d_\alpha d_\beta}{g^2}\sum_{k=1}^{d_\alpha}\frac{g}{d_\alpha}\delta_{\alpha\beta}\delta_{ij}\delta_{ik}\sum_{q=1}^{g} D_{kj}^{(\beta)}(\hat{G}_q)^*\hat{G}_q \\
&= \delta_{\alpha\beta}\delta_{ij}\frac{d_\alpha}{g}\sum_{p=1}^{g} D_{ii}^{(\alpha)}(\hat{G}_p)^*\hat{G}_p \\
&= \delta_{\alpha\beta}\delta_{ij}\hat{P}_i^{[\alpha]} = \begin{cases} \hat{P}_i^{[\alpha]} & (\alpha=\beta, i=j) \\ \hat{0} & (\text{上記以外}) \end{cases}
\end{aligned} \tag{6.2.33}$$

である。等式①において射影演算子がエルミート演算子であることを用いた。また，等式②において大直交性定理 (6.2.6) を用いた。以上より，(6.2.31)，したがっ

[20] V の既約不変部分空間による直交直和分解に既約不変部分空間 $W^{(\alpha)}$ が q_α 回現れるとすると，$\hat{P}^{[\alpha]}$ はこれら q_α 個の $W^{(\alpha)}$ の直交直和 (q_α が 2 以上のときは既約ではありません) への正射影です。

て，(6.2.32) が示された。 ■

V の $\mathscr{G}$ に関する既約不変部分空間による直交直和分解において既約表現 α に属する既約不変部分空間が複数現れる場合，$\hat{P}^{[\alpha]}$ はこれら既約表現 α に属する複数の既約不変部分空間の和空間への正射影であることに注意されたい。例えば，既約表現 α に属する 2 つの既約不変部分空間 $W^{(\alpha)}$ と $W'^{(\alpha)}$ が V の直交直和分解に現れるとすると，$\hat{P}^{[\alpha]}$ は和空間 $W^{(\alpha)}+W'^{(\alpha)}$ への正射影である。つまり，$\hat{P}^{[\alpha]}$ は $W^{(\alpha)}$，$W'^{(\alpha)}$ への正射影 $\hat{P}^{(\alpha)}_{W}$，$\hat{P}^{(\alpha)}_{W'}$ の和として $\hat{P}^{[\alpha]}=\hat{P}^{(\alpha)}_{W}+\hat{P}^{(\alpha)}_{W'}$ と書ける。

6.2.5 正則表現

群 $\mathscr{G}=\{\hat{G}_1,\cdots,\hat{G}_g\}$ によりラベルされた正規直交基底 $\{\,|\hat{G}_1\rangle\,,\cdots,\,|\hat{G}_g\rangle\}$ によって張られる g 次元の内積空間を $V^{(\mathrm{reg})}$ とする[21]。$\hat{G}_p\,|\hat{G}_j\rangle=|\hat{G}_p\hat{G}_j\rangle$ と定義すると，$\hat{G}_1,\cdots,\hat{G}_g$ は $V^{(\mathrm{reg})}$ の線形変換となる。正規直交基底 $\{\,|\hat{G}_1\rangle\,,\cdots,\,|\hat{G}_g\rangle\}$ による $\hat{G}_p$ の行列表現 $D^{(\mathrm{reg})}(\hat{G}_p)$ を

$$\hat{G}_p[\,|\hat{G}_1\rangle\ \cdots\ |\hat{G}_g\rangle\,]=[\,|\hat{G}_1\rangle\ \cdots\ |\hat{G}_g\rangle\,]D^{(\mathrm{reg})}(\hat{G}_p) \tag{6.2.34}$$

によって定義する。$D^{(\mathrm{reg})}(\hat{G}_p)$ は g 次のユニタリ行列であり，その (i,j) 成分 $D^{(\mathrm{reg})}_{ij}(\hat{G}_p)=\langle\hat{G}_i|\hat{G}_p|\hat{G}_j\rangle$ は

$$D^{(\mathrm{reg})}_{ij}(\hat{G}_p)=\begin{cases}1 & (\hat{G}_i=\hat{G}_p\hat{G}_j)\\ 0 & (\text{上記以外})\end{cases} \tag{6.2.35}$$

である。(6.2.34) によって定義されたユニタリ行列の組 $D^{(\mathrm{reg})}=\{D^{(\mathrm{reg})}(\hat{G}_1),\cdots,D^{(\mathrm{reg})}(\hat{G}_g)\}$ を $\mathscr{G}$ の**正則表現**という[22]。$D^{(\mathrm{reg})}(\hat{G}_1),\cdots,D^{(\mathrm{reg})}(\hat{G}_g)$ は行列の通常の和とスカラー倍に関して線形独立であることに注意されたい[23]。正則表現の指標

[21] このように群 $\mathscr{G}$ でラベルされた基底によって張られる線形空間であって，$|\hat{G}_p\rangle\,|\hat{G}_q\rangle=|\hat{G}_p\hat{G}_q\rangle$ によって元の間に積が定義された集合のことを**群環**といいます。詳細については参考文献 [23] を参照してください。

[22] 本書では参考文献 [19] にしたがって $V^{(\mathrm{reg})}$ の基底を $\{\,|\hat{G}_1\rangle\,,\cdots,\,|\hat{G}_g\rangle\}$ として $D^{(\mathrm{reg})}$ を定義することにします。これは左正則表現とよばれます。文献によっては $V^{(\mathrm{reg})}$ の基底を $\{\,|\hat{G}_1^{-1}\rangle\,,\cdots,\,|\hat{G}_g^{-1}\rangle\}$ として $D^{(\mathrm{reg})}$ を定義しているものもあります。こちらは右正則表現とよばれます。

[23] $V^{(\mathrm{reg})}$ の正規直交基底 $\{\,|\hat{G}_1\rangle\,,\cdots,\,|\hat{G}_g\rangle\}$ に対応する標準基底を $\{\boldsymbol{e}_1,\cdots,\boldsymbol{e}_g\}$ とすると，$D^{(\mathrm{reg})}(\hat{G}_p)$ の第 1 列は $\boldsymbol{e}_p$ になっています。したがって，$D^{(\mathrm{reg})}(\hat{G}_1),\cdots,D^{(\mathrm{reg})}(\hat{G}_g)$ は行列の通常の和とスカラー倍に関して明らかに線形独立です。

$\chi^{(\mathrm{reg})} = \{\chi^{(\mathrm{reg})}(\hat{G}_1), \cdots, \chi^{(\mathrm{reg})}(\hat{G}_g)\}$ は，(6.2.35) より，

$$\chi^{(\mathrm{reg})}(\hat{G}_p) = \begin{cases} g & (\hat{G}_p = \hat{G}_1 (= \hat{E})) \\ 0 & (\text{上記以外}) \end{cases} \tag{6.2.36}$$

となる。したがって，正則表現の既約分解において既約表現 α が現れる回数 q_α は，(6.2.26) より，

$$q_\alpha = d_\alpha \tag{6.2.37}$$

となる。つまり，

$$\chi^{(\mathrm{reg})}(\hat{G}_p) = \sum_{\alpha=1}^{n_r} d_\alpha \chi^{(\alpha)}(\hat{G}_p) \tag{6.2.38}$$

が成り立つ。(6.2.38) において $\hat{G}_p$ を $\hat{G}_1 = \hat{E}$ とすると，$\chi^{(\alpha)}(\hat{E}) = d_\alpha$ より，

$$\sum_{\alpha=1}^{n_r} d_\alpha^2 = g \tag{6.2.39}$$

となり，再び (6.2.23) を得る。一方，$\hat{G}_p \neq \hat{G}_1 (= \hat{E})$ とすると，

$$\sum_{\alpha=1}^{n_r} d_\alpha \chi^{(\alpha)}(\hat{G}_p) = 0 \tag{6.2.40}$$

である。

$V^{(\mathrm{reg})}$ の 1 次元部分空間 $\mathrm{span}(\,|\hat{G}_1\rangle + \cdots + |\hat{G}_g\rangle)$ を W とする。W の元 $|A\rangle = \lambda(\,|\hat{G}_1\rangle + \cdots + |\hat{G}_g\rangle)$ に対して $\hat{G}_p\,(p = 1, \cdots, g)$ は

$$\hat{G}_p\,|A\rangle = |A\rangle \tag{6.2.41}$$

と作用するから，明らかに W は $\mathscr{G}$ に関する既約不変部分空間である。この既約表現を D とすると，(6.2.41) よりすべての $\hat{G}_p$ に対して $D(\hat{G}_p) = 1$ であり，したがって，D の指標 χ の値もすべての $\hat{G}_p$ に対して $\chi(\hat{G}_p) = 1$ である。この 1 次元の既約表現を**恒等表現**という。恒等表現はすべての群がもつ既約表現である。

正則表現を用いて §6.2.3 において述べた (6.2.19)

$$\text{共役類の個数} = \text{既約表現の個数}$$

を証明する[24]。

[(6.2.19) の証明] 内積空間 V においてユニタリ演算子のなす群 $\mathscr{G} = \{\hat{G}_1, \cdots, \hat{G}_g\}$

[24]参考文献 [23] の定理 8.9(p.271) の証明を参考にしています。

を考え, $\mathscr{G}$ の共役類を $\mathscr{C}_1, \cdots, \mathscr{C}_{n_c}$ とする。類関数全体のなす n_c 次元の列ベクトル空間 $\mathbb{C}^{n_c}$ において $\mathscr{G}$ の既約指標の組 $\{\chi^{(1)}, \cdots, \chi^{(n_r)}\}$ を正規直交基底とする部分空間を U, その直交補空間を $U^\perp$ とする。$\mathbb{C}^{n_c} = U \oplus U^\perp$, $\dim U = n_r$, $\dim U^\perp = n_c - n_r$ である。f を $U^\perp$ に属する類関数として,

$$\hat{F} = \sum_{p=1}^{g} f(\hat{G}_p)^* \hat{G}_p \tag{6.2.42}$$

とおく。ここで, $f(\hat{G}_p)$ は $\hat{G}_p$ の属する共役類 $\mathscr{C}_\kappa$ における f の値 $f(\mathscr{C}_\kappa)$ を表すものとする。$\mathscr{G}$ に関する既約不変部分空間 $W^{(1)}, \cdots, W^{(\rho)}$ による V の直交直和分解を $V = W^{(1)} \oplus \cdots \oplus W^{(\rho)}$ とする。同じ既約表現に属する複数の既約不変部分空間が現れてもよい。$W^{(1)}, \cdots, W^{(\rho)}$ に対応する正射影の組を $\hat{P}^{(1)}, \cdots, \hat{P}^{(\rho)}$ とし, $\hat{F}^{(\alpha)} = \hat{P}^{(\alpha)}\hat{F}$ および $\hat{G}_p^{(\alpha)} = \hat{P}^{(\alpha)}\hat{G}_p\,(p = 1, \cdots, g)$ とおくと,

$$\hat{F} = \hat{F}^{(1)} + \cdots + \hat{F}^{(\rho)} \qquad \hat{F}^{(\alpha)} = \sum_{p=1}^{g} f(\hat{G}_p)^* \hat{G}_p^{(\alpha)}\ (\alpha = 1, \cdots, \rho) \tag{6.2.43}$$

である。$f(\hat{G}_p) = f(\mathscr{C}_\kappa)$ よりすべての $\hat{G}_p^{(\alpha)}$ に対して, $\hat{G}_p^{(\alpha)}\hat{F}^{(\alpha)}\hat{G}_p^{(\alpha)-1} = \hat{F}^{(\alpha)}$, つまり, $\hat{F}^{(\alpha)}\hat{G}_p^{(\alpha)} = \hat{G}_p^{(\alpha)}\hat{F}^{(\alpha)}$ であるから, シューアの補題 (6.2.4) より $\hat{F}^{(\alpha)} = \lambda\hat{P}^{(\alpha)}$ でなければならない。一方, f は $U^\perp$ に属する類関数であるから, $\operatorname{tr}\hat{G}_p^{(\alpha)} = \chi^{(\alpha)}(\hat{G}_p)$ より,

$$\frac{1}{g}\operatorname{tr}\hat{F}^{(\alpha)} = \frac{1}{g}\sum_{p=1}^{g} f(\hat{G}_p)^*\chi^{(\alpha)}(\hat{G}_p) = \frac{1}{g}\sum_{\kappa=1}^{n_c} h_\kappa f(\mathscr{C}_\kappa)^*\chi^{(\alpha)}(\mathscr{C}_\kappa) = (f, \chi^{(\alpha)}) = 0 \tag{6.2.44}$$

である。ここで, h_κ は $\mathscr{C}_\kappa$ に属する元の個数である。$\operatorname{tr}\hat{F}^{(\alpha)} = \lambda\operatorname{tr}\hat{P}^{(\alpha)} = \lambda d_\alpha = 0$ より $\lambda = 0$ であるから, $\hat{F} = \hat{F}^{(1)} + \cdots + \hat{F}^{(\rho)} = \hat{0}$, つまり,

$$\sum_{p=1}^{g} f(\hat{G}_p)^*\hat{G}_p = \hat{0} \tag{6.2.45}$$

である。(6.2.45) を正則表現に対して適用しよう。(6.2.45) は正則表現 $D^{(\mathrm{reg})}(\hat{G}_1)$, $\cdots, D^{(\mathrm{reg})}(\hat{G}_g)$ を用いて表すと

$$\sum_{p=1}^{g} f(\hat{G}_p)^* D^{(\mathrm{reg})}(\hat{G}_p) = O \tag{6.2.46}$$

と書ける。ここで, O は g 次の零行列である。$D^{(\mathrm{reg})}(\hat{G}_1), \cdots, D^{(\mathrm{reg})}(\hat{G}_g)$ は行列の通常の和とスカラー倍に関して線形独立であるから, すべての $\hat{G}_p$ に対して $f(\hat{G}_p) = 0$

でなければならない。したがって，$U^{\perp}=\{\mathbf{0}\}$ より，$U=\mathbb{C}^{n_c}$，つまり，$n_c=n_r$ を得る。以上より，(6.2.19) が示された。 ■

6.2.6 積表現

群 $\mathscr{G}=\{G_1,\cdots,G_g\}$ に対応して，d_α 次元の内積空間 $V^{(\alpha)}$ のユニタリ演算子の組 $\mathscr{G}^{(\alpha)}=\{\hat{G}_1^{(\alpha)},\cdots,\hat{G}_g^{(\alpha)}\}$，および，$d_\beta$ 次元の内積空間 $V^{(\beta)}$ のユニタリ演算子の組 $\mathscr{G}^{(\beta)}=\{\hat{G}_1^{(\beta)},\cdots,\hat{G}_g^{(\beta)}\}$ を考える。ここで，$V^{(\alpha)}$，$V^{(\beta)}$ は $\mathscr{G}$ の表現 α，β に属する表現空間であるとする。$V^{(\alpha)}$ と $V^{(\beta)}$ のテンソル積を $V^{(\alpha\times\beta)}=V^{(\alpha)}\otimes V^{(\beta)}$ とし[25]，$\hat{G}_p^{(\alpha\times\beta)}=\hat{G}_p^{(\alpha)}\otimes\hat{G}_p^{(\beta)}$ とおくと，$\mathscr{G}^{(\alpha\times\beta)}=\{\hat{G}_1^{(\alpha\times\beta)},\cdots,\hat{G}_g^{(\alpha\times\beta)}\}$ も $\mathscr{G}$ に対応する $V^{(\alpha\times\beta)}$ のユニタリ演算子の組となる。$V^{(\alpha)}$，$V^{(\beta)}$ の正規直交基底 $e^{(\alpha)}=\{\,|e_1^{(\alpha)}\rangle,\cdots,|e_{d_\alpha}^{(\alpha)}\rangle\}$，$e^{(\beta)}=\{\,|e_1^{(\beta)}\rangle,\cdots,|e_{d_\beta}^{(\beta)}\rangle\}$ を用いて $e^{(\alpha\times\beta)}=\{\,|e_i^{(\alpha)}e_k^{(\beta)}\rangle\mid i=1,\cdots,d_\alpha;k=1,\cdots,d_\beta\}$ とすると，$e^{(\alpha\times\beta)}$ は $V^{(\alpha\times\beta)}$ の正規直交基底となる。基底 $e^{(\alpha)}$ による $\mathscr{G}^{(\alpha)}$ の行列表現を $D^{(\alpha)}=\{D^{(\alpha)}(\hat{G}_1^{(\alpha)}),\cdots,D^{(\alpha)}(\hat{G}_g^{(\alpha)})\}$，基底 $e^{(\beta)}$ による $\mathscr{G}^{(\beta)}$ の行列表現を $D^{(\beta)}=\{D^{(\beta)}(\hat{G}_1^{(\beta)}),\cdots,D^{(\beta)}(\hat{G}_g^{(\beta)})\}$ とする。このとき，$D^{(\alpha\times\beta)}(\hat{G}_p^{(\alpha\times\beta)})=D^{(\alpha)}(\hat{G}_p^{(\alpha)})\otimes D^{(\beta)}(\hat{G}_p^{(\beta)})$ とおくと，基底 $e^{(\alpha\times\beta)}$ による $\mathscr{G}^{(\alpha\times\beta)}$ の行列表現は $D^{(\alpha\times\beta)}=\{D^{(\alpha\times\beta)}(\hat{G}_1^{(\alpha\times\beta)}),\cdots,D^{(\alpha\times\beta)}(\hat{G}_g^{(\alpha\times\beta)})\}$ と表せる。$D^{(\alpha\times\beta)}$ あるいは $\alpha\times\beta$ を表現 α と β の**積表現**という。表現 α と β が既約であっても，積表現 $\alpha\times\beta$ は必ずしも既約であるとは限らないことに注意せよ。$V^{(\alpha\times\beta)}$ が $\mathscr{G}^{(\alpha\times\beta)}$ に関する既約不変部分空間の組 $W^{(1)},\cdots,W^{(\rho)}$ によって $V^{(\alpha\times\beta)}=W^{(1)}\oplus\cdots\oplus W^{(\rho)}$ と直交直和分解されるとする。この直交直和分解において既約表現 γ に属する既約不変部分空間が現れる回数 q_γ は，(6.2.26) により，

$$q_\gamma=\frac{1}{g}\sum_{\kappa=1}^{n_c}h_\kappa\chi^{(\gamma)}(\mathscr{C}_\kappa)^*\chi^{(\alpha\times\beta)}(\mathscr{C}_\kappa) \tag{6.2.47}$$

となる。ここで，$\chi^{(\alpha\times\beta)}$ は積表現 $\alpha\times\beta$ の指標，つまり，G_p を $\mathscr{C}_\kappa$ の代表として $\chi^{(\alpha\times\beta)}(\mathscr{C}_\kappa)=\operatorname{tr}\hat{G}_p^{(\alpha\times\beta)}$ であり，(4.1.14) より，

$$\chi^{(\alpha\times\beta)}(\mathscr{C}_\kappa)=\chi^{(\alpha)}(\mathscr{C}_\kappa)\chi^{(\beta)}(\mathscr{C}_\kappa) \tag{6.2.48}$$

で与えられる。ここで，$\chi^{(\alpha)}$，$\chi^{(\beta)}$ は α，β の指標，つまり，$\chi^{(\alpha)}(\mathscr{C}_\kappa)=\operatorname{tr}\hat{G}_p^{(\alpha)}$，$\chi^{(\beta)}(\mathscr{C}_\kappa)=\operatorname{tr}\hat{G}_p^{(\beta)}$ である。$W^{(1)},\cdots,W^{(\rho)}$ における既約表現 γ に属する n 番目の既約不変部分空間をあらためて $W^{(\gamma,n)}$ $(n=1,\cdots,q_\gamma)$ と表し，$W^{(\gamma,n)}$ の正規直交基底を $\{\,|f_1^{(\gamma,n)}\rangle,\cdots,|f_{d_\gamma}^{(\gamma,n)}\rangle\}$ とすると，$f^{(\alpha\times\beta)}=\{\,|f_m^{(\gamma,n)}\rangle\mid\gamma=1,\cdots,n_r;n=$

[25] テンソル積については第 4 章を参照してください。

$1, \cdots, q_\gamma; m = 1, \cdots, d_\gamma\}$ は $V^{(\alpha\times\beta)}$ の正規直交基底となる。正規直交基底 $e^{(\alpha\times\beta)}$ から正規直交基底 $f^{(\alpha\times\beta)}$ への基底変換は

$$|f_m^{(\gamma,n)}\rangle = \sum_{i=1}^{d_\alpha}\sum_{k=1}^{d_\beta} |e_i^{(\alpha)}e_k^{(\beta)}\rangle\langle e_i^{(\alpha)}e_k^{(\beta)}|f_m^{(\gamma,n)}\rangle \tag{6.2.49}$$

と表せる。(6.2.49) における基底変換の行列の成分 $\langle e_i^{(\alpha)}e_k^{(\beta)}|f_m^{(\gamma,n)}\rangle$ を**クレブシュ–ゴルダン係数**という。(6.2.49) を求めるには，積表現の射影演算子

$$\hat{P}^{[\gamma]} = \frac{d_\gamma}{g}\sum_{p=1}^{g}\chi^{(\gamma)}(G_p)^*\hat{G}_p^{(\alpha\times\beta)} \tag{6.2.50}$$

を利用できる。

==========

補足・計算例 39.

群の表現

例 1：補足・計算例 38 で取り上げた群 $\mathrm{C_{3v}}$ の既約表現について調べる。

(1) 既約指標

$\mathrm{C_{3v}} = \{E, C_3, C_3^2, \sigma_v, \sigma_v', \sigma_v''\}$ の共役類は $\mathscr{C}_1 = \{E\}$，$\mathscr{C}_2 = \{C_3, C_3^2\}$，$\mathscr{C}_3 = \{\sigma_v, \sigma_v', \sigma_v''\}$ の 3 個である。したがって，(6.2.19) より既約表現の個数も 3 個である。3 個の既約表現を $D^{(1)}$，$D^{(2)}$，$D^{(3)}$ とし，それらの次元を d_1，d_2，d_3 $(d_1 \le d_2 \le d_3)$，指標を $\chi^{(1)}$，$\chi^{(2)}$，$\chi^{(3)}$ とする。$\mathrm{C_{3v}}$ の位数は 6 であるから，(6.2.23) より，$d_1^2 + d_2^2 + d_3^2 = 6$ である。これは $d_1 = 1$，$d_2 = 1$，$d_3 = 2$ のときにのみ満たされる。まず，1 次元の既約表現のうち一つは恒等表現であるから，$D^{(1)}$ を恒等表現とすると，$D^{(1)} = \{D^{(1)}(E), D^{(1)}(C_3), D^{(1)}(C_3^2), D^{(1)}(\sigma_v), D^{(1)}(\sigma_v'), D^{(1)}(\sigma_v''),\} = \{1,1,1,1,1,1\}$，$\chi^{(1)} = \{\chi^{(1)}(\mathscr{C}_1), \chi^{(1)}(\mathscr{C}_2), \chi^{(1)}(\mathscr{C}_3)\} = \{1,1,1\}$ である。次に，もう一つの 1 次元の既約表現 $D^{(2)} = \{D^{(2)}(E), D^{(2)}(C_3), D^{(2)}(C_3^2), D^{(2)}(\sigma_v), D^{(2)}(\sigma_v'), D^{(2)}(\sigma_v''),\}$ について考える。1 次元表現であるから $D^{(2)}(E) = 1$ である。$C_3^3 = E$ より $D^{(2)}(C_3)^3 = 1$ であり，また，C_3 と C_3^2 はともに $\mathscr{C}_2$ に属するから $\chi^{(2)}(C_3) = \chi^{(2)}(C_3^2)$ でなければならない。つまり，$D^{(2)}(C_3) = D^{(2)}(C_3^2) = D^{(2)}(C_3)^2$ である。したがって，$D^{(2)}(C_3) = D^{(2)}(C_3^2) = 1$ である。σ_v，σ_v'，σ_v'' は 2 乗すると E となるから，$D^{(2)}(\sigma_v)^2 = D^{(2)}(\sigma_v')^2 = D^{(2)}(\sigma_v'')^2 = 1$ である。また，σ_v，σ_v'，σ_v'' はすべて $\mathscr{C}_3$ に属するから $\chi^{(2)}(\sigma_v) = \chi^{(2)}(\sigma_v') = \chi^{(2)}(\sigma_v'')$ でなければならない。したがって，$D^{(2)}$ は恒等表現ではないとしているから，$D^{(2)}(\sigma_v) = D^{(2)}(\sigma_v') = D^{(2)}(\sigma_v'') = -1$ および $\chi^{(2)}(\mathscr{C}_3) = -1$ である。$D^{(2)}$ についてまとめると，$D^{(2)} = \{D^{(2)}(E), D^{(2)}(C_3), D^{(2)}(C_3^2), D^{(2)}(\sigma_v), D^{(2)}(\sigma_v'), D^{(2)}(\sigma_v''),\} = \{1,1,1,-1,-1,-1\}$，$\chi^{(2)} = \{\chi^{(2)}(\mathscr{C}_1), \chi^{(2)}(\mathscr{C}_2), \chi^{(2)}(\mathscr{C}_3)\} = \{1,1,-1\}$ である。最後に 2 次元の既約表現 $D^{(3)}$ の指標 $\chi^{(3)}$ を指標の第 1 種直交性 (6.2.16) から決定しよう。$\chi^{(3)}(\mathscr{C}_1) + 2\chi^{(3)}(\mathscr{C}_2) + 3\chi^{(3)}(\mathscr{C}_3) = 0$ および $\chi^{(3)}(\mathscr{C}_1) + 2\chi^{(3)}(\mathscr{C}_2) - 3\chi^{(3)}(\mathscr{C}_3) = 0$ である。$D^{(3)}$ は 2 次元の表現であるから，$\chi^{(3)}(\mathscr{C}_1) = 2$ である。これを用いると，$\chi^{(3)}(\mathscr{C}_2) = -1$，$\chi^{(3)}(\mathscr{C}_3) = 0$ となる。したがって，$D^{(3)}$ の指標は $\chi^{(3)} = \{2, -1, 0\}$ である。以上をまとめると $\mathrm{C_{3v}}$ の指標表 6.2 が得られる。なお，以下では既約表現 $D^{(1)}$，$D^{(2)}$，$D^{(3)}$ をマリケン記号を用いて $\mathrm{A_1}$，$\mathrm{A_2}$，E によって表すことにする。

(2) 既約表現の基底関数

3 変数関数の関数空間におけるユニタリ演算子のなす群 $\mathrm{C_{3v}} = \{\hat{E}, \hat{C}_3, \hat{C}_3^2, \hat{\sigma}_v, \hat{\sigma}_v', \hat{\sigma}_v''\}$ の既約表現の基底関数について調べる。まず，図 6.2 に示すような s 型関数の組 $e^{(\mathrm{s})} = \{\,|\mathrm{s}_1\rangle\,, |\mathrm{s}_2\rangle\,, |\mathrm{s}_3\rangle\}$ を正規直

交基底とする $\mathrm{C_{3v}}$ に関する不変部分空間 $W^{(\mathrm{s})}$ を考える[26]。ここで，$|\mathrm{s}_2\rangle = \hat{C}_3\,|\mathrm{s}_1\rangle$，$|\mathrm{s}_3\rangle = \hat{C}_3^2\,|\mathrm{s}_1\rangle$ である。また，$W^{(\mathrm{s})}$ における $\mathrm{C_{3v}}$ の表現を $D^{(\mathrm{s})}$ とする。

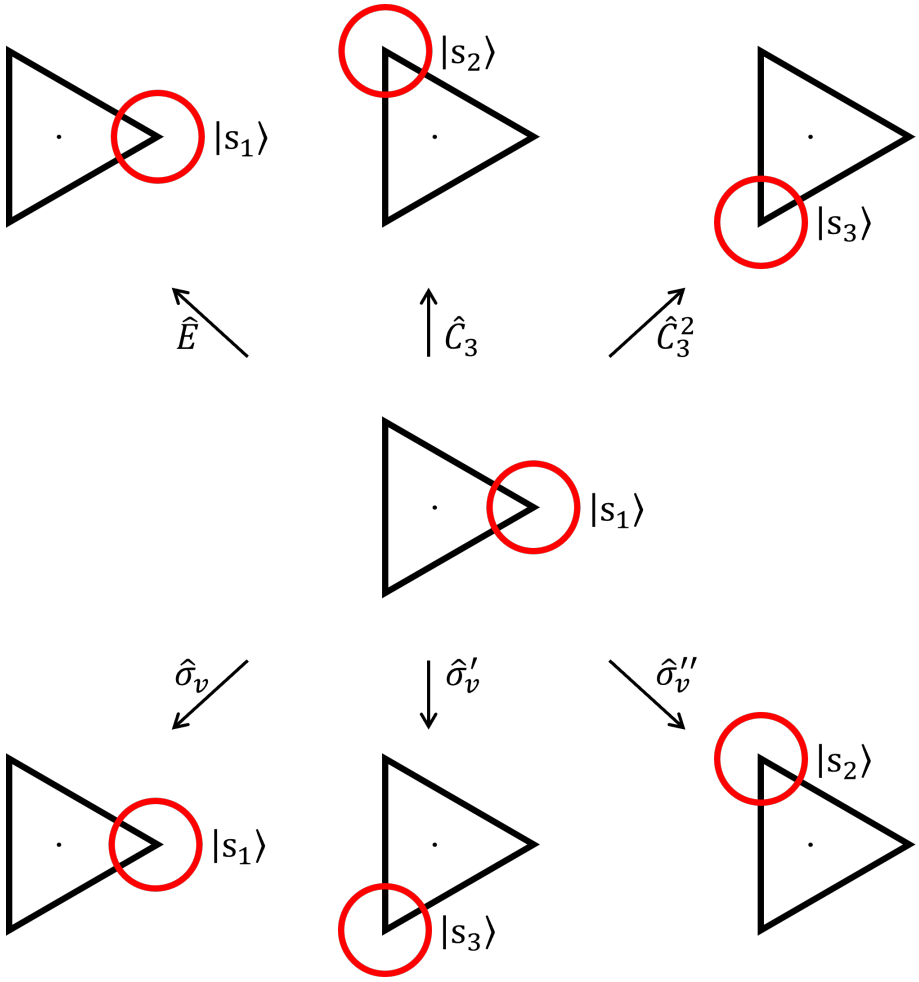


図 6.2: $\mathrm{C_{3v}}$ の対称操作の s 型関数に対する作用 ($|\mathrm{s}_1\rangle$ の場合)

$D^{(\mathrm{s})}$ の指標を $\chi^{(\mathrm{s})}$ とする。$\mathrm{C_{3v}}$ の元 $\hat{G}_p$ に対して $\chi^{(\mathrm{s})}(\hat{G}_p) = \sum_{i=1}^{3} \langle \mathrm{s}_i|\hat{G}_p|\mathrm{s}_i\rangle$ であるから，$\chi^{(\mathrm{s})}(\hat{G}_p)$ を求めるには, $\hat{G}_p\,|\mathrm{s}_i\rangle = |\mathrm{s}_i\rangle$, つまり, $\hat{G}_p$ の作用で動かない $|\mathrm{s}_i\rangle$ の個数を計算すればよい。$\chi^{(\mathrm{s})}(\mathscr{C}_1) = 3$，$\chi^{(\mathrm{s})}(\mathscr{C}_2) = 0$，$\chi^{(\mathrm{s})}(\mathscr{C}_3) = 1$ である。(6.2.26) を用いて $D^{(\mathrm{s})}$ を簡約すると，$(\chi^{(\mathrm{A_1})}, \chi^{(\mathrm{s})}) = 1$，$(\chi^{(\mathrm{A_2})}, \chi^{(\mathrm{s})}) = 0$，$(\chi^{(\mathrm{E})}, \chi^{(\mathrm{s})}) = 1$ より，$D^{(\mathrm{s})} = D^{(\mathrm{A_1})} \oplus D^{(\mathrm{E})}$ となる。射影演算子 (6.2.30) を用いて既約表現 $\mathrm{A_1}$ の関数を求めると，

$$\hat{P}^{[\mathrm{A_1}]}\,|\mathrm{s}_1\rangle = \frac{1}{6}(\hat{E} + \hat{C}_3 + \hat{C}_3^2 + \hat{\sigma}_v + \hat{\sigma}_v' + \hat{\sigma}_v'')\,|\mathrm{s}_1\rangle = \frac{1}{3}(\,|\mathrm{s}_1\rangle + |\mathrm{s}_2\rangle + |\mathrm{s}_3\rangle) \tag{6.2.51}$$

[26] s 型関数とは原子の s 軌道のようにある点を中心として等方的な関数，つまり，中心の周りに球対称な関数のことです。

を得る。$\hat{P}^{[\mathrm{A}_1]}\,|\mathrm{s}_2\rangle$，$\hat{P}^{[\mathrm{A}_1]}\,|\mathrm{s}_3\rangle$ も (6.2.51) と同じ関数となる。(6.2.51) を正規化して

$$|\varphi^{(\mathrm{A}_1)}\rangle = \frac{1}{\sqrt{3}}(\,|\mathrm{s}_1\rangle + |\mathrm{s}_2\rangle + |\mathrm{s}_3\rangle) \tag{6.2.52}$$

を A_1 の基底関数とする。既約表現 E については 2 個の直交した基底関数を求める必要がある。そこで，

$$\hat{P}^{[\mathrm{E}]}\,|\mathrm{s}_1\rangle = \frac{1}{3}(2\hat{E} - \hat{C}_3 - \hat{C}_3^2)\,|\mathrm{s}_1\rangle = \frac{1}{3}(2\,|\mathrm{s}_1\rangle - |\mathrm{s}_2\rangle - |\mathrm{s}_3\rangle) \tag{6.2.53}$$

および

$$\hat{P}^{[\mathrm{E}]}(\,|\mathrm{s}_2\rangle - |\mathrm{s}_3\rangle) = \frac{1}{3}(2\hat{E} - \hat{C}_3 - \hat{C}_3^2)(\,|\mathrm{s}_2\rangle - |\mathrm{s}_3\rangle) = |\mathrm{s}_2\rangle - |\mathrm{s}_3\rangle \tag{6.2.54}$$

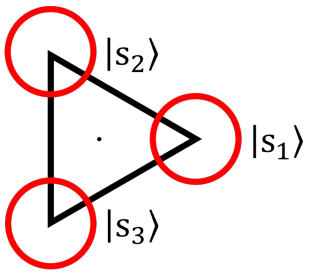
とすると，これらは互いに直交する関数であることがわかる[27]。(6.2.53)，(6.2.54) を正規化して

$$|\varphi_1^{(\mathrm{E})}\rangle = \frac{1}{\sqrt{6}}(2\,|\mathrm{s}_1\rangle - |\mathrm{s}_2\rangle - |\mathrm{s}_3\rangle) \qquad |\varphi_2^{(\mathrm{E})}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(\,|\mathrm{s}_2\rangle - |\mathrm{s}_3\rangle) \tag{6.2.55}$$

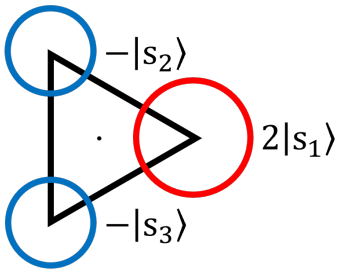
を E の基底関数とする。

[27] より系統的に基底関数を求めるにはグラム–シュミットの直交化法などを用いることになります。

$$\left|\varphi^{(\mathrm{A}_1)}\right\rangle = \frac{1}{\sqrt{3}}(|\mathrm{s}_1\rangle + |\mathrm{s}_2\rangle + |\mathrm{s}_3\rangle)$$



$$\left|\varphi_1^{(\mathrm{E})}\right\rangle = \frac{1}{\sqrt{6}}(2|\mathrm{s}_1\rangle - |\mathrm{s}_2\rangle - |\mathrm{s}_3\rangle)$$



$$\left|\varphi_2^{(\mathrm{E})}\right\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\mathrm{s}_2\rangle - |\mathrm{s}_3\rangle)$$

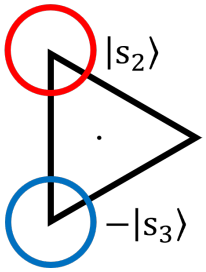


図 6.3: $\mathrm{C}_{3\mathrm{v}}$ の既約表現 A_1，E の基底関数

次に，図 6.4 に示すような p 型関数の組 $e^{(\mathrm{p})} = \{\,|\mathrm{p}_1\rangle\,, |\mathrm{p}_2\rangle\,, |\mathrm{p}_3\rangle\}$ を正規直交基底とする $\mathrm{C}_{3\mathrm{v}}$ に関する不変部分空間 $W^{(\mathrm{p})}$ を考える[28]。ここで，$|\mathrm{p}_2\rangle = \hat{C}_3\,|\mathrm{p}_1\rangle$，$|\mathrm{p}_3\rangle = \hat{C}_3^2\,|\mathrm{p}_1\rangle$ である。また，$W^{(\mathrm{p})}$ を表現空間とする $\mathrm{C}_{3\mathrm{v}}$ の表現を $D^{(\mathrm{p})}$ とする。

[28] p 型関数とは原子の p 軌道のようにある点を中心として反対称な関数のことです。

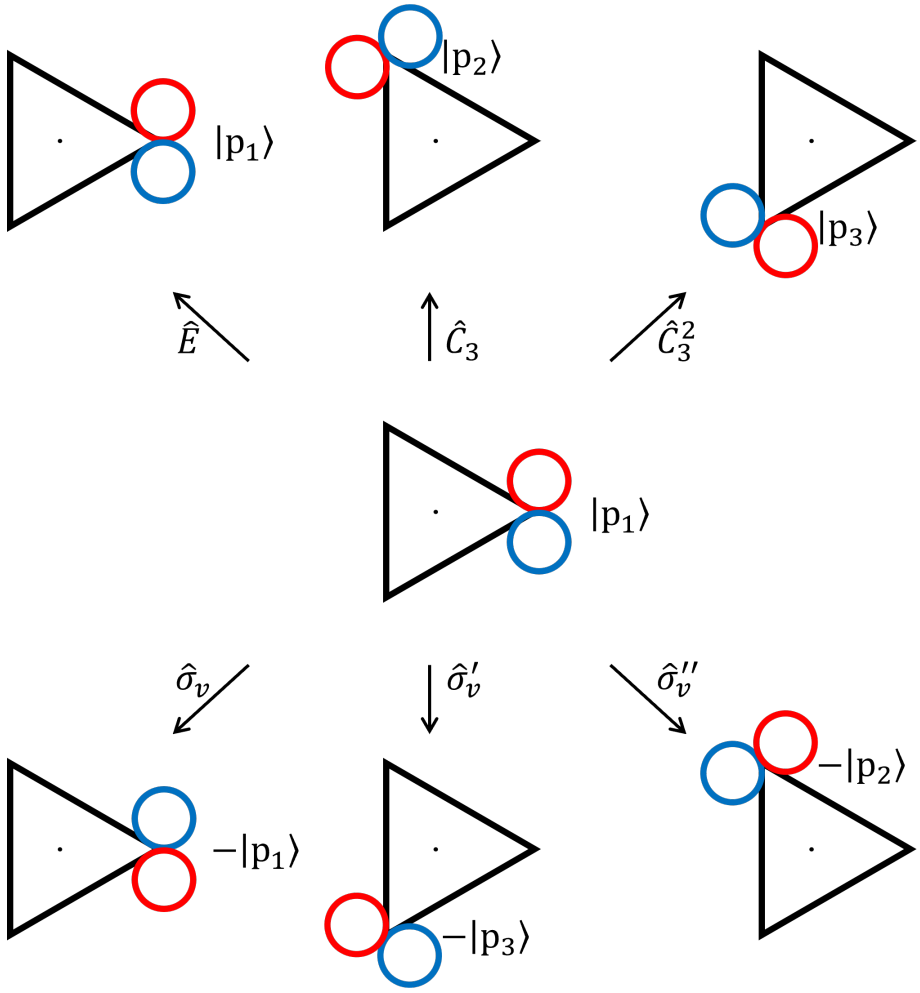


図 6.4: C_{3v} の対称操作の p 型関数に対する作用 ($|p_1\rangle$ の場合)

$D^{(p)}$ の指標を $\chi^{(p)}$ とする。C_{3v} の元 $\hat{G}_p$ に対して $\chi^{(p)}(\hat{G}_p) = \sum_{i=1}^{3} \langle p_i|\hat{G}_p|p_i\rangle$ であるから, $\chi^{(p)}(\hat{G}_p)$ を求めるには，$\hat{G}_p\,|p_i\rangle = |p_i\rangle$ または $\hat{G}_p\,|p_i\rangle = -\,|p_i\rangle$，つまり，$\hat{G}_p$ の作用で動かない $|p_i\rangle$ の個数を符号を考慮して計算すればよい。$\chi^{(p)}(\mathscr{C}_1) = 3$，$\chi^{(p)}(\mathscr{C}_2) = 0$，$\chi^{(p)}(\mathscr{C}_3) = -1$ である。(6.2.26) を用いて $D^{(p)}$ を簡約すると，$(\chi^{(A_1)}, \chi^{(p)}) = 0$，$(\chi^{(A_2)}, \chi^{(p)}) = 1$，$(\chi^{(E)}, \chi^{(p)}) = 1$ より，$D^{(p)} = D^{(A_2)} \oplus D^{(E)}$ となる。射影演算子 (6.2.30) を用いて既約表現 A_2 の関数を求めると，

$$\hat{P}^{[A_2]}\,|p_1\rangle = \frac{1}{6}(\hat{E} + \hat{C}_3 + \hat{C}_3^2 - \hat{\sigma}_v - \hat{\sigma}_v' - \hat{\sigma}_v'')\,|p_1\rangle = \frac{1}{3}(\,|p_1\rangle + |p_2\rangle + |p_3\rangle) \tag{6.2.56}$$

を得る。(6.2.56) を正規化して

$$|\varphi^{(A_2)}\rangle = \frac{1}{\sqrt{3}}(\,|p_1\rangle + |p_2\rangle + |p_3\rangle) \tag{6.2.57}$$

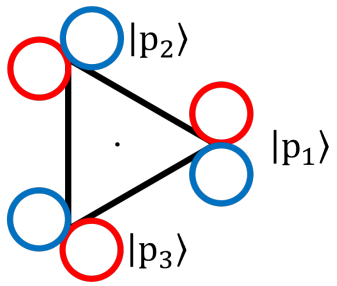
を A_2 の基底関数とする。E の基底関数はすでに s 型関数を用いた (6.2.55) として得られているが,

p 型関数によって

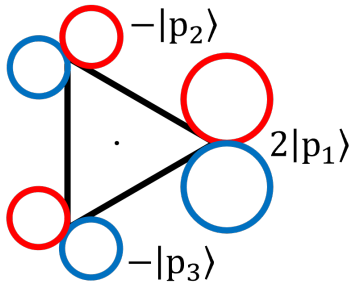
$$|\varphi_1^{(\mathrm{E})}\rangle = \frac{1}{\sqrt{6}}(2\,|\mathrm{p}_1\rangle - |\mathrm{p}_2\rangle - |\mathrm{p}_3\rangle) \qquad |\varphi_2^{(\mathrm{E})}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(\,|\mathrm{p}_2\rangle - |\mathrm{p}_3\rangle) \tag{6.2.58}$$

と表してもよい。

$$\left|\varphi^{(\mathrm{A}_2)}\right\rangle = \frac{1}{\sqrt{3}}(|\mathrm{p}_1\rangle + |\mathrm{p}_2\rangle + |\mathrm{p}_3\rangle)$$



$$\left|\varphi_1^{(\mathrm{E})}\right\rangle = \frac{1}{\sqrt{6}}(2|\mathrm{p}_1\rangle - |\mathrm{p}_2\rangle - |\mathrm{p}_3\rangle)$$



$$\left|\varphi_2^{(\mathrm{E})}\right\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\mathrm{p}_2\rangle - |\mathrm{p}_3\rangle)$$

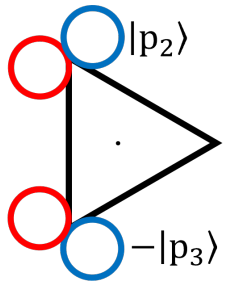


図 6.5: $\mathrm{C}_{3\mathrm{v}}$ の既約表現 A_2，E の基底関数

(3) 既約表現の行列表現

A_1，A_2 は 1 次元の既約表現であるから，その行列表現は指標そのものである。したがって，A_1 の行列表現は

$$\begin{array}{lll} D^{(\mathrm{A}_1)}(\hat{E}) = 1 & D^{(\mathrm{A}_1)}(\hat{C}_3) = 1 & D^{(\mathrm{A}_1)}(\hat{C}_3^2) = 1 \\ D^{(\mathrm{A}_1)}(\hat{\sigma}_v) = 1 & D^{(\mathrm{A}_1)}(\hat{\sigma}_v') = 1 & D^{(\mathrm{A}_1)}(\hat{\sigma}_v'') = 1 \end{array} \tag{6.2.59}$$

であり，A_2 の行列表現は

$$\begin{array}{lll} D^{(\mathrm{A}_2)}(\hat{E}) = 1 & D^{(\mathrm{A}_2)}(\hat{C}_3) = 1 & D^{(\mathrm{A}_2)}(\hat{C}_3^2) = 1 \\ D^{(\mathrm{A}_2)}(\hat{\sigma}_v) = -1 & D^{(\mathrm{A}_2)}(\hat{\sigma}_v') = -1 & D^{(\mathrm{A}_2)}(\hat{\sigma}_v'') = -1 \end{array} \tag{6.2.60}$$

である。E は 2 次元の既約表現であるから，その行列表現は用いる基底に依存する。まず，s 型関数を用いて得た基底関数 (6.2.55) による行列表現を計算する。$D^{(\mathrm{E})}(\hat{E})$ は 2 次の単位行列であるから，$\hat{E}$ 以外の演算子の行列表現を求める。例えば $\hat{C}_3$ については，

$$\begin{aligned}\hat{C}_3\,|\varphi_1^{(\mathrm{E})}\rangle &= \frac{1}{\sqrt{6}}(2\hat{C}_3\,|\mathrm{s}_1\rangle - \hat{C}_3\,|\mathrm{s}_2\rangle - \hat{C}_3\,|\mathrm{s}_3\rangle) = \frac{1}{\sqrt{6}}(2\,|\mathrm{s}_2\rangle - |\mathrm{s}_3\rangle - |\mathrm{s}_1\rangle)\\ \hat{C}_3\,|\varphi_2^{(\mathrm{E})}\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}(\hat{C}_3\,|\mathrm{s}_2\rangle - \hat{C}_3\,|\mathrm{s}_3\rangle) = \frac{1}{\sqrt{2}}(\,|\mathrm{s}_3\rangle - |\mathrm{s}_1\rangle)\end{aligned} \tag{6.2.61}$$

より，

$$\begin{aligned}D_{11}^{(E)}(\hat{C}_3) &= \langle\varphi_1^{(\mathrm{E})}|\hat{C}_3|\varphi_1^{(\mathrm{E})}\rangle = -\frac{1}{2} & D_{12}^{(E)}(\hat{C}_3) &= \langle\varphi_1^{(\mathrm{E})}|\hat{C}_3|\varphi_2^{(\mathrm{E})}\rangle = -\frac{\sqrt{3}}{2}\\ D_{21}^{(E)}(\hat{C}_3) &= \langle\varphi_2^{(\mathrm{E})}|\hat{C}_3|\varphi_1^{(\mathrm{E})}\rangle = \frac{\sqrt{3}}{2} & D_{22}^{(E)}(\hat{C}_3) &= \langle\varphi_2^{(\mathrm{E})}|\hat{C}_3|\varphi_2^{(\mathrm{E})}\rangle = -\frac{1}{2}\end{aligned} \tag{6.2.62}$$

である。同様の計算を行うと，s 型関数の基底関数 (6.2.55) による E の行列表現として

$$\begin{aligned}&D^{(\mathrm{E})}(\hat{E}) = \begin{bmatrix}1 & 0\\ 0 & 1\end{bmatrix} && D^{(\mathrm{E})}(\hat{C}_3) = \begin{bmatrix}-\frac{1}{2} & -\frac{\sqrt{3}}{2}\\ \frac{\sqrt{3}}{2} & -\frac{1}{2}\end{bmatrix} && D^{(\mathrm{E})}(\hat{C}_3^2) = \begin{bmatrix}-\frac{1}{2} & \frac{\sqrt{3}}{2}\\ -\frac{\sqrt{3}}{2} & -\frac{1}{2}\end{bmatrix}\\ &D^{(\mathrm{E})}(\hat{\sigma}_v) = \begin{bmatrix}1 & 0\\ 0 & -1\end{bmatrix} && D^{(\mathrm{E})}(\hat{\sigma}_v') = \begin{bmatrix}-\frac{1}{2} & -\frac{\sqrt{3}}{2}\\ -\frac{\sqrt{3}}{2} & \frac{1}{2}\end{bmatrix} && D^{(\mathrm{E})}(\hat{\sigma}_v'') = \begin{bmatrix}-\frac{1}{2} & \frac{\sqrt{3}}{2}\\ \frac{\sqrt{3}}{2} & \frac{1}{2}\end{bmatrix}\end{aligned} \tag{6.2.63}$$

を得る。次に，p 型関数を用いて得た基底関数 (6.2.58) による行列表現を計算する。例えば $\hat{C}_3$ については，

$$\begin{aligned}\hat{C}_3\,|\varphi_1^{(\mathrm{E})}\rangle &= \frac{1}{\sqrt{6}}(2\hat{C}_3\,|\mathrm{p}_1\rangle - \hat{C}_3\,|\mathrm{p}_2\rangle - \hat{C}_3\,|\mathrm{p}_3\rangle) = \frac{1}{\sqrt{6}}(2\,|\mathrm{p}_2\rangle - |\mathrm{p}_3\rangle - |\mathrm{p}_1\rangle)\\ \hat{C}_3\,|\varphi_2^{(\mathrm{E})}\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}(\hat{C}_3\,|\mathrm{p}_2\rangle - \hat{C}_3\,|\mathrm{p}_3\rangle) = \frac{1}{\sqrt{2}}(\,|\mathrm{p}_3\rangle - |\mathrm{p}_1\rangle)\end{aligned} \tag{6.2.64}$$

より，

$$\begin{aligned}D_{11}^{(E)}(\hat{C}_3) &= \langle\varphi_1^{(\mathrm{E})}|\hat{C}_3|\varphi_1^{(\mathrm{E})}\rangle = -\frac{1}{2} & D_{12}^{(E)}(\hat{C}_3) &= \langle\varphi_1^{(\mathrm{E})}|\hat{C}_3|\varphi_2^{(\mathrm{E})}\rangle = -\frac{\sqrt{3}}{2}\\ D_{21}^{(E)}(\hat{C}_3) &= \langle\varphi_2^{(\mathrm{E})}|\hat{C}_3|\varphi_1^{(\mathrm{E})}\rangle = \frac{\sqrt{3}}{2} & D_{22}^{(E)}(\hat{C}_3) &= \langle\varphi_2^{(\mathrm{E})}|\hat{C}_3|\varphi_2^{(\mathrm{E})}\rangle = -\frac{1}{2}\end{aligned} \tag{6.2.65}$$

である。同様の計算を行うと，p 型関数の基底関数 (6.2.55) による E の行列表現として

$$\begin{aligned}&D^{(\mathrm{E})}(\hat{E}) = \begin{bmatrix}1 & 0\\ 0 & 1\end{bmatrix} && D^{(\mathrm{E})}(\hat{C}_3) = \begin{bmatrix}-\frac{1}{2} & -\frac{\sqrt{3}}{2}\\ \frac{\sqrt{3}}{2} & -\frac{1}{2}\end{bmatrix} && D^{(\mathrm{E})}(\hat{C}_3^2) = \begin{bmatrix}-\frac{1}{2} & \frac{\sqrt{3}}{2}\\ -\frac{\sqrt{3}}{2} & -\frac{1}{2}\end{bmatrix}\\ &D^{(\mathrm{E})}(\hat{\sigma}_v) = \begin{bmatrix}-1 & 0\\ 0 & 1\end{bmatrix} && D^{(\mathrm{E})}(\hat{\sigma}_v') = \begin{bmatrix}\frac{1}{2} & \frac{\sqrt{3}}{2}\\ \frac{\sqrt{3}}{2} & -\frac{1}{2}\end{bmatrix} && D^{(\mathrm{E})}(\hat{\sigma}_v'') = \begin{bmatrix}\frac{1}{2} & -\frac{\sqrt{3}}{2}\\ -\frac{\sqrt{3}}{2} & -\frac{1}{2}\end{bmatrix}\end{aligned} \tag{6.2.66}$$

を得る。p 型関数の基底関数 (6.2.58) による E の行列表現 (6.2.66) は s 型関数の基底関数 (6.2.55) による E の行列表現 (6.2.63) と異なるが，これらの指標の値はまったく同じであるから，(6.2.63) と (6.2.66) は同値な表現である。実際，

$$\left[(6.2.63)\text{ の行列}\right] = \begin{bmatrix}0 & 1\\ -1 & 0\end{bmatrix}\left[(6.2.66)\text{ の行列}\right]\begin{bmatrix}0 & -1\\ 1 & 0\end{bmatrix} \tag{6.2.67}$$

となっており, (6.2.63) と (6.2.66) は互いに相似である。つまり, (6.2.58) の代わりに例えば $|\varphi_1^{(\mathrm{E})}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(\,|\mathrm{p}_2\rangle - |\mathrm{p}_3\rangle)$, $|\varphi_2^{(\mathrm{E})}\rangle = -\frac{1}{\sqrt{6}}(2\,|\mathrm{p}_1\rangle - |\mathrm{p}_2\rangle - |\mathrm{p}_3\rangle)$ ととると，この基底による E の行列表現は (6.2.63) と完全に一致する。

例 2：群 $\mathrm{C_{3v}}$ の既約表現 E どうしの積表現 $\mathrm{E}\times\mathrm{E}$ について調べる。
(1) 簡約
$\chi^{(\mathrm{E}\times\mathrm{E})}(\mathscr{C}_1) = \chi^{(\mathrm{E})}(\mathscr{C}_1)^2 = 2^2 = 4$，$\chi^{(\mathrm{E}\times\mathrm{E})}(\mathscr{C}_2) = \chi^{(\mathrm{E})}(\mathscr{C}_2)^2 = (-1)^2 = 1$，$\chi^{(\mathrm{E}\times\mathrm{E})}(\mathscr{C}_3) = \chi^{(\mathrm{E})}(\mathscr{C}_3)^2 = 0^2 = 0$ より，$(\chi^{(\mathrm{A}_1)}, \chi^{(\mathrm{E}\times\mathrm{E})}) = 1$，$(\chi^{(\mathrm{A}_2)}, \chi^{(\mathrm{E}\times\mathrm{E})}) = 1$，$(\chi^{(\mathrm{E})}, \chi^{(\mathrm{E}\times\mathrm{E})}) = 1$ である。したがって，$\mathrm{E}\times\mathrm{E} = \mathrm{A}_1 + \mathrm{A}_2 + \mathrm{E}$ となる。

(2) 基底関数
例 1 で求めた (6.2.55) の $|\varphi_1^{(\mathrm{E})}\rangle$，$|\varphi_2^{(\mathrm{E})}\rangle$ を用いて $\mathrm{E}\times\mathrm{E}$ の正規直交基底を $e^{(\mathrm{E}\times\mathrm{E})} = \{\,|\varphi_1^{(\mathrm{E})}\rangle \otimes |\varphi_1^{(\mathrm{E})}\rangle, |\varphi_1^{(\mathrm{E})}\rangle \otimes |\varphi_2^{(\mathrm{E})}\rangle, |\varphi_2^{(\mathrm{E})}\rangle \otimes |\varphi_1^{(\mathrm{E})}\rangle, |\varphi_2^{(\mathrm{E})}\rangle \otimes |\varphi_2^{(\mathrm{E})}\rangle\}$ とする。このとき，

$$\begin{array}{lll} \hat{E}\,|\varphi_1^{(\mathrm{E})}\rangle = |\varphi_1^{(\mathrm{E})}\rangle & \hat{C}_3\,|\varphi_1^{(\mathrm{E})}\rangle = -\frac{1}{2}\,|\varphi_1^{(\mathrm{E})}\rangle + \frac{\sqrt{3}}{2}\,|\varphi_2^{(\mathrm{E})}\rangle & \hat{C}_3^2\,|\varphi_1^{(\mathrm{E})}\rangle = -\frac{1}{2}\,|\varphi_1^{(\mathrm{E})}\rangle - \frac{\sqrt{3}}{2}\,|\varphi_2^{(\mathrm{E})}\rangle \\ \hat{\sigma}_v\,|\varphi_1^{(\mathrm{E})}\rangle = |\varphi_1^{(\mathrm{E})}\rangle & \hat{\sigma}'_v\,|\varphi_1^{(\mathrm{E})}\rangle = -\frac{1}{2}\,|\varphi_1^{(\mathrm{E})}\rangle - \frac{\sqrt{3}}{2}\,|\varphi_2^{(\mathrm{E})}\rangle & \hat{\sigma}''_v\,|\varphi_1^{(\mathrm{E})}\rangle = -\frac{1}{2}\,|\varphi_1^{(\mathrm{E})}\rangle + \frac{\sqrt{3}}{2}\,|\varphi_2^{(\mathrm{E})}\rangle \end{array} \tag{6.2.68}$$

および

$$\begin{array}{lll} \hat{E}\,|\varphi_2^{(\mathrm{E})}\rangle = |\varphi_2^{(\mathrm{E})}\rangle & \hat{C}_3\,|\varphi_2^{(\mathrm{E})}\rangle = -\frac{\sqrt{3}}{2}\,|\varphi_1^{(\mathrm{E})}\rangle - \frac{1}{2}\,|\varphi_2^{(\mathrm{E})}\rangle & \hat{C}_3^2\,|\varphi_2^{(\mathrm{E})}\rangle = \frac{\sqrt{3}}{2}\,|\varphi_1^{(\mathrm{E})}\rangle - \frac{1}{2}\,|\varphi_2^{(\mathrm{E})}\rangle \\ \hat{\sigma}_v\,|\varphi_2^{(\mathrm{E})}\rangle = -\,|\varphi_2^{(\mathrm{E})}\rangle & \hat{\sigma}'_v\,|\varphi_2^{(\mathrm{E})}\rangle = -\frac{\sqrt{3}}{2}\,|\varphi_1^{(\mathrm{E})}\rangle + \frac{1}{2}\,|\varphi_2^{(\mathrm{E})}\rangle & \hat{\sigma}''_v\,|\varphi_2^{(\mathrm{E})}\rangle = \frac{\sqrt{3}}{2}\,|\varphi_1^{(\mathrm{E})}\rangle + \frac{1}{2}\,|\varphi_2^{(\mathrm{E})}\rangle \end{array} \tag{6.2.69}$$

であるから，射影演算子 (6.2.30) を用いて既約表現 A_1 の関数を求めると，

$$\begin{aligned} &\hat{P}^{[\mathrm{A}_1]}(\,|\varphi_1^{(\mathrm{E})}\rangle \otimes |\varphi_1^{(\mathrm{E})}\rangle) \\ &= \frac{1}{6}(\hat{E}\otimes\hat{E} + \hat{C}_3\otimes\hat{C}_3 + \hat{C}_3^2\otimes\hat{C}_3^2 + \hat{\sigma}_v\otimes\hat{\sigma}_v + \hat{\sigma}'_v\otimes\hat{\sigma}'_v + \hat{\sigma}''_v\otimes\hat{\sigma}''_v)(\,|\varphi_1^{(\mathrm{E})}\rangle \otimes |\varphi_1^{(\mathrm{E})}\rangle) \\ &= \frac{1}{6}\Bigg(\,|\varphi_1^{(\mathrm{E})}\rangle \otimes |\varphi_1^{(\mathrm{E})}\rangle + (-\frac{1}{2}\,|\varphi_1^{(\mathrm{E})}\rangle + \frac{\sqrt{3}}{2}\,|\varphi_2^{(\mathrm{E})}\rangle) \otimes (-\frac{1}{2}\,|\varphi_1^{(\mathrm{E})}\rangle + \frac{\sqrt{3}}{2}\,|\varphi_2^{(\mathrm{E})}\rangle) \\ &\qquad + (-\frac{1}{2}\,|\varphi_1^{(\mathrm{E})}\rangle - \frac{\sqrt{3}}{2}\,|\varphi_2^{(\mathrm{E})}\rangle) \otimes (-\frac{1}{2}\,|\varphi_1^{(\mathrm{E})}\rangle - \frac{\sqrt{3}}{2}\,|\varphi_2^{(\mathrm{E})}\rangle) + |\varphi_1^{(\mathrm{E})}\rangle \otimes |\varphi_1^{(\mathrm{E})}\rangle \\ &\qquad + (-\frac{1}{2}\,|\varphi_1^{(\mathrm{E})}\rangle - \frac{\sqrt{3}}{2}\,|\varphi_2^{(\mathrm{E})}\rangle) \otimes (-\frac{1}{2}\,|\varphi_1^{(\mathrm{E})}\rangle - \frac{\sqrt{3}}{2}\,|\varphi_2^{(\mathrm{E})}\rangle) \\ &\qquad + (-\frac{1}{2}\,|\varphi_1^{(\mathrm{E})}\rangle + \frac{\sqrt{3}}{2}\,|\varphi_2^{(\mathrm{E})}\rangle) \otimes (-\frac{1}{2}\,|\varphi_1^{(\mathrm{E})}\rangle + \frac{\sqrt{3}}{2}\,|\varphi_2^{(\mathrm{E})}\rangle)\Bigg) \\ &= \frac{1}{2}(\,|\varphi_1^{(\mathrm{E})}\rangle \otimes |\varphi_1^{(\mathrm{E})}\rangle + |\varphi_2^{(\mathrm{E})}\rangle \otimes |\varphi_2^{(\mathrm{E})}\rangle) \end{aligned} \tag{6.2.70}$$

となるから，これを正規化して

$$|\varPhi^{(\mathrm{A}_1)}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(\,|\varphi_1^{(\mathrm{E})}\rangle \otimes |\varphi_1^{(\mathrm{E})}\rangle + |\varphi_2^{(\mathrm{E})}\rangle \otimes |\varphi_2^{(\mathrm{E})}\rangle) \tag{6.2.71}$$

を A_1 の基底関数とする。既約表現 A_2 の関数を求めると，

$$
\begin{aligned}
&\hat{P}^{[\mathrm{A}_2]}(\,|\varphi_1^{(\mathrm{E})}\rangle \otimes |\varphi_2^{(\mathrm{E})}\rangle) \\
&= \frac{1}{6}(\hat{E}\otimes\hat{E} + \hat{C}_3\otimes\hat{C}_3 + \hat{C}_3^2\otimes\hat{C}_3^2 - \hat{\sigma}_v\otimes\hat{\sigma}_v - \hat{\sigma}_v'\otimes\hat{\sigma}_v' - \hat{\sigma}_v''\otimes\hat{\sigma}_v'')(\,|\varphi_1^{(\mathrm{E})}\rangle \otimes |\varphi_2^{(\mathrm{E})}\rangle) \\
&= \frac{1}{6}\Bigg(\,|\varphi_1^{(\mathrm{E})}\rangle \otimes |\varphi_2^{(\mathrm{E})}\rangle + (-\frac{1}{2}\,|\varphi_1^{(\mathrm{E})}\rangle + \frac{\sqrt{3}}{2}\,|\varphi_2^{(\mathrm{E})}\rangle) \otimes (-\frac{\sqrt{3}}{2}\,|\varphi_1^{(\mathrm{E})}\rangle - \frac{1}{2}\,|\varphi_2^{(\mathrm{E})}\rangle) \\
&\qquad + (-\frac{1}{2}\,|\varphi_1^{(\mathrm{E})}\rangle - \frac{\sqrt{3}}{2}\,|\varphi_2^{(\mathrm{E})}\rangle) \otimes (\frac{\sqrt{3}}{2}\,|\varphi_1^{(\mathrm{E})}\rangle - \frac{1}{2}\,|\varphi_2^{(\mathrm{E})}\rangle) - \,|\varphi_1^{(\mathrm{E})}\rangle \otimes (-\,|\varphi_2^{(\mathrm{E})}\rangle) \\
&\qquad - (-\frac{1}{2}\,|\varphi_1^{(\mathrm{E})}\rangle - \frac{\sqrt{3}}{2}\,|\varphi_2^{(\mathrm{E})}\rangle) \otimes (-\frac{\sqrt{3}}{2}\,|\varphi_1^{(\mathrm{E})}\rangle + \frac{1}{2}\,|\varphi_2^{(\mathrm{E})}\rangle) \\
&\qquad - (-\frac{1}{2}\,|\varphi_1^{(\mathrm{E})}\rangle + \frac{\sqrt{3}}{2}\,|\varphi_2^{(\mathrm{E})}\rangle) \otimes (\frac{\sqrt{3}}{2}\,|\varphi_1^{(\mathrm{E})}\rangle + \frac{1}{2}\,|\varphi_2^{(\mathrm{E})}\rangle)\Bigg) \\
&= \frac{1}{2}(\,|\varphi_1^{(\mathrm{E})}\rangle \otimes |\varphi_2^{(\mathrm{E})}\rangle - |\varphi_2^{(\mathrm{E})}\rangle \otimes |\varphi_1^{(\mathrm{E})}\rangle)
\end{aligned}
\tag{6.2.72}
$$

となるから，これを正規化して

$$
|\Phi^{(\mathrm{A}_2)}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(\,|\varphi_1^{(\mathrm{E})}\rangle \otimes |\varphi_2^{(\mathrm{E})}\rangle - |\varphi_2^{(\mathrm{E})}\rangle \otimes |\varphi_1^{(\mathrm{E})}\rangle) \tag{6.2.73}
$$

を A_2 の基底関数とする。既約表現 E の関数を求めると，

$$
\begin{aligned}
&\hat{P}^{[\mathrm{E}]}(\,|\varphi_1^{(\mathrm{E})}\rangle \otimes |\varphi_1^{(\mathrm{E})}\rangle) \\
&= \frac{1}{3}(2\hat{E}\otimes\hat{E} - \hat{C}_3\otimes\hat{C}_3 - \hat{C}_3^2\otimes\hat{C}_3^2)(\,|\varphi_1^{(\mathrm{E})}\rangle \otimes |\varphi_1^{(\mathrm{E})}\rangle) \\
&= \frac{1}{3}\Bigg(2\,|\varphi_1^{(\mathrm{E})}\rangle \otimes |\varphi_1^{(\mathrm{E})}\rangle - (-\frac{1}{2}\,|\varphi_1^{(\mathrm{E})}\rangle + \frac{\sqrt{3}}{2}\,|\varphi_2^{(\mathrm{E})}\rangle) \otimes (-\frac{1}{2}\,|\varphi_1^{(\mathrm{E})}\rangle + \frac{\sqrt{3}}{2}\,|\varphi_2^{(\mathrm{E})}\rangle) \\
&\qquad - (-\frac{1}{2}\,|\varphi_1^{(\mathrm{E})}\rangle - \frac{\sqrt{3}}{2}\,|\varphi_2^{(\mathrm{E})}\rangle) \otimes (-\frac{1}{2}\,|\varphi_1^{(\mathrm{E})}\rangle - \frac{\sqrt{3}}{2}\,|\varphi_2^{(\mathrm{E})}\rangle)\Bigg) \\
&= \frac{1}{2}(\,|\varphi_1^{(\mathrm{E})}\rangle \otimes |\varphi_1^{(\mathrm{E})}\rangle - |\varphi_2^{(\mathrm{E})}\rangle \otimes |\varphi_2^{(\mathrm{E})}\rangle)
\end{aligned}
\tag{6.2.74}
$$

となるから，これを正規化して

$$
|\Phi_1^{(\mathrm{E})}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(\,|\varphi_1^{(\mathrm{E})}\rangle \otimes |\varphi_1^{(\mathrm{E})}\rangle - |\varphi_2^{(\mathrm{E})}\rangle \otimes |\varphi_2^{(\mathrm{E})}\rangle) \tag{6.2.75}
$$

を E の基底関数の一つとする。E のもう一つの基底関数を求めるには，

$$
\begin{aligned}
&\hat{P}^{[\mathrm{E}]}(\,|\varphi_1^{(\mathrm{E})}\rangle \otimes |\varphi_2^{(\mathrm{E})}\rangle) \\
&= \frac{1}{3}(2\hat{E}\otimes\hat{E} - \hat{C}_3\otimes\hat{C}_3 - \hat{C}_3^2\otimes\hat{C}_3^2)(\,|\varphi_1^{(\mathrm{E})}\rangle \otimes |\varphi_2^{(\mathrm{E})}\rangle) \\
&= \frac{1}{3}\Bigg(2\,|\varphi_1^{(\mathrm{E})}\rangle \otimes |\varphi_2^{(\mathrm{E})}\rangle - (-\frac{1}{2}\,|\varphi_1^{(\mathrm{E})}\rangle + \frac{\sqrt{3}}{2}\,|\varphi_2^{(\mathrm{E})}\rangle) \otimes (-\frac{\sqrt{3}}{2}\,|\varphi_1^{(\mathrm{E})}\rangle - \frac{1}{2}\,|\varphi_2^{(\mathrm{E})}\rangle) \\
&\qquad - (-\frac{1}{2}\,|\varphi_1^{(\mathrm{E})}\rangle - \frac{\sqrt{3}}{2}\,|\varphi_2^{(\mathrm{E})}\rangle) \otimes (\frac{\sqrt{3}}{2}\,|\varphi_1^{(\mathrm{E})}\rangle - \frac{1}{2}\,|\varphi_2^{(\mathrm{E})}\rangle)\Bigg) \\
&= \frac{1}{2}(\,|\varphi_1^{(\mathrm{E})}\rangle \otimes |\varphi_2^{(\mathrm{E})}\rangle + |\varphi_2^{(\mathrm{E})}\rangle \otimes |\varphi_1^{(\mathrm{E})}\rangle)
\end{aligned}
\tag{6.2.76}
$$

となるから，これを正規化して

$$|\Phi_2^{(\mathrm{E})}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(\,|\varphi_1^{(\mathrm{E})}\rangle \otimes |\varphi_2^{(\mathrm{E})}\rangle + |\varphi_2^{(\mathrm{E})}\rangle \otimes |\varphi_1^{(\mathrm{E})}\rangle) \tag{6.2.77}$$

を得る。

==========

6.3 回転群

6.3.1 角運動量演算子の既約表現

§5.3.4 で述べた回転演算子

$$\hat{R}_{\boldsymbol{n}}(\psi) = e^{-i\psi \boldsymbol{n}\cdot\hat{\boldsymbol{J}}} \tag{6.3.1}$$

の全体は群をなす。この群を**回転群**という。(6.3.1) で，$\hat{\boldsymbol{J}} = \hat{J}_x\,\boldsymbol{e}_x + \hat{J}_y\,\boldsymbol{e}_y + \hat{J}_z\,\boldsymbol{e}_z$ は角運動量演算子である。角運動量演算子はエルミート演算子であり，$\hat{J}_x^\dagger = \hat{J}_x$，$\hat{J}_y^\dagger = \hat{J}_y$，$\hat{J}_z^\dagger = \hat{J}_z$ を満たす。また，$\boldsymbol{n} = n_x\,\boldsymbol{e}_x + n_y\,\boldsymbol{e}_y + n_z\,\boldsymbol{e}_z$ は回転軸の方向を表す単位ベクトル，ψ は回転角である。$\hat{R}_{\boldsymbol{n}}(\psi)$ は $\hat{\boldsymbol{J}}$ によって表されるから，回転群の既約表現は $\hat{J}_x$，$\hat{J}_y$，$\hat{J}_z$ に関する既約不変部分空間を決定することによって求められる。§5.3.3 で述べたように，角運動量演算子の性質として

$$[\,\hat{J}_x, \hat{J}_y\,] = i\hat{J}_z \qquad [\,\hat{J}_y, \hat{J}_z\,] = i\hat{J}_x \qquad [\,\hat{J}_z, \hat{J}_x\,] = i\hat{J}_y \tag{6.3.2}$$

および

$$[\,\hat{\boldsymbol{J}}^2, \hat{J}_x\,] = 0 \qquad [\,\hat{\boldsymbol{J}}^2, \hat{J}_y\,] = 0 \qquad [\,\hat{\boldsymbol{J}}^2, \hat{J}_z\,] = 0 \tag{6.3.3}$$

が基本的である。ここで，$\hat{\boldsymbol{J}}^2 = \hat{J}_x^2 + \hat{J}_y^2 + \hat{J}_z^2$ である。演算子 $\hat{J}_+$，$\hat{J}_-$ を

$$\hat{J}_+ = \hat{J}_x + i\hat{J}_y \qquad \hat{J}_- = \hat{J}_x - i\hat{J}_y \tag{6.3.4}$$

によって定義すると，

$$\hat{J}_+^\dagger = \hat{J}_- \qquad [\,\hat{J}_+, \hat{J}_-\,] = 2\hat{J}_z \qquad [\,\hat{J}_z, \hat{J}_\pm\,] = \pm\hat{J}_\pm \qquad [\,\hat{\boldsymbol{J}}^2, \hat{J}_\pm\,] = \hat{0} \tag{6.3.5}$$

および

$$\hat{\boldsymbol{J}}^2 = \hat{J}_z^2 + \frac{1}{2}(\hat{J}_+\hat{J}_- + \hat{J}_-\hat{J}_+) = \hat{J}_z^2 + \hat{J}_z + \hat{J}_-\hat{J}_+ = \hat{J}_z^2 - \hat{J}_z + \hat{J}_+\hat{J}_- \tag{6.3.6}$$

が成り立つ。$\hat{\boldsymbol{J}}^2$ と $\hat{J}_z$ は可換であるから，これらが同時対角化されるように基底を選ぶ。$\hat{\boldsymbol{J}}^2$，$\hat{J}_z$ の固有値，固有ベクトルは

$$\begin{aligned}
&\hat{\boldsymbol{J}}^2 \left|j,m\right\rangle = j(j+1)\left|j,m\right\rangle \qquad\qquad \hat{J}_z \left|j,m\right\rangle = m\left|j,m\right\rangle \\
&\text{ここで，}\quad j = 0, \frac{1}{2}, 1, \frac{3}{2}, 2, \frac{5}{2}, \cdots, \quad m = \underbrace{-j, -j+1, \cdots, j-1, j}_{2j+1\text{ 個}}
\end{aligned} \tag{6.3.7}$$

で与えられる。また，$\left|j,m\right\rangle$ の位相を適当に選べば，

$$\begin{aligned}
\hat{J}_+ \left|j,m\right\rangle &= \sqrt{(j-m)(j+m+1)}\left|j,m+1\right\rangle \\
\hat{J}_- \left|j,m\right\rangle &= \sqrt{(j+m)(j-m+1)}\left|j,m-1\right\rangle
\end{aligned} \tag{6.3.8}$$

が成り立つ。

[(6.3.7) の証明] $\hat{J}_x$，$\hat{J}_y$，$\hat{J}_z$ に関する既約不変部分空間を W とし，W の恒等演算子を $\hat{E}_W$ とする。§2.6.2 で述べたシューアの補題 (2.6.7) より，(6.3.3) は $\hat{\boldsymbol{J}}^2 = \lambda \hat{E}_W$ であることを意味する。ここで，λ は $\hat{\boldsymbol{J}}^2$ の固有値である。$\hat{J}_z$ の固有値を μ とし，$\hat{\boldsymbol{J}}^2$ と $\hat{J}_z$ の正規化された共通の固有ベクトルを $\left|\lambda,\mu\right\rangle$ とする。つまり，

$$\hat{\boldsymbol{J}}^2 \left|\lambda,\mu\right\rangle = \lambda\left|\lambda,\mu\right\rangle \qquad \hat{J}_z \left|\lambda,\mu\right\rangle = \mu\left|\lambda,\mu\right\rangle \qquad \left\langle\lambda,\mu|\lambda,\mu\right\rangle = 1 \tag{6.3.9}$$

とする。(6.3.7) の証明を以下の (1) から (4) に分けて行う。

(1) まず，

$$\lambda \geq \mu^2 \tag{6.3.10}$$

を示す。$\langle\lambda,\mu|(\hat{\boldsymbol{J}}^2 - \hat{J}_z^2)|\lambda,\mu\rangle = \lambda - \mu^2$ であるが，一方，$\langle\lambda,\mu|(\hat{\boldsymbol{J}}^2 - \hat{J}_z^2)|\lambda,\mu\rangle = \langle\lambda,\mu|(\hat{J}_x^2 + \hat{J}_y^2)|\lambda,\mu\rangle = \langle\lambda,\mu|\hat{J}_x^2|\lambda,\mu\rangle + \langle\lambda,\mu|\hat{J}_y^2|\lambda,\mu\rangle \geq 0$ である[29]。よって，(6.3.10) が示された。

(2) 次に，

$$\hat{J}_\pm \left|\lambda,\mu\right\rangle = C_\pm \left|\lambda,\mu\pm 1\right\rangle \tag{6.3.11}$$

を示す。$\left|\pm\right\rangle = \hat{J}_\pm \left|\lambda,\mu\right\rangle$ とおくと，$\hat{\boldsymbol{J}}^2\left|\pm\right\rangle = \hat{\boldsymbol{J}}^2\hat{J}_\pm\left|\lambda,\mu\right\rangle = \hat{J}_\pm\hat{\boldsymbol{J}}^2\left|\lambda,\mu\right\rangle = \hat{J}_\pm\lambda\left|\lambda,\mu\right\rangle = \lambda\hat{J}_\pm\left|\lambda,\mu\right\rangle = \lambda\left|\pm\right\rangle$ であり，また，$\hat{J}_z\left|\pm\right\rangle = \hat{J}_z\hat{J}_\pm\left|\lambda,\mu\right\rangle = (\hat{J}_\pm\hat{J}_z \pm \hat{J}_\pm)\left|\lambda,\mu\right\rangle = (\mu\pm 1)\hat{J}_\pm\left|\lambda,\mu\right\rangle = (\mu\pm 1)\left|\pm\right\rangle$ である。よって，(6.3.11) が示された。

(3)μ には最大値 $\mu_{\max}$ と最小値 $\mu_{\min}$ があり，

$$\lambda = \mu_{\max}(\mu_{\max}+1) = \mu_{\min}(\mu_{\min}-1) \qquad \mu_{\max} = -\mu_{\min} \tag{6.3.12}$$

[29] 任意の演算子 $\hat{X}$，任意のベクトル $\left|a\right\rangle$ に対して $(\hat{X}\left|a\right\rangle, \hat{X}\left|a\right\rangle) = \langle a|\hat{X}^\dagger\hat{X}|a\rangle \geq 0$ です。特に，$\hat{X}$ がエルミート演算子 $(\hat{X}^\dagger = \hat{X})$ ならば，$\langle a|\hat{X}^2|a\rangle \geq 0$ が成り立ちます。

であることを示す。$\hat{J}_+$ を $|\lambda,\mu\rangle$ に何回か作用させると $\lambda \geq \mu_{\max}^2$ かつ $\lambda < (\mu_{\max}+1)^2$ となるような $|\lambda,\mu_{\max}\rangle$ に達する。しかし, $\lambda \geq \mu^2$ であるから, $\hat{J}_+ |\lambda,\mu_{\max}\rangle = \mathbf{0}$ でなければならない[30]。$\hat{J}_+ |\lambda,\mu_{\max}\rangle = \mathbf{0}$ および $\hat{\boldsymbol{J}}^2 = \hat{J}_z^2 + \hat{J}_z + \hat{J}_-\hat{J}_+$ より, $\hat{\boldsymbol{J}}^2 |\lambda,\mu_{\max}\rangle = (\hat{J}_z^2 + \hat{J}_z + \hat{J}_-\hat{J}_+) |\lambda,\mu_{\max}\rangle = \hat{J}_z^2 |\lambda,\mu_{\max}\rangle + \hat{J}_z |\lambda,\mu_{\max}\rangle + \hat{J}_-\hat{J}_+ |\lambda,\mu_{\max}\rangle = \mu_{\max}^2 |\lambda,\mu_{\max}\rangle + \mu_{\max} |\lambda,\mu_{\max}\rangle = \mu_{\max}(\mu_{\max}+1) |\lambda,\mu_{\max}\rangle$ である。よって，$\lambda = \mu_{\max}(\mu_{\max}+1)$ を得る。同様に, $\hat{J}_-$ を $|\lambda,\mu\rangle$ に何回か作用させると $\lambda \geq \mu_{\min}^2$ かつ $\lambda < (\mu_{\min}-1)^2$ となるような $|\lambda,\mu_{\min}\rangle$ に達する。しかし, $\lambda \geq \mu^2$ であるから, $\hat{J}_- |\lambda,\mu_{\min}\rangle = \mathbf{0}$ でなければならない[31]。$\hat{J}_- |\lambda,\mu_{\min}\rangle = \mathbf{0}$ および $\hat{\boldsymbol{J}}^2 = \hat{J}_z^2 - \hat{J}_z + \hat{J}_+\hat{J}_-$ より, $\hat{\boldsymbol{J}}^2 |\lambda,\mu_{\min}\rangle = (\hat{J}_z^2 - \hat{J}_z + \hat{J}_+\hat{J}_-) |\lambda,\mu_{\min}\rangle = \hat{J}_z^2 |\lambda,\mu_{\min}\rangle - \hat{J}_z |\lambda,\mu_{\min}\rangle + \hat{J}_+\hat{J}_- |\lambda,\mu_{\min}\rangle = \mu_{\min}^2 |\lambda,\mu_{\min}\rangle - \mu_{\min} |\lambda,\mu_{\min}\rangle = \mu_{\min}(\mu_{\min}-1) |\lambda,\mu_{\max}\rangle$ である。よって，$\lambda = \mu_{\min}(\mu_{\min}-1)$ を得る。$\lambda = \mu_{\max}(\mu_{\max}+1) = \mu_{\min}(\mu_{\min}-1)$ より $(\mu_{\max}+\mu_{\min})(\mu_{\max}-\mu_{\min}+1) = 0$ であるから，$\mu_{\max} \geq \mu_{\min}$ を考慮すると，$\mu_{\max} = -\mu_{\min}$ を得る。よって，(6.3.12) が示された。

(4) あらためて $\mu_{\max}$ を j，μ を m，$|\lambda,\mu\rangle$ を $|j,m\rangle$ と表して, (6.3.7) を示す。$|j,-j\rangle$ に $\hat{J}_+$ を何回か作用させて $|j,j\rangle$ に達するとき，m は $-j$，$-j+1$，$\cdots$，$j-1$，j の $2j+1$ 個の値をとる[32]。ここで，$2j+1$ は個数なので正の整数でなければならないから，$j = (\text{正の整数} - 1)/2$ を得る。以上より，(6.3.7) が示された。 ■

[(6.3.8) の証明] (6.3.7) およびその証明で示した (6.3.11)，つまり，

$$\hat{J}_\pm |j,m\rangle = C_\pm |j,m\pm 1\rangle \tag{6.3.13}$$

を用いる。$\hat{J}_+ |j,m\rangle = C_+ |j,m+1\rangle$ のエルミート共役をとると，$\hat{J}_+^\dagger = \hat{J}_-$ より，$\langle j,m| \hat{J}_+^\dagger = \langle j,m| \hat{J}_- = C_+^* \langle j,m+1|$ となる。したがって，$\langle j,m|\hat{J}_-\hat{J}_+|j,m\rangle = |C_+|^2 \langle j,m+1|j,m+1\rangle = |C_+|^2$ となる。一方，$\hat{J}_-\hat{J}_+ = \hat{\boldsymbol{J}}^2 - \hat{J}_z^2 - \hat{J}_z$ より，$\langle j,m|\hat{J}_-\hat{J}_+|j,m\rangle = \langle j,m|(\hat{\boldsymbol{J}}^2 - \hat{J}_z^2 - \hat{J}_z)|j,m\rangle = (j(j+1) - m^2 - m) \langle j,m|j,m\rangle = (j-m)(j+m+1)$ であるから，$|C_+|^2 = (j-m)(j+m+1)$ となる。C_+ を正の実数に選べば，$C_+ = \sqrt{(j-m)(j+m+1)}$ を得る。この C_+ を用いると $\langle j,m| \hat{J}_- = \sqrt{(j-m)(j+m+1)} \langle j,m+1|$ であるから，この式の左辺，右辺と $|j,m+1\rangle$ の内積を計算すると，$\langle j,m|\hat{J}_-|j,m+1\rangle = \sqrt{(j-m)(j+m+1)} \langle j,m+1|j,m+1\rangle = \sqrt{(j-m)(j+m+1)}$ である。ここで, m を $m-1$ に置き換えると, $\langle j,m-1|\hat{J}_-|j,m\rangle = \sqrt{(j-m+1)(j+m)} = \sqrt{(j+m)(j-m+1)}$ である。一方, $\hat{J}_- |j,m\rangle = C_- |j,m-1\rangle$ より $\langle j,m-1|\hat{J}_-|j,m\rangle = C_- \langle j,m-1|j,m-1\rangle = C_-$ である。したがって，$C_- = \sqrt{(j+m)(j-m+1)}$ を得る[33]。以上より，(6.3.8) が示された。 ■

[30] そうでないと，$|\lambda,\mu_{\max}+1\rangle$ が存在して, $\lambda < (\mu_{\max}+1)^2$ となってしまいます。
[31] そうでないと，$|\lambda,\mu_{\min}-1\rangle$ が存在して，$\lambda < (\mu_{\min}-1)^2$ となってしまいます。
[32] $|j,j\rangle$ に $\hat{J}_-$ を何回か作用させて $|j,-j\rangle$ に達すると考えても同じです。
[33] C_+ の位相を決めると C_- の位相は自動的に決まります。

6.3.2 $j = 1/2$

$j = 1/2$ のとき $\hat{J}_x$，$\hat{J}_y$，$\hat{J}_z$ に関する既約不変部分空間は 2 次元となる。また，$\hat{\boldsymbol{J}}^2$ の固有値は $j(j+1) = 3/4$，$\hat{J}_z$ の固有値は $m = \pm 1/2$ である。$\hat{\boldsymbol{J}}^2$ と $\hat{J}_z$ の共通の固有ベクトルを $|\uparrow\rangle = |j = 1/2, m = 1/2\rangle$，$|\downarrow\rangle = |j = 1/2, m = -1/2\rangle$ と表すと，(6.3.8) より，

$$\hat{J}_+ = [\ |\uparrow\rangle\ \ |\downarrow\rangle\ ] \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \langle\uparrow| \\ \langle\downarrow| \end{bmatrix} \qquad \hat{J}_- = [\ |\uparrow\rangle\ \ |\downarrow\rangle\ ] \begin{bmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \langle\uparrow| \\ \langle\downarrow| \end{bmatrix} \tag{6.3.14}$$

となる。$\hat{J}_x = (\hat{J}_+ + \hat{J}_-)/2$，$\hat{J}_y = (\hat{J}_+ - \hat{J}_-)/2i$ であるから，$\hat{J}_z$ と合わせて，

$$\hat{J}_x = \frac{1}{2}[\ |\uparrow\rangle\ \ |\downarrow\rangle\ ]\sigma_x \begin{bmatrix} \langle\uparrow| \\ \langle\downarrow| \end{bmatrix} \qquad \hat{J}_y = \frac{1}{2}[\ |\uparrow\rangle\ \ |\downarrow\rangle\ ]\sigma_y \begin{bmatrix} \langle\uparrow| \\ \langle\downarrow| \end{bmatrix} \qquad \hat{J}_z = \frac{1}{2}[\ |\uparrow\rangle\ \ |\downarrow\rangle\ ]\sigma_z \begin{bmatrix} \langle\uparrow| \\ \langle\downarrow| \end{bmatrix} \tag{6.3.15}$$

と表せる。ここで，σ_x，σ_y，σ_z は (5.3.42) で定義したパウリ行列であり，

$$\sigma_x = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix} \qquad \sigma_y = \begin{bmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{bmatrix} \qquad \sigma_z = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix} \tag{6.3.16}$$

である。したがって，基底 $\{\,|\uparrow\rangle\,, |\downarrow\rangle\}$ による回転演算子 $\hat{R}_{\boldsymbol{n}}(\psi) = e^{-i\psi\boldsymbol{n}\cdot\hat{\boldsymbol{J}}}$ の行列表現は，すでに (5.3.72) で示したように，

$$e^{-i\frac{\psi}{2}\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{\sigma}} = \cos\frac{\psi}{2}\, I_2 - i\sin\frac{\psi}{2}\, \boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{\sigma} \tag{6.3.17}$$

となる。

6.3.3 $j = 1$

$j = 1$ のとき $\hat{J}_x$，$\hat{J}_y$，$\hat{J}_z$ に関する既約不変部分空間は 3 次元となる。また，$\hat{\boldsymbol{J}}^2$ の固有値は $j(j+1) = 2$，$\hat{J}_z$ の固有値は $m = 1, 0, -1$ である。$\hat{\boldsymbol{J}}^2$ と $\hat{J}_z$ の共通の固有ベクトルを $|1\rangle = |j = 1, m = 1\rangle$，$|0\rangle = |j = 1, m = 0\rangle$，$|\bar{1}\rangle = |j = 1, m = -1\rangle$ と表すと，(6.3.8) より，

$$\hat{J}_+ = [\ |1\rangle\ \ |0\rangle\ \ |\bar{1}\rangle\ ] \begin{bmatrix} 0 & \sqrt{2} & 0 \\ 0 & 0 & \sqrt{2} \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \langle 1| \\ \langle 0| \\ \langle\bar{1}| \end{bmatrix} \qquad \hat{J}_- = [\ |1\rangle\ \ |0\rangle\ \ |\bar{1}\rangle\ ] \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 \\ \sqrt{2} & 0 & 0 \\ 0 & \sqrt{2} & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \langle 1| \\ \langle 0| \\ \langle\bar{1}| \end{bmatrix} \tag{6.3.18}$$

となる。$\hat{J}_x = (\hat{J}_+ + \hat{J}_-)/2$，$\hat{J}_y = (\hat{J}_+ - \hat{J}_-)/2i$ であるから，$\hat{J}_z$ と合わせて，

$$\hat{J}_x = [\ |1\rangle\ \ |0\rangle\ \ |\bar{1}\rangle\ ] J_x \begin{bmatrix} \langle 1| \\ \langle 0| \\ \langle \bar{1}| \end{bmatrix} \qquad \hat{J}_y = [\ |1\rangle\ \ |0\rangle\ \ |\bar{1}\rangle\ ] J_y \begin{bmatrix} \langle 1| \\ \langle 0| \\ \langle \bar{1}| \end{bmatrix} \qquad \hat{J}_z = [\ |1\rangle\ \ |0\rangle\ \ |\bar{1}\rangle\ ] J_z \begin{bmatrix} \langle 1| \\ \langle 0| \\ \langle \bar{1}| \end{bmatrix} \tag{6.3.19}$$

と表せる。ここで，

$$J_x = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{bmatrix} \qquad J_y = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} 0 & -i & 0 \\ i & 0 & -i \\ 0 & i & 0 \end{bmatrix} \qquad J_z = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{bmatrix} \tag{6.3.20}$$

である。基底 $\{\,|1\rangle\,,\,|0\rangle\,,\,|\bar{1}\rangle\}$ から基底 $\{\,|e_x\rangle\,,\,|e_y\rangle\,,\,|e_z\rangle\}$ へ基底変換

$$[\ |e_x\rangle\ \ |e_y\rangle\ \ |e_z\rangle\ ] = [\ |1\rangle\ \ |0\rangle\ \ |\bar{1}\rangle\ ] P \tag{6.3.21}$$

を行う。ここで，基底変換の行列 P はユニタリ行列

$$P = \begin{bmatrix} -\frac{1}{\sqrt{2}} & -\frac{1}{\sqrt{2}i} & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ \frac{1}{\sqrt{2}} & -\frac{1}{\sqrt{2}i} & 0 \end{bmatrix} \tag{6.3.22}$$

とする[34]。基底 $\{\,|e_x\rangle\,,\,|e_y\rangle\,,\,|e_z\rangle\}$ による $\hat{J}_x$，$\hat{J}_y$，$\hat{J}_z$ の行列表現を $\mathscr{J}_x$，$\mathscr{J}_y$，$\mathscr{J}_z$ とすると，(2.3.60) より，

$$\mathscr{J}_x = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -i \\ 0 & i & 0 \end{bmatrix} \qquad \mathscr{J}_y = \begin{bmatrix} 0 & 0 & i \\ 0 & 0 & 0 \\ -i & 0 & 0 \end{bmatrix} \qquad \mathscr{J}_z = \begin{bmatrix} 0 & -i & 0 \\ i & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \tag{6.3.23}$$

となる。(6.3.23) を用いると，$|V\rangle = [\ |e_x\rangle\ \ |e_x\rangle\ \ |e_x\rangle\ ]\boldsymbol{V}$ に対して，

$$\begin{aligned} e^{-i\psi \boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{\mathscr{J}}}\boldsymbol{V} &= \left[I_3 + \sin\psi\,(-i\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{\mathscr{J}}) + (1-\cos\psi)(-i\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{\mathscr{J}})^2\right]\boldsymbol{V} \\ &= \boldsymbol{V} + \sin\psi\,(\boldsymbol{n}\times\boldsymbol{V}) + (1-\cos\psi)(\boldsymbol{n}\boldsymbol{n}^\dagger\boldsymbol{V} - \boldsymbol{V}) \end{aligned} \tag{6.3.24}$$

[34] ユニタリ行列 P により正規直交基底 $\{\,|1\rangle\,,\,|0\rangle\,,\,|\bar{1}\rangle\}$ を基底変換するので，基底 $\{\,|e_x\rangle\,,\,|e_y\rangle\,,\,|e_z\rangle\}$ も正規直交基底となります。

となる[35]。ここで,

$$
\begin{aligned}
-i\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{\mathcal{J}} &= -i(n_x\mathcal{J}_x + n_y\mathcal{J}_y + n_z\mathcal{J}_z) = \begin{bmatrix} 0 & -n_z & n_y \\ n_z & 0 & -n_x \\ -n_y & n_x & 0 \end{bmatrix} \\
(-i\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{\mathcal{J}})^2 &= \begin{bmatrix} -n_y^2 - n_z^2 & n_x n_y & n_x n_z \\ n_y n_x & -n_z^2 - n_x^2 & n_y n_z \\ n_z n_x & n_z n_y & -n_x^2 - n_y^2 \end{bmatrix} = \boldsymbol{n}\boldsymbol{n}^\dagger - I_3
\end{aligned}
\tag{6.3.25}
$$

である。

[(6.3.24) の証明] 行列の指数関数の定義より,

$$
e^{-i\psi\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{\mathcal{J}}}\boldsymbol{V} = \left(I_3 - i\psi\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{\mathcal{J}} + \frac{1}{2!}(-i\psi\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{\mathcal{J}})^2 + \cdots + \frac{1}{k!}(-i\psi\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{\mathcal{J}})^k + \cdots\right)\boldsymbol{V}
\tag{6.3.26}
$$

である。(6.3.25) より，任意の 3 次元列ベクトル $\boldsymbol{U}$ に対して

$$
-i\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{\mathcal{J}}\boldsymbol{U} = \boldsymbol{n}\times\boldsymbol{U} \qquad (-i\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{\mathcal{J}})^2\boldsymbol{U} = \boldsymbol{n}\boldsymbol{n}^\dagger\boldsymbol{U} - \boldsymbol{U}
\tag{6.3.27}
$$

と書けるから，$k = 1, 2, 3, 4, \cdots$ に対して,

$$
\begin{aligned}
(-i\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{\mathcal{J}})^k\boldsymbol{V} &= \underbrace{\boldsymbol{n}\times(\boldsymbol{n}\times(\cdots\times(\boldsymbol{n}\times}_{k\text{ 重}}\boldsymbol{V})\cdots)) \\
&= \begin{cases} (-1)^{(k-1)/2}\boldsymbol{n}\times\boldsymbol{V} = (-1)^{(k-1)/2}(-i\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{\mathcal{J}})\boldsymbol{V} & (k = 1, 3, \cdots) \\ (-1)^{(k-2)/2}(\boldsymbol{n}\boldsymbol{n}^\dagger\boldsymbol{V} - \boldsymbol{V}) = (-1)^{(k-2)/2}(-i\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{\mathcal{J}})^2\boldsymbol{V} & (k = 2, 4, \cdots) \end{cases}
\end{aligned}
\tag{6.3.28}
$$

となる[36]。(6.3.28) を (6.3.26) の右辺に用いると,

$$
\begin{aligned}
e^{-i\psi\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{\mathcal{J}}}\boldsymbol{V} &= \left[I_3 + \sin\psi\,(-i\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{\mathcal{J}}) + (1-\cos\psi)(-i\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{\mathcal{J}})^2\right]\boldsymbol{V} \\
&= \boldsymbol{V} + \sin\psi\,(\boldsymbol{n}\times\boldsymbol{V}) + (1-\cos\psi)(\boldsymbol{n}\boldsymbol{n}^\dagger\boldsymbol{V} - \boldsymbol{V})
\end{aligned}
\tag{6.3.29}
$$

を得る。よって，(6.3.24) が示された。 ■

[35] (6.3.22) はロドリゲスの回転公式 (5.3.56) に一致することがわかります。

[36] 単位ベクトル $\boldsymbol{n}$ と $\boldsymbol{n}$ に垂直なベクトル $\boldsymbol{V}_\perp = \boldsymbol{V} - \boldsymbol{n}\boldsymbol{n}^\dagger\boldsymbol{V}$ との外積 $\boldsymbol{n}\times\boldsymbol{V}_\perp$ は $\boldsymbol{n}$ の方向を回転軸として $\boldsymbol{V}_\perp$ を反時計回りに $\pi/2$ 回転させたベクトルです。したがって，$\boldsymbol{V}_\perp$ に対して $\boldsymbol{n}$ との外積を $\boldsymbol{n}\times(\boldsymbol{n}\times(\cdots\times(\boldsymbol{n}\times\boldsymbol{V}_\perp)\cdots))$ のように繰り返すと反時計回りに次々と $\pi/2$ の回転を行っていくことになります。あるいは，ラグランジュの公式 $\boldsymbol{a}\times(\boldsymbol{b}\times\boldsymbol{c}) = (\boldsymbol{a}\cdot\boldsymbol{c})\boldsymbol{b} - (\boldsymbol{a}\cdot\boldsymbol{b})\boldsymbol{c}$ において，$\boldsymbol{a} = \boldsymbol{b} = \boldsymbol{n}$，$\boldsymbol{c} = \boldsymbol{V}$ として，$\boldsymbol{n}\times(\boldsymbol{n}\times\boldsymbol{V}) = \boldsymbol{n}\boldsymbol{n}^\dagger\boldsymbol{V} - \boldsymbol{V} = -\boldsymbol{V}_\perp$ を用いて説明することもできます。

第 7 章　物理への応用 (随時更新中)

7.1　力学

7.1.1　減衰振動

例題 1. x 軸に沿って運動する質量 m の粒子を考える。粒子はばね定数 k のばねに取り付けられており，また，速度に比例する抵抗力 $2\gamma m\dot{x}$ を受けるとする。このとき，粒子の運動は微分方程式

$$\ddot{x} + 2\gamma\dot{x} + \omega_0^2 x = 0 \tag{7.1.1}$$

によって記述される。ここで，$x = x(t)$ は時刻 t における粒子の位置座標であり，また，$\omega_0 = \sqrt{k/m}$ とおいた。$\omega_0 \neq \gamma$ のとき，以下の問いに答えよ[1]。

(1) (7.1.1) は，$v = \dot{x}$ とおくと，

$$\dot{\boldsymbol{u}} = X\boldsymbol{u} \qquad \boldsymbol{u} = \begin{bmatrix} x \\ v \end{bmatrix} \qquad X = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ -\omega_0^2 & -2\gamma \end{bmatrix} \tag{7.1.2}$$

と表せることを示せ。

(2) X の固有値 ξ_1，ξ_2，固有ベクトル $\boldsymbol{p}_1$，$\boldsymbol{p}_2$ を求めよ。

(3) 基底 $p = \{\boldsymbol{p}_1, \boldsymbol{p}_2\}$ の双対基底 $\pi = \{\boldsymbol{\pi}_1, \boldsymbol{\pi}_2\}$ を求めよ。

(4) X のスペクトル分解を求めよ。

(5) $u_1 = \boldsymbol{\pi}_1\boldsymbol{u}$，$u_2 = \boldsymbol{\pi}_2\boldsymbol{u}$ とおくと，u_1，u_2 は

$$\dot{u}_1 = \xi_1 u_1 \qquad \dot{u}_2 = \xi_2 u_2 \tag{7.1.3}$$

を満たすことを示せ。

[1] 通常，減衰振動の微分方程式 (7.1.1) は 2 階定数係数同時線形微分方程式の解法によって扱われますが，ここでは線形代数の視点から解いてみることにします。なお，$\omega_0 = \gamma$ のときは X が対角化可能でないためジョルダン標準形の理論が必要となります。これについては参考文献 [5] の第 9 章を参照してください。

(6) (7.1.1) の一般解を求めよ。

[解答]
(1)$\dot{x} = v$，$\dot{v} = -\omega_0^2 x - 2\gamma v$ より，(7.1.2) を得る。
(2)$|X - \xi I_2| = \xi^2 + 2\gamma\xi + \omega_0^2 = 0$ より，

$$\begin{cases} \xi_1 = -\gamma + i\sqrt{\omega_0^2 - \gamma^2},\ \xi_2 = -\gamma - i\sqrt{\omega_0^2 - \gamma^2} & (\omega_0 > \gamma \text{のとき}) \\ \xi_1 = -\gamma - \sqrt{\gamma^2 - \omega_0^2},\ \ \xi_2 = -\gamma + \sqrt{\gamma^2 - \omega_0^2} & (\omega_0 < \gamma \text{のとき}) \end{cases} \tag{7.1.4}$$

である。固有値 ξ のとき，固有ベクトルの第 1 成分を c_1，第 2 成分を c_2 とすると，$c_1 : c_2 = 1 : \xi$ より，

$$\boldsymbol{p}_1 = \begin{bmatrix} 1 \\ \xi_1 \end{bmatrix} \qquad \boldsymbol{p}_2 = \begin{bmatrix} 1 \\ \xi_2 \end{bmatrix} \tag{7.1.5}$$

ととれる。
(3) 基底 $p = \{\boldsymbol{p}_1, \boldsymbol{p}_2\}$ を用いて $P = [\,\boldsymbol{p}_1\,\boldsymbol{p}_2\,]$ とおくと，

$$P^{-1} = \frac{1}{\xi_2 - \xi_1}\begin{bmatrix} \xi_2 & -1 \\ -\xi_1 & 1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \boldsymbol{\pi}_1 \\ \boldsymbol{\pi}_2 \end{bmatrix} \tag{7.1.6}$$

より，双対基底 $\pi = \{\boldsymbol{\pi}_1, \boldsymbol{\pi}_2\}$ として

$$\boldsymbol{\pi}_1 = [\,\frac{\xi_2}{\xi_2 - \xi_1}\ \ -\frac{1}{\xi_2 - \xi_1}\,] \qquad \boldsymbol{\pi}_2 = [\,-\frac{\xi_1}{\xi_2 - \xi_1}\ \ \frac{1}{\xi_2 - \xi_1}\,] \tag{7.1.7}$$

を得る。
(4)ξ_1，ξ_2，$\boldsymbol{p}_1$，$\boldsymbol{p}_2$，$\boldsymbol{\pi}_1$，$\boldsymbol{\pi}_2$ を用いると，X のスペクトル分解は

$$X = \xi_1 \boldsymbol{p}_1 \boldsymbol{\pi}_1 + \xi_2 \boldsymbol{p}_2 \boldsymbol{\pi}_2 \tag{7.1.8}$$

となる。
(5) 完全性関係 $I_2 = \boldsymbol{p}_1\boldsymbol{\pi}_1 + \boldsymbol{p}_2\boldsymbol{\pi}_2$ および $u_1 = \boldsymbol{\pi}_1\boldsymbol{u}$，$u_2 = \boldsymbol{\pi}_2\boldsymbol{u}$ により $\boldsymbol{u} = I_2\boldsymbol{u} = \boldsymbol{p}_1\boldsymbol{\pi}_1\boldsymbol{u} + \boldsymbol{p}_2\boldsymbol{\pi}_2\boldsymbol{u} = u_1\boldsymbol{p}_1 + u_2\boldsymbol{p}_2$ であるから，$\dot{\boldsymbol{u}} = \dot{u}_1\boldsymbol{p}_1 + \dot{u}_2\boldsymbol{p}_2$ と表せる。一方，X のスペクトル分解 (7.1.8) を用いると $X\boldsymbol{u} = \xi_1\boldsymbol{p}_1\boldsymbol{\pi}_1\boldsymbol{u} + \xi_2\boldsymbol{p}_2\boldsymbol{\pi}_2\boldsymbol{u} = \xi_1 u_1\boldsymbol{p}_1 + \xi_2 u_2\boldsymbol{p}_2$ と表せる。したがって，これらの $\boldsymbol{p}_1$，$\boldsymbol{p}_2$ の係数を比較することにより，$\dot{u}_1 = \xi_1 u_1$，$\dot{u}_2 = \xi_2 u_2$ を得る。
(6)(7.1.3) の一般解は $u_1(t) = u_1(0)e^{\xi_1 t}$，$u_2(t) = u_2(0)e^{\xi_2 t}$ であるから，(7.1.2) の一般解は

$$\boldsymbol{u}(t) = u_1(0)e^{\xi_1 t}\boldsymbol{p}_1 + u_2(0)e^{\xi_2 t}\boldsymbol{p}_2 \tag{7.1.9}$$

と書ける。したがって，(7.1.1) の一般解は

$$x(t) = u_1(0)e^{\xi_1 t} + u_2(0)e^{\xi_2 t} \tag{7.1.10}$$

である。ここで, 初期条件 $u_1(0) = \boldsymbol{\pi}_1\boldsymbol{u}(0)$, $u_2(0) = \boldsymbol{\pi}_2\boldsymbol{u}(0)$ は $x(0)$, $v(0)$ を用いて,

$$u_1(0) = \frac{\xi_2}{\xi_2 - \xi_1}x(0) - \frac{1}{\xi_2 - \xi_1}v(0) \qquad u_2(0) = -\frac{\xi_1}{\xi_2 - \xi_1}x(0) + \frac{1}{\xi_2 - \xi_1}v(0) \tag{7.1.11}$$

によって与えられる。なお，$A = u_1(0) + u_2(0)$，$B = i(u_1(0) - u_2(0))$，$A' = u_1(0)$，$B' = u_2(0)$ とおくと,

$$x(t) = \begin{cases} Ae^{-\gamma t}\cos\sqrt{\omega_0^2 - \gamma^2}\,t + Be^{-\gamma t}\sin\sqrt{\omega_0^2 - \gamma^2}\,t & (\omega_0 > \gamma \text{のとき}) \\ A'e^{-\gamma t - \sqrt{\gamma^2 - \omega_0^2}\,t} + B'e^{-\gamma t + \sqrt{\gamma^2 - \omega_0^2}\,t} & (\omega_0 < \gamma \text{のとき}) \end{cases} \tag{7.1.12}$$

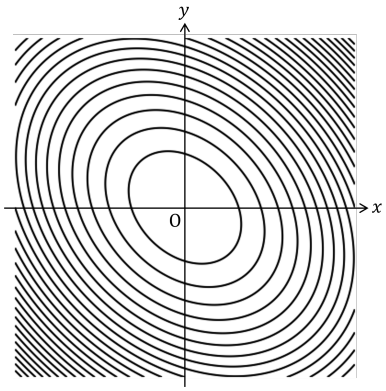
と表せる。

7.1.2　2 次元調和振動子

例題 2. xy 平面上で運動する質量 m の粒子を考える。粒子は等高線図として示したポテンシャル

$$V(\boldsymbol{r}) = \frac{k}{2}x^2 + k'xy + \frac{k}{2}y^2 = \frac{1}{2}\boldsymbol{r}^\dagger K\boldsymbol{r} \qquad \boldsymbol{r} = \begin{bmatrix} x \\ y \end{bmatrix} \qquad K = \begin{bmatrix} k & k' \\ k' & k \end{bmatrix} \tag{7.1.13}$$

の下で運動する。ここで，$\boldsymbol{r} = \boldsymbol{r}(t)$ は時刻 t における粒子の位置ベクトルであり，また，k，k' は $k > k'$ を満たす正の実数である。このとき，粒子の運動は連立微分方程式



$$\begin{cases} m\ddot{x} = -kx - k'y \\ m\ddot{y} = -k'x - ky \end{cases} \tag{7.1.14}$$

によって記述される。あるいは，(7.1.14) はエルミート行列 A を用いて

$$\ddot{\boldsymbol{r}} = A\boldsymbol{r} \qquad A = -\frac{1}{m}K = \begin{bmatrix} -\frac{k}{m} & -\frac{k'}{m} \\ -\frac{k'}{m} & -\frac{k}{m} \end{bmatrix} \tag{7.1.15}$$

と表せる。以下の問いに答えよ。

(1) A の固有値 λ_1，λ_2 および正規化された固有ベクトル $\boldsymbol{p}_1$，$\boldsymbol{p}_2$ を求めよ。

(2) A のスペクトル分解を求めよ。

(3) $q_1 = \boldsymbol{p}_1^\dagger \boldsymbol{r}$，$q_2 = \boldsymbol{p}_2^\dagger \boldsymbol{r}$，$\omega_1 = \sqrt{-\lambda_1}$，$\omega_2 = \sqrt{-\lambda_2}$ とおくと，q_1，q_2 は

$$\ddot{q}_1 = -\omega_1^2 q_1 \qquad\qquad \ddot{q}_2 = -\omega_2^2 q_2 \tag{7.1.16}$$

を満たすことを示せ。

(4) (7.1.14) の一般解を求めよ。

(5) $V(\boldsymbol{r})$ は

$$V(\boldsymbol{r}) = \frac{1}{2} m\omega_1^2 q_1^2 + \frac{1}{2} m\omega_2^2 q_2^2 \tag{7.1.17}$$

と表せることを示せ[2]。

[解答]
(1)$|A - \lambda I_2| = (\lambda + \frac{k}{m})^2 - (\frac{k'}{m})^2 = (\lambda + \frac{k+k'}{m})(\lambda + \frac{k-k'}{m}) = 0$ より，

$$\lambda_1 = -\frac{k+k'}{m} \qquad\qquad \lambda_2 = -\frac{k-k'}{m} \tag{7.1.18}$$

である。$\lambda = \lambda_1$ のとき，

$$\begin{bmatrix} \frac{k'}{m} & -\frac{k'}{m} \\ -\frac{k'}{m} & \frac{k'}{m} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} c_1 \\ c_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \end{bmatrix} \quad \Rightarrow \quad \boldsymbol{p}_1 = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \end{bmatrix} \tag{7.1.19}$$

ととれる。$\lambda = \lambda_2$ のとき，

$$\begin{bmatrix} -\frac{k'}{m} & -\frac{k'}{m} \\ -\frac{k'}{m} & -\frac{k'}{m} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} c_1 \\ c_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \end{bmatrix} \quad \Rightarrow \quad \boldsymbol{p}_2 = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} -1 \\ 1 \end{bmatrix} \tag{7.1.20}$$

ととれる。
(2)$\{\boldsymbol{p}_1, \boldsymbol{p}_2\}$ は正規直交基底であるから，その双対基底は $\{\boldsymbol{p}_1^\dagger, \boldsymbol{p}_2^\dagger\}$ である。したがって，λ_1，λ_2，$\boldsymbol{p}_1$，$\boldsymbol{p}_2$ を用いると，A のスペクトル分解は

$$A = \lambda_1 \boldsymbol{p}_1 \boldsymbol{p}_1^\dagger + \lambda_2 \boldsymbol{p}_2 \boldsymbol{p}_2^\dagger \tag{7.1.21}$$

[2] 2 次形式 $V(\boldsymbol{r})$ を (7.1.13) のように異なる変数の積 xy を含む形から (7.1.17) のように異なる変数の積 $q_1 q_2$ を含まない形に変換したものを **2 次形式の標準形**といいます。2 次形式の標準形を求める問題を**主軸問題**，2 次形式を標準形として表すための q_1 軸や q_2 軸のような新しい座標軸を**主軸**といいます。

となる。
(3) 完全性関係 $I_2 = \boldsymbol{p}_1\boldsymbol{p}_1^\dagger + \boldsymbol{p}_2\boldsymbol{p}_2^\dagger$ および $q_1 = \boldsymbol{p}_1^\dagger\boldsymbol{r}$，$q_2 = \boldsymbol{p}_2^\dagger\boldsymbol{r}$ より $\boldsymbol{r} = I_2\boldsymbol{r} = \boldsymbol{p}_1\boldsymbol{p}_1^\dagger\boldsymbol{r} + \boldsymbol{p}_2\boldsymbol{p}_2^\dagger\boldsymbol{r} = q_1\boldsymbol{p}_1 + q_2\boldsymbol{p}_2$ であるから，$\ddot{\boldsymbol{r}} = \ddot{q}_1\boldsymbol{p}_1 + \ddot{q}_2\boldsymbol{p}_2$ と表せる。一方，A のスペクトル分解 (7.1.21) を用いると $A\boldsymbol{r} = \lambda_1\boldsymbol{p}_1\boldsymbol{p}_1^\dagger\boldsymbol{r} + \lambda_2\boldsymbol{p}_2\boldsymbol{p}_2^\dagger\boldsymbol{r} = \lambda_1 q_1\boldsymbol{p}_1 + \lambda_2 q_2\boldsymbol{p}_2$ と表せる。したがって, これらの $\boldsymbol{p}_1$, $\boldsymbol{p}_2$ の係数を比較することにより, $\ddot{q}_1 = \lambda_1 q_1 = -\omega_1^2 q_1$, $\ddot{q}_2 = \lambda_2 q_2 = -\omega_2^2 q_2$ を得る。
(4)(7.1.16) の一般解は $q_1(t) = q_1(0)\cos\omega_1 t + \frac{\dot{q}_1(0)}{\omega_1}\sin\omega_1 t$，$q_2(t) = q_2(0)\cos\omega_2 t + \frac{\dot{q}_2(0)}{\omega_2}\sin\omega_2 t$ であるから，(7.1.15) の一般解は

$$\boldsymbol{r}(t) = q_1(t)\boldsymbol{p}_1 + q_2(t)\boldsymbol{p}_2 \tag{7.1.22}$$

と書ける。したがって，(7.1.14) の一般解は

$$\begin{cases} x(t) = \frac{1}{\sqrt{2}}(q_1(t) - q_2(t)) \\ y(t) = \frac{1}{\sqrt{2}}(q_1(t) + q_2(t)) \end{cases} \tag{7.1.23}$$

である。初期条件 $q_1(0) = \boldsymbol{p}_1^\dagger\boldsymbol{r}(0)$，$q_2(0) = \boldsymbol{p}_2^\dagger\boldsymbol{r}(0)$，$\dot{q}_1(0) = \boldsymbol{p}_1^\dagger\dot{\boldsymbol{r}}(0)$，$\dot{q}_2(0) = \boldsymbol{p}_2^\dagger\dot{\boldsymbol{r}}(0)$ は $x(0)$，$y(0)$，$\dot{x}(0)$，$\dot{y}(0)$ を用いて,

$$\begin{aligned} q_1(0) &= \frac{1}{\sqrt{2}}(x(0) + y(0)) & q_2(0) &= \frac{1}{\sqrt{2}}(-x(0) + y(0)) \\ \dot{q}_1(0) &= \frac{1}{\sqrt{2}}(\dot{x}(0) + \dot{y}(0)) & \dot{q}_2(0) &= \frac{1}{\sqrt{2}}(-\dot{x}(0) + \dot{y}(0)) \end{aligned} \tag{7.1.24}$$

によって与えられる。
(5)A のスペクトル分解 (7.1.21) を用いると $\boldsymbol{r}^\dagger K\boldsymbol{r} = -m\boldsymbol{r}^\dagger A\boldsymbol{r} = -m\boldsymbol{r}^\dagger(\lambda_1\boldsymbol{p}_1\boldsymbol{p}_1^\dagger + \lambda_2\boldsymbol{p}_2\boldsymbol{p}_2^\dagger)\boldsymbol{r} = m\omega_1^2\boldsymbol{r}^\dagger\boldsymbol{p}_1\boldsymbol{p}_1^\dagger\boldsymbol{r} + m\omega_2^2\boldsymbol{r}^\dagger\boldsymbol{p}_2\boldsymbol{p}_2^\dagger\boldsymbol{r}$ と書ける。したがって, $q_1 = \boldsymbol{p}_1^\dagger\boldsymbol{r}$, $q_2 = \boldsymbol{p}_2^\dagger\boldsymbol{r}$ は実数であるから,

$$V(\boldsymbol{r}) = \frac{1}{2}\boldsymbol{r}^\dagger K\boldsymbol{r} = \frac{1}{2}m\omega_1^2 q_1^2 + \frac{1}{2}m\omega_2^2 q_2^2 \tag{7.1.25}$$

と表せる。

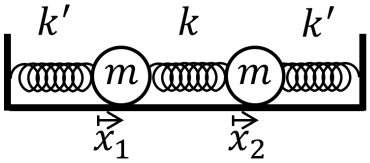
7.1.3　2 粒子系の連成振動 (同じ質量の場合)

例題 3. 図のように同じ質量 m の粒子 1，2 がばね定数 k と k' の 2 種類のばねで連結された系の連成振動を考える。この系のラグランジアン L は

$$\begin{aligned} L &= \frac{1}{2}m\dot{x}_1^2 + \frac{1}{2}m\dot{x}_2^2 - \frac{1}{2}k'x_1^2 - \frac{1}{2}k(x_1 - x_2)^2 - \frac{1}{2}k'x_2^2 \\ &= \frac{1}{2}m\dot{\boldsymbol{x}}^\dagger\dot{\boldsymbol{x}} - \frac{1}{2}\boldsymbol{x}^\dagger K\boldsymbol{x} \qquad \boldsymbol{x} = \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix} \qquad K = \begin{bmatrix} k + k' & -k \\ -k & k + k' \end{bmatrix} \end{aligned} \tag{7.1.26}$$

である。ここで，$x_1 = x_1(t)$，$x_2 = x_2(t)$ は時刻 t における粒子 1，2 の平衡位置からの変位である。このとき，粒子の運動は連立微分方程式

$$\begin{cases} m\ddot{x}_1 = -(k+k')x_1 + kx_2 \\ m\ddot{x}_2 = kx_1 - (k+k')x_2 \end{cases} \tag{7.1.27}$$



によって記述される。あるいは，(7.1.27) はエルミート行列 A を用いて

$$\ddot{\boldsymbol{x}} = A\boldsymbol{x} \qquad A = -\frac{1}{m}K = \begin{bmatrix} -\frac{k+k'}{m} & \frac{k}{m} \\ \frac{k}{m} & -\frac{k+k'}{m} \end{bmatrix} \tag{7.1.28}$$

と表せる。以下の問いに答えよ。

(1) A の固有値 λ_1，λ_2 および正規化された固有ベクトル $\boldsymbol{p}_1$，$\boldsymbol{p}_2$ を求めよ。

(2) A のスペクトル分解を求めよ。

(3) $q_1 = \boldsymbol{p}_1^\dagger \boldsymbol{x}$，$q_2 = \boldsymbol{p}_2^\dagger \boldsymbol{x}$，$\omega_1 = \sqrt{-\lambda_1}$，$\omega_2 = \sqrt{-\lambda_2}$ とおくと，q_1，q_2 は

$$\ddot{q}_1 = -\omega_1^2 q_1 \qquad \ddot{q}_2 = -\omega_2^2 q_2 \tag{7.1.29}$$

を満たすことを示せ。

(4) (7.1.27) の一般解を求めよ。

(5) L は

$$L = \frac{1}{2}m\dot{q}_1^2 - \frac{1}{2}m\omega_1^2 q_1^2 + \frac{1}{2}m\dot{q}_2^2 - \frac{1}{2}m\omega_2^2 q_2^2 \tag{7.1.30}$$

と表せることを示せ。

[解答]

(1)$|A - \lambda I_2| = (\lambda + \frac{k+k'}{m})^2 - (\frac{k}{m})^2 = (\lambda + \frac{k'}{m})(\lambda + \frac{2k+k'}{m}) = 0$ より，

$$\lambda_1 = -\frac{k'}{m} \qquad \lambda_2 = -\frac{2k+k'}{m} \tag{7.1.31}$$

である。$\lambda = \lambda_1$ のとき，

$$\begin{bmatrix} -\frac{k}{m} & \frac{k}{m} \\ \frac{k}{m} & -\frac{k}{m} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} c_1 \\ c_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \end{bmatrix} \quad \Rightarrow \quad \boldsymbol{p}_1 = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \end{bmatrix} \tag{7.1.32}$$

ととれる。$\lambda = \lambda_2$ のとき,

$$\begin{bmatrix} \frac{k}{m} & \frac{k}{m} \\ \frac{k}{m} & \frac{k}{m} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} c_1 \\ c_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \end{bmatrix} \quad \Rightarrow \quad \boldsymbol{p}_2 = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} -1 \\ 1 \end{bmatrix} \tag{7.1.33}$$

ととれる。

(2)$\{\boldsymbol{p}_1, \boldsymbol{p}_2\}$ は正規直交基底であるから，その双対基底は $\{\boldsymbol{p}_1^\dagger, \boldsymbol{p}_2^\dagger\}$ である。したがって，λ_1，λ_2，$\boldsymbol{p}_1$，$\boldsymbol{p}_2$ を用いると，A のスペクトル分解は

$$A = \lambda_1 \boldsymbol{p}_1 \boldsymbol{p}_1^\dagger + \lambda_2 \boldsymbol{p}_2 \boldsymbol{p}_2^\dagger \tag{7.1.34}$$

となる。

(3) 完全性関係 $I_2 = \boldsymbol{p}_1\boldsymbol{p}_1^\dagger + \boldsymbol{p}_2\boldsymbol{p}_2^\dagger$ および $q_1 = \boldsymbol{p}_1^\dagger \boldsymbol{x}$，$q_2 = \boldsymbol{p}_2^\dagger \boldsymbol{x}$ より $\boldsymbol{x} = I_2\boldsymbol{x} = \boldsymbol{p}_1\boldsymbol{p}_1^\dagger\boldsymbol{x} + \boldsymbol{p}_2\boldsymbol{p}_2^\dagger\boldsymbol{x} = q_1\boldsymbol{p}_1 + q_2\boldsymbol{p}_2$ であるから, $\ddot{\boldsymbol{x}} = \ddot{q}_1\boldsymbol{p}_1 + \ddot{q}_2\boldsymbol{p}_2$ と表せる。一方, A のスペクトル分解 (7.1.34) を用いると $A\boldsymbol{x} = \lambda_1\boldsymbol{p}_1\boldsymbol{p}_1^\dagger\boldsymbol{x} + \lambda_2\boldsymbol{p}_2\boldsymbol{p}_2^\dagger\boldsymbol{x} = \lambda_1 q_1 \boldsymbol{p}_1 + \lambda_2 q_2 \boldsymbol{p}_2$ と表せる。したがって, これらの $\boldsymbol{p}_1$, $\boldsymbol{p}_2$ の係数を比較することにより, $\ddot{q}_1 = \lambda_1 q_1 = -\omega_1^2 q_1$, $\ddot{q}_2 = \lambda_2 q_2 = -\omega_2^2 q_2$ を得る。

(4)(7.1.29) の一般解は $q_1(t) = q_1(0)\cos\omega_1 t + \frac{\dot{q}_1(0)}{\omega_1}\sin\omega_1 t$，$q_2(t) = q_2(0)\cos\omega_2 t + \frac{\dot{q}_2(0)}{\omega_2}\sin\omega_2 t$ であるから，(7.1.28) の一般解は

$$\boldsymbol{x}(t) = q_1(t)\boldsymbol{p}_1 + q_2(t)\boldsymbol{p}_2 \tag{7.1.35}$$

と書ける。したがって，(7.1.27) の一般解は

$$\begin{cases} x_1(t) = \frac{1}{\sqrt{2}}(q_1(t) - q_2(t)) \\ x_2(t) = \frac{1}{\sqrt{2}}(q_1(t) + q_2(t)) \end{cases} \tag{7.1.36}$$

である。初期条件 $q_1(0) = \boldsymbol{p}_1^\dagger\boldsymbol{x}(0)$, $q_2(0) = \boldsymbol{p}_2^\dagger\boldsymbol{x}(0)$, $\dot{q}_1(0) = \boldsymbol{p}_1^\dagger\dot{\boldsymbol{x}}(0)$, $\dot{q}_2(0) = \boldsymbol{p}_2^\dagger\dot{\boldsymbol{x}}(0)$ は $x_1(0)$，$x_2(0)$，$\dot{x}_1(0)$，$\dot{x}_2(0)$ を用いて,

$$\begin{aligned} q_1(0) &= \frac{1}{\sqrt{2}}(x_1(0) + x_2(0)) & q_2(0) &= \frac{1}{\sqrt{2}}(-x_1(0) + x_2(0)) \\ \dot{q}_1(0) &= \frac{1}{\sqrt{2}}(\dot{x}_1(0) + \dot{x}_2(0)) & \dot{q}_2(0) &= \frac{1}{\sqrt{2}}(-\dot{x}_1(0) + \dot{x}_2(0)) \end{aligned} \tag{7.1.37}$$

によって与えられる。

(5) 完全性関係 $I_2 = \boldsymbol{p}_1\boldsymbol{p}_1^\dagger + \boldsymbol{p}_2\boldsymbol{p}_2^\dagger$ を用いると $\dot{\boldsymbol{x}}^\dagger\dot{\boldsymbol{x}} = \dot{\boldsymbol{x}}^\dagger I_2\dot{\boldsymbol{x}} = \dot{\boldsymbol{x}}^\dagger\boldsymbol{p}_1\boldsymbol{p}_1^\dagger\dot{\boldsymbol{x}} + \dot{\boldsymbol{x}}^\dagger\boldsymbol{p}_2\boldsymbol{p}_2^\dagger\dot{\boldsymbol{x}} = \dot{q}_1^2 + \dot{q}_2^2$ と書ける。また, A のスペクトル分解 (7.1.34) を用いると $\boldsymbol{x}^\dagger K\boldsymbol{x} = -m\boldsymbol{x}^\dagger A\boldsymbol{x} = -m\boldsymbol{x}^\dagger(\lambda_1\boldsymbol{p}_1\boldsymbol{p}_1^\dagger + \lambda_2\boldsymbol{p}_2\boldsymbol{p}_2^\dagger)\boldsymbol{x} = m\omega_1^2\boldsymbol{x}^\dagger\boldsymbol{p}_1\boldsymbol{p}_1^\dagger\boldsymbol{x} + m\omega_2^2\boldsymbol{x}^\dagger\boldsymbol{p}_2\boldsymbol{p}_2^\dagger\boldsymbol{x} = m\omega_1^2 q_1^2 + m\omega_2^2 q_2^2$ と書ける。したがって,

$$L = \frac{1}{2}m\dot{\boldsymbol{x}}^\dagger\dot{\boldsymbol{x}} - \frac{1}{2}\boldsymbol{x}^\dagger K\boldsymbol{x} = \frac{1}{2}m\dot{q}_1^2 - \frac{1}{2}m\omega_1^2 q_1^2 + \frac{1}{2}m\dot{q}_2^2 - \frac{1}{2}m\omega_2^2 q_2^2 \tag{7.1.38}$$

と表せる。

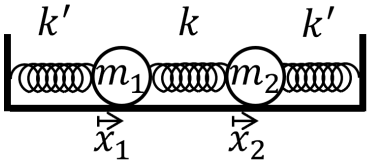
7.1.4　2 粒子系の連成振動 (異なる質量の場合)

例題 4. 図のように質量 m_1，m_2 の粒子 1，2 がばね定数 k と k' の 2 種類のばねで連結された系の連成振動を考える。この系のラグランジアン L は

$$
\begin{aligned}
L &= \frac{1}{2}m_1\dot{x}_1^2 + \frac{1}{2}m_2\dot{x}_2^2 - \frac{1}{2}k'x_1^2 - \frac{1}{2}k(x_1-x_2)^2 - \frac{1}{2}k'x_2^2 \\
&= \frac{1}{2}\dot{\boldsymbol{x}}^\dagger M\dot{\boldsymbol{x}} - \frac{1}{2}\boldsymbol{x}^\dagger K\boldsymbol{x} \qquad \boldsymbol{x} = \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix} \qquad M = \begin{bmatrix} m_1 & 0 \\ 0 & m_2 \end{bmatrix} \qquad K = \begin{bmatrix} k+k' & -k \\ -k & k+k' \end{bmatrix}
\end{aligned}
\tag{7.1.39}
$$

である。ここで，$x_1 = x_1(t)$，$x_2 = x_2(t)$ は時刻 t における粒子 1，2 の平衡位置からの変位である。このとき，粒子の運動は連立微分方程式

$$
\begin{cases} m_1\ddot{x}_1 = -(k+k')x_1 + kx_2 \\ m_2\ddot{x}_2 = kx_1 - (k+k')x_2 \end{cases} \tag{7.1.40}
$$



によって記述される。あるいは, (7.1.40) は $\boldsymbol{\xi} = \sqrt{M}\boldsymbol{x}$ とエルミート行列 A を用いて

$$
\begin{aligned}
&\ddot{\boldsymbol{\xi}} = A\boldsymbol{\xi} \qquad \boldsymbol{\xi} = \begin{bmatrix} \xi_1 \\ \xi_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \sqrt{m_1}x_1 \\ \sqrt{m_2}x_2 \end{bmatrix} \\
&\sqrt{M} = \begin{bmatrix} \sqrt{m_1} & 0 \\ 0 & \sqrt{m_2} \end{bmatrix} \qquad A = -\frac{1}{\sqrt{M}}K\frac{1}{\sqrt{M}} = \begin{bmatrix} -\frac{k+k'}{m_1} & \frac{k}{\sqrt{m_1m_2}} \\ \frac{k}{\sqrt{m_1m_2}} & -\frac{k+k'}{m_2} \end{bmatrix}
\end{aligned}
\tag{7.1.41}
$$

と表せる。以下の問いに答えよ。

(1) A の固有値 λ_1，λ_2 および正規化された固有ベクトル $\boldsymbol{p}_1$，$\boldsymbol{p}_2$ を求めよ。

(2) A のスペクトル分解を求めよ。

(3) $q_1 = \boldsymbol{p}_1^\dagger\boldsymbol{\xi}$，$q_2 = \boldsymbol{p}_2^\dagger\boldsymbol{\xi}$，$\omega_1 = \sqrt{-\lambda_1}$，$\omega_2 = \sqrt{-\lambda_2}$ とおくと，q_1，q_2 は

$$
\ddot{q}_1 = -\omega_1^2 q_1 \qquad \ddot{q}_2 = -\omega_2^2 q_2 \tag{7.1.42}
$$

を満たすことを示せ。

(4) (7.1.40) の一般解を求めよ。

(5) L は

$$L = \frac{1}{2}\dot{q}_1^2 - \frac{1}{2}\omega_1^2 q_1^2 + \frac{1}{2}\dot{q}_2^2 - \frac{1}{2}\omega_2^2 q_2^2 \tag{7.1.43}$$

と表せることを示せ。

[解答]
(1)2 行 2 列のエルミート行列の固有値・固有ベクトル (3.3.61) を用いると，$\delta = -\frac{k+k'}{2}(\frac{1}{m_1} - \frac{1}{m_2})$，$\Delta = \sqrt{\delta^2 + \frac{k^2}{m_1 m_2}}$ として，

$$\lambda_1 = -\left(\frac{k+k'}{2}\left(\frac{1}{m_1} + \frac{1}{m_2}\right) - \Delta\right) \qquad \lambda_2 = -\left(\frac{k+k'}{2}\left(\frac{1}{m_1} + \frac{1}{m_2}\right) + \Delta\right) \tag{7.1.44}$$

である。固有値 λ_1，λ_2 に属する固有ベクトル $\boldsymbol{p}_1$，$\boldsymbol{p}_2$ は

$$\boldsymbol{p}_1 = \begin{bmatrix} u \\ v \end{bmatrix} \qquad \boldsymbol{p}_2 = \begin{bmatrix} -v \\ u \end{bmatrix} \tag{7.1.45}$$

ととれる。ここで，

$$u = \sqrt{\frac{1}{2}\left(1 + \frac{\delta}{\Delta}\right)} \qquad v = \sqrt{\frac{1}{2}\left(1 - \frac{\delta}{\Delta}\right)} \tag{7.1.46}$$

である。
(2)$\{\boldsymbol{p}_1, \boldsymbol{p}_2\}$ は正規直交基底であるから，その双対基底は $\{\boldsymbol{p}_1^\dagger, \boldsymbol{p}_2^\dagger\}$ である。したがって，λ_1，λ_2，$\boldsymbol{p}_1$，$\boldsymbol{p}_2$ を用いると，A のスペクトル分解は

$$A = \lambda_1 \boldsymbol{p}_1 \boldsymbol{p}_1^\dagger + \lambda_2 \boldsymbol{p}_2 \boldsymbol{p}_2^\dagger \tag{7.1.47}$$

となる。
(3) 完全性関係 $I_2 = \boldsymbol{p}_1\boldsymbol{p}_1^\dagger + \boldsymbol{p}_2\boldsymbol{p}_2^\dagger$ および $q_1 = \boldsymbol{p}_1^\dagger\boldsymbol{\xi}$，$q_2 = \boldsymbol{p}_2^\dagger\boldsymbol{\xi}$ より $\boldsymbol{\xi} = I_2\boldsymbol{\xi} = \boldsymbol{p}_1\boldsymbol{p}_1^\dagger\boldsymbol{\xi} + \boldsymbol{p}_2\boldsymbol{p}_2^\dagger\boldsymbol{\xi} = q_1\boldsymbol{p}_1 + q_2\boldsymbol{p}_2$ であるから，$\ddot{\boldsymbol{\xi}} = \ddot{q}_1\boldsymbol{p}_1 + \ddot{q}_2\boldsymbol{p}_2$ と表せる。一方，A のスペクトル分解 (7.1.47) を用いると $A\boldsymbol{\xi} = \lambda_1\boldsymbol{p}_1\boldsymbol{p}_1^\dagger\boldsymbol{\xi} + \lambda_2\boldsymbol{p}_2\boldsymbol{p}_2^\dagger\boldsymbol{\xi} = \lambda_1 q_1\boldsymbol{p}_1 + \lambda_2 q_2\boldsymbol{p}_2$ と表せる。したがって，これらの $\boldsymbol{p}_1$, $\boldsymbol{p}_2$ の係数を比較することにより，$\ddot{q}_1 = \lambda_1 q_1 = -\omega_1^2 q_1$，$\ddot{q}_2 = \lambda_2 q_2 = -\omega_2^2 q_2$ を得る。
(4)(7.1.42) の一般解は $q_1(t) = q_1(0)\cos\omega_1 t + \frac{\dot{q}_1(0)}{\omega_1}\sin\omega_1 t$，$q_2(t) = q_2(0)\cos\omega_2 t + \frac{\dot{q}_2(0)}{\omega_2}\sin\omega_2 t$ であるから，(7.1.41) の一般解は

$$\boldsymbol{x}(t) = \frac{1}{\sqrt{M}}(q_1(t)\boldsymbol{p}_1 + q_2(t)\boldsymbol{p}_2) \tag{7.1.48}$$

と書ける。したがって，(7.1.40) の一般解は

$$\begin{cases} x_1(t) = \frac{1}{\sqrt{m_1}}(uq_1(t) - vq_2(t)) \\ x_2(t) = \frac{1}{\sqrt{m_2}}(vq_1(t) + uq_2(t)) \end{cases} \tag{7.1.49}$$

である。初期条件 $q_1(0) = \boldsymbol{p}_1^\dagger \boldsymbol{\xi}(0)$，$q_2(0) = \boldsymbol{p}_2^\dagger \boldsymbol{\xi}(0)$，$\dot{q}_1(0) = \boldsymbol{p}_1^\dagger \dot{\boldsymbol{\xi}}(0)$，$\dot{q}_2(0) = \boldsymbol{p}_2^\dagger \dot{\boldsymbol{\xi}}(0)$ は $x_1(0)$，$x_2(0)$，$\dot{x}_1(0)$，$\dot{x}_2(0)$ を用いて，

$$\begin{aligned} q_1(0) &= u\sqrt{m_1}x_1(0) + v\sqrt{m_2}x_2(0) & q_2(0) &= -v\sqrt{m_1}x_1(0) + u\sqrt{m_2}x_2(0) \\ \dot{q}_1(0) &= u\sqrt{m_1}\dot{x}_1(0) + v\sqrt{m_2}\dot{x}_2(0) & \dot{q}_2(0) &= -v\sqrt{m_1}\dot{x}_1(0) + u\sqrt{m_2}\dot{x}_2(0) \end{aligned} \tag{7.1.50}$$

によって与えられる。
(5) 完全性関係 $I_2 = \boldsymbol{p}_1\boldsymbol{p}_1^\dagger + \boldsymbol{p}_2\boldsymbol{p}_2^\dagger$ を用いると $\dot{\boldsymbol{x}}^\dagger M\dot{\boldsymbol{x}} = \dot{\boldsymbol{\xi}}^\dagger\dot{\boldsymbol{\xi}} = \dot{\boldsymbol{\xi}}^\dagger I_2\dot{\boldsymbol{\xi}} = \dot{\boldsymbol{\xi}}^\dagger\boldsymbol{p}_1\boldsymbol{p}_1^\dagger\dot{\boldsymbol{\xi}} + \dot{\boldsymbol{\xi}}^\dagger\boldsymbol{p}_2\boldsymbol{p}_2^\dagger\dot{\boldsymbol{\xi}} = \dot{q}_1^2 + \dot{q}_2^2$ と書ける。また, A のスペクトル分解 (7.1.47) を用いると $\boldsymbol{x}^\dagger K\boldsymbol{x} = -\boldsymbol{\xi}^\dagger A\boldsymbol{\xi} = -\boldsymbol{\xi}^\dagger(\lambda_1\boldsymbol{p}_1\boldsymbol{p}_1^\dagger + \lambda_2\boldsymbol{p}_2\boldsymbol{p}_2^\dagger)\boldsymbol{\xi} = \omega_1^2\boldsymbol{\xi}^\dagger\boldsymbol{p}_1\boldsymbol{p}_1^\dagger\boldsymbol{\xi} + \omega_2^2\boldsymbol{\xi}^\dagger\boldsymbol{p}_2\boldsymbol{p}_2^\dagger\boldsymbol{\xi} = \omega_1^2 q_1^2 + \omega_2^2 q_2^2$ と書ける。したがって，

$$L = \frac{1}{2}\dot{\boldsymbol{x}}^\dagger M\dot{\boldsymbol{x}} - \frac{1}{2}\boldsymbol{x}^\dagger K\boldsymbol{x} = \frac{1}{2}\dot{q}_1^2 - \frac{1}{2}\omega_1^2 q_1^2 + \frac{1}{2}\dot{q}_2^2 - \frac{1}{2}\omega_2^2 q_2^2 \tag{7.1.51}$$

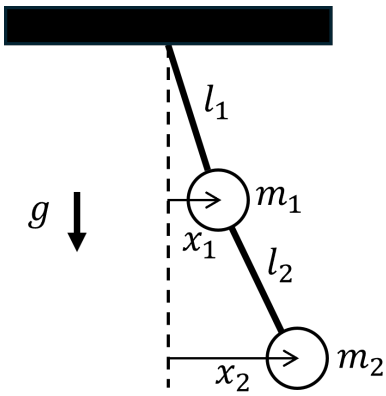
と表せる。

7.1.5　2 重振り子 (変位を座標とする場合)

例題 5. 図のように質量 m_1，m_2 の粒子 1，2 が長さ l_1，l_2 の軽い棒で連結された 2 重振り子の連成振動を考える。この系のラグランジアン L は

$$\begin{aligned} L &= \frac{1}{2}m_1\dot{x}_1^2 + \frac{1}{2}m_2\dot{x}_2^2 - \frac{1}{2}(m_1+m_2)\frac{g}{l_1}x_1^2 - \frac{1}{2}m_2\frac{g}{l_2}(x_1-x_2)^2 \\ &= \frac{1}{2}\dot{\boldsymbol{x}}^\dagger M\dot{\boldsymbol{x}} - \frac{1}{2}\boldsymbol{x}^\dagger K\boldsymbol{x} \qquad \boldsymbol{x} = \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix} \\ M &= \begin{bmatrix} m_1 & 0 \\ 0 & m_2 \end{bmatrix} \qquad K = \begin{bmatrix} (m_1+m_2)\frac{g}{l_1} + m_2\frac{g}{l_2} & -m_2\frac{g}{l_2} \\ -m_2\frac{g}{l_2} & m_2\frac{g}{l_2} \end{bmatrix} \end{aligned} \tag{7.1.52}$$

である。ここで，$x_1 = x_1(t)$，$x_2 = x_2(t)$ は時刻 t における粒子 1，2 の平衡位置からの変位である。このとき，粒子の運動は連立微分方程式



$$\begin{cases} m_1\ddot{x}_1 = -((m_1+m_2)\frac{g}{l_1} + m_2\frac{g}{l_2})x_1 + m_2\frac{g}{l_2}x_2 \\ m_2\ddot{x}_2 = m_2\frac{g}{l_2}x_1 - m_2\frac{g}{l_2}x_2 \end{cases} \tag{7.1.53}$$

によって記述される。あるいは, (7.1.53) は $\boldsymbol{\xi} = \sqrt{M}\boldsymbol{x}$ とエルミート行列 A を用いて

$$\begin{aligned} &\ddot{\boldsymbol{\xi}} = A\boldsymbol{\xi} \qquad \boldsymbol{\xi} = \begin{bmatrix} \xi_1 \\ \xi_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \sqrt{m_1}x_1 \\ \sqrt{m_2}x_2 \end{bmatrix} \qquad \sqrt{M} = \begin{bmatrix} \sqrt{m_1} & 0 \\ 0 & \sqrt{m_2} \end{bmatrix} \\ &A = -\frac{1}{\sqrt{M}}K\frac{1}{\sqrt{M}} = \frac{g}{l_1}\begin{bmatrix} -(1+\frac{m_2}{m_1}) - \frac{m_2}{m_1}\frac{l_1}{l_2} & \sqrt{\frac{m_2}{m_1}}\frac{l_1}{l_2} \\ \sqrt{\frac{m_2}{m_1}}\frac{l_1}{l_2} & -\frac{l_1}{l_2} \end{bmatrix} \end{aligned} \tag{7.1.54}$$

と表せる。以下の問いに答えよ。

(1) A の固有値 λ_1，λ_2 および正規化された固有ベクトル $\boldsymbol{p}_1$，$\boldsymbol{p}_2$ を求めよ。

(2) A のスペクトル分解を求めよ。

(3) $q_1 = \boldsymbol{p}_1^\dagger\boldsymbol{\xi}$，$q_2 = \boldsymbol{p}_2^\dagger\boldsymbol{\xi}$，$\omega_1 = \sqrt{-\lambda_1}$，$\omega_2 = \sqrt{-\lambda_2}$ とおくと，q_1，q_2 は

$$\ddot{q}_1 = -\omega_1^2 q_1 \qquad \ddot{q}_2 = -\omega_2^2 q_2 \tag{7.1.55}$$

を満たすことを示せ。

(4) (7.1.53) の一般解を求めよ。

(5) L は

$$L = \frac{1}{2}\dot{q}_1^2 - \frac{1}{2}\omega_1^2 q_1^2 + \frac{1}{2}\dot{q}_2^2 - \frac{1}{2}\omega_2^2 q_2^2 \tag{7.1.56}$$

と表せることを示せ。

[解答]
(1)2 行 2 列のエルミート行列の固有値・固有ベクトル (3.3.61) を用いると，$\delta =$

$-\frac{1}{2}((1+\frac{m_2}{m_1})-(1-\frac{m_2}{m_1})\frac{l_1}{l_2})$，$\Delta=\sqrt{\delta^2+\frac{m_2}{m_1}(\frac{l_1}{l_2})^2}$ として，

$$
\begin{aligned}
\lambda_1 &= -\frac{g}{l_1}\left(\frac{1}{2}\left(1+\frac{m_2}{m_1}\right)\left(1+\frac{l_1}{l_2}\right)-\Delta\right) \\
&= -\frac{g}{2l_1}\left(\left(1+\frac{m_2}{m_1}\right)\left(1+\frac{l_1}{l_2}\right)-\sqrt{\left(1+\frac{m_2}{m_1}\right)\left(\left(1-\frac{l_1}{l_2}\right)^2+\frac{m_2}{m_1}\left(1+\frac{l_1}{l_2}\right)^2\right)}\right) \\
\lambda_2 &= -\frac{g}{l_1}\left(\frac{1}{2}\left(1+\frac{m_2}{m_1}\right)\left(1+\frac{l_1}{l_2}\right)+\Delta\right) \\
&= -\frac{g}{2l_1}\left(\left(1+\frac{m_2}{m_1}\right)\left(1+\frac{l_1}{l_2}\right)+\sqrt{\left(1+\frac{m_2}{m_1}\right)\left(\left(1-\frac{l_1}{l_2}\right)^2+\frac{m_2}{m_1}\left(1+\frac{l_1}{l_2}\right)^2\right)}\right)
\end{aligned}
\tag{7.1.57}
$$

である。固有値 λ_1，λ_2 に属する固有ベクトル $\boldsymbol{p}_1$，$\boldsymbol{p}_2$ は

$$
\boldsymbol{p}_1=\begin{bmatrix}u\\v\end{bmatrix} \qquad \boldsymbol{p}_2=\begin{bmatrix}-v\\u\end{bmatrix} \tag{7.1.58}
$$

ととれる。ここで，

$$
u=\sqrt{\frac{1}{2}\left(1+\frac{\delta}{\Delta}\right)} \qquad v=\sqrt{\frac{1}{2}\left(1-\frac{\delta}{\Delta}\right)} \tag{7.1.59}
$$

である。

(2)$\{\boldsymbol{p}_1,\boldsymbol{p}_2\}$ は正規直交基底であるから，その双対基底は $\{\boldsymbol{p}_1^\dagger,\boldsymbol{p}_2^\dagger\}$ である。したがって，λ_1，λ_2，$\boldsymbol{p}_1$，$\boldsymbol{p}_2$ を用いると，A のスペクトル分解は

$$
A=\lambda_1\boldsymbol{p}_1\boldsymbol{p}_1^\dagger+\lambda_2\boldsymbol{p}_2\boldsymbol{p}_2^\dagger \tag{7.1.60}
$$

となる。

(3) 完全性関係 $I_2=\boldsymbol{p}_1\boldsymbol{p}_1^\dagger+\boldsymbol{p}_2\boldsymbol{p}_2^\dagger$ および $q_1=\boldsymbol{p}_1^\dagger\boldsymbol{\xi}$，$q_2=\boldsymbol{p}_2^\dagger\boldsymbol{\xi}$ より $\boldsymbol{\xi}=I_2\boldsymbol{\xi}=\boldsymbol{p}_1\boldsymbol{p}_1^\dagger\boldsymbol{\xi}+\boldsymbol{p}_2\boldsymbol{p}_2^\dagger\boldsymbol{\xi}=q_1\boldsymbol{p}_1+q_2\boldsymbol{p}_2$ であるから，$\ddot{\boldsymbol{\xi}}=\ddot{q}_1\boldsymbol{p}_1+\ddot{q}_2\boldsymbol{p}_2$ と表せる。一方，A のスペクトル分解 (7.1.60) を用いると $A\boldsymbol{\xi}=\lambda_1\boldsymbol{p}_1\boldsymbol{p}_1^\dagger\boldsymbol{\xi}+\lambda_2\boldsymbol{p}_2\boldsymbol{p}_2^\dagger\boldsymbol{\xi}=\lambda_1q_1\boldsymbol{p}_1+\lambda_2q_2\boldsymbol{p}_2$ と表せる。したがって，これらの $\boldsymbol{p}_1$, $\boldsymbol{p}_2$ の係数を比較することにより，$\ddot{q}_1=\lambda_1q_1=-\omega_1^2q_1$，$\ddot{q}_2=\lambda_2q_2=-\omega_2^2q_2$ を得る。

(4)(7.1.55) の一般解は $q_1(t)=q_1(0)\cos\omega_1t+\frac{\dot{q}_1(0)}{\omega_1}\sin\omega_1t$，$q_2(t)=q_2(0)\cos\omega_2t+$

$\frac{\dot{q}_2(0)}{\omega_2}\sin\omega_2 t$ であるから，(7.1.54) の一般解は

$$\boldsymbol{x}(t) = \frac{1}{\sqrt{M}}(q_1(t)\boldsymbol{p}_1 + q_2(t)\boldsymbol{p}_2) \tag{7.1.61}$$

と書ける。したがって，(7.1.53) の一般解は

$$\begin{cases} x_1(t) = \frac{1}{\sqrt{m_1}}(uq_1(t) - vq_2(t)) \\ x_2(t) = \frac{1}{\sqrt{m_2}}(vq_1(t) + uq_2(t)) \end{cases} \tag{7.1.62}$$

である。初期条件 $q_1(0) = \boldsymbol{p}_1^\dagger\boldsymbol{\xi}(0)$，$q_2(0) = \boldsymbol{p}_2^\dagger\boldsymbol{\xi}(0)$，$\dot{q}_1(0) = \boldsymbol{p}_1^\dagger\dot{\boldsymbol{\xi}}(0)$，$\dot{q}_2(0) = \boldsymbol{p}_2^\dagger\dot{\boldsymbol{\xi}}(0)$ は $x_1(0)$，$x_2(0)$，$\dot{x}_1(0)$，$\dot{x}_2(0)$ を用いて，

$$\begin{aligned} q_1(0) &= u\sqrt{m_1}x_1(0) + v\sqrt{m_2}x_2(0) & q_2(0) &= -v\sqrt{m_1}x_1(0) + u\sqrt{m_2}x_2(0) \\ \dot{q}_1(0) &= u\sqrt{m_1}\dot{x}_1(0) + v\sqrt{m_2}\dot{x}_2(0) & \dot{q}_2(0) &= -v\sqrt{m_1}\dot{x}_1(0) + u\sqrt{m_2}\dot{x}_2(0) \end{aligned} \tag{7.1.63}$$

によって与えられる。
(5) 完全性関係 $I_2 = \boldsymbol{p}_1\boldsymbol{p}_1^\dagger + \boldsymbol{p}_2\boldsymbol{p}_2^\dagger$ を用いると $\dot{\boldsymbol{x}}^\dagger M\dot{\boldsymbol{x}} = \dot{\boldsymbol{\xi}}^\dagger\dot{\boldsymbol{\xi}} = \dot{\boldsymbol{\xi}}^\dagger I_2\dot{\boldsymbol{\xi}} = \dot{\boldsymbol{\xi}}^\dagger\boldsymbol{p}_1\boldsymbol{p}_1^\dagger\dot{\boldsymbol{\xi}} + \dot{\boldsymbol{\xi}}^\dagger\boldsymbol{p}_2\boldsymbol{p}_2^\dagger\dot{\boldsymbol{\xi}} = \dot{q}_1^2 + \dot{q}_2^2$ と書ける。また, A のスペクトル分解 (7.1.60) を用いると $\boldsymbol{x}^\dagger K\boldsymbol{x} = -\boldsymbol{\xi}^\dagger A\boldsymbol{\xi} = -\boldsymbol{\xi}^\dagger(\lambda_1\boldsymbol{p}_1\boldsymbol{p}_1^\dagger + \lambda_2\boldsymbol{p}_2\boldsymbol{p}_2^\dagger)\boldsymbol{\xi} = \omega_1^2\boldsymbol{\xi}^\dagger\boldsymbol{p}_1\boldsymbol{p}_1^\dagger\boldsymbol{\xi} + \omega_2^2\boldsymbol{\xi}^\dagger\boldsymbol{p}_2\boldsymbol{p}_2^\dagger\boldsymbol{\xi} = \omega_1^2 q_1^2 + \omega_2^2 q_2^2$ と書ける。したがって,

$$L = \frac{1}{2}\dot{\boldsymbol{x}}^\dagger M\dot{\boldsymbol{x}} - \frac{1}{2}\boldsymbol{x}^\dagger K\boldsymbol{x} = \frac{1}{2}\dot{q}_1^2 - \frac{1}{2}\omega_1^2 q_1^2 + \frac{1}{2}\dot{q}_2^2 - \frac{1}{2}\omega_2^2 q_2^2 \tag{7.1.64}$$

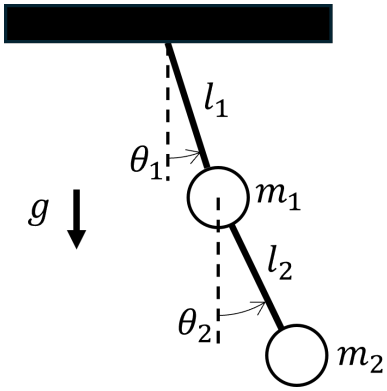
と表せる。

7.1.6 2 重振り子 (角を座標とする場合)

例題 6. 図のように質量 m_1，m_2 の粒子 1，2 が長さ l_1，l_2 の軽い棒で連結された 2 重振り子の連成振動を考える。この系のラグランジアン L は

$$\begin{aligned} L &= \frac{1}{2}(m_1+m_2)l_1^2\dot{\theta}_1^2 + m_2 l_1 l_2\dot{\theta}_1\dot{\theta}_2 + \frac{1}{2}m_2 l_2^2\dot{\theta}_2^2 - \frac{1}{2}(m_1+m_2)gl_1\theta_1^2 - \frac{1}{2}m_2 g l_2\theta_2^2 \\ &= \frac{1}{2}\dot{\boldsymbol{\theta}}^\dagger M\dot{\boldsymbol{\theta}} - \frac{1}{2}\boldsymbol{\theta}^\dagger K\boldsymbol{\theta} \qquad \boldsymbol{\theta} = \begin{bmatrix}\theta_1 \\ \theta_2\end{bmatrix} \\ M &= \begin{bmatrix}(m_1+m_2)l_1^2 & m_2 l_1 l_2 \\ m_2 l_1 l_2 & m_2 l_2^2\end{bmatrix} \qquad K = \begin{bmatrix}(m_1+m_2)gl_1 & 0 \\ 0 & m_2 g l_2\end{bmatrix} \end{aligned} \tag{7.1.65}$$

である。ここで，$\theta_1 = \theta_1(t)$，$\theta_2 = \theta_2(t)$ は時刻 t における粒子 1，2 の平衡位置からの変位である。このとき，粒子の運動は連立微分方程式



$$\begin{cases} (m_1+m_2)l_1^2\ddot{\theta}_1 + m_2 l_1 l_2 \ddot{\theta}_2 = -(m_1+m_2)g l_1 \theta_1 \\ m_2 l_1 l_2 \ddot{\theta}_1 + m_2 l_2^2 \ddot{\theta}_2 = -m_2 g l_2 \theta_2 \end{cases} \tag{7.1.66}$$

によって記述される。あるいは, (7.1.66) は $\boldsymbol{\phi} = \sqrt{K}\boldsymbol{\theta}$ とエルミート行列 A を用いて

$$\ddot{\boldsymbol{\phi}} = A\boldsymbol{\phi} \qquad \boldsymbol{\phi} = \begin{bmatrix} \phi_1 \\ \phi_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \sqrt{(m_1+m_2)gl_1}\theta_1 \\ \sqrt{m_2 g l_2}\theta_2 \end{bmatrix} \qquad \sqrt{K} = \begin{bmatrix} \sqrt{(m_1+m_2)gl_1} & 0 \\ 0 & \sqrt{m_2 g l_2} \end{bmatrix}$$

$$A = -\sqrt{K}M^{-1}\sqrt{K} = \frac{g}{l_1}\left(1+\frac{m_2}{m_1}\right)\begin{bmatrix} -1 & \sqrt{\frac{l_1/l_2}{1+m_1/m_2}} \\ \sqrt{\frac{l_1/l_2}{1+m_1/m_2}} & -l_1/l_2 \end{bmatrix} \tag{7.1.67}$$

と表せる。以下の問いに答えよ。

(1) A の固有値 λ_1，λ_2 および正規化された固有ベクトル $\boldsymbol{p}_1$，$\boldsymbol{p}_2$ を求めよ。

(2) A のスペクトル分解を求めよ。

(3) $q_1 = \boldsymbol{p}_1^\dagger \boldsymbol{\phi}$，$q_2 = \boldsymbol{p}_2^\dagger \boldsymbol{\phi}$，$\omega_1 = \sqrt{-\lambda_1}$，$\omega_2 = \sqrt{-\lambda_2}$ とおくと，q_1，q_2 は

$$\ddot{q}_1 = -\omega_1^2 q_1 \qquad \ddot{q}_2 = -\omega_2^2 q_2 \tag{7.1.68}$$

を満たすことを示せ。

(4) (7.1.66) の一般解を求めよ。

(5) L は

$$L = \frac{1}{2}\frac{\dot{q}_1^2}{\omega_1^2} - \frac{1}{2}q_1^2 + \frac{1}{2}\frac{\dot{q}_2^2}{\omega_2^2} - \frac{1}{2}q_2^2 \tag{7.1.69}$$

と表せることを示せ。

[解答]
(1)2 行 2 列のエルミート行列の固有値・固有ベクトル (3.3.61) を用いると，$\delta = -\frac{1}{2}(1-\frac{l_1}{l_2})$，$\Delta = \sqrt{\delta^2 + \frac{l_1/l_2}{1+m_1/m_2}}$ として，

$$
\begin{aligned}
\lambda_1 &= -\frac{g}{l_1}\left(1+\frac{m_2}{m_1}\right)\left(\frac{1}{2}\left(1+\frac{l_1}{l_2}\right)-\Delta\right) \\
&= -\frac{g}{2l_1}\left(\left(1+\frac{m_2}{m_1}\right)\left(1+\frac{l_1}{l_2}\right)-\sqrt{\left(1+\frac{m_2}{m_1}\right)\left(\left(1-\frac{l_1}{l_2}\right)^2+\frac{m_2}{m_1}\left(1+\frac{l_1}{l_2}\right)^2\right)}\right) \\
\lambda_2 &= -\frac{g}{l_1}\left(1+\frac{m_2}{m_1}\right)\left(\frac{1}{2}\left(1+\frac{l_1}{l_2}\right)+\Delta\right) \\
&= -\frac{g}{2l_1}\left(\left(1+\frac{m_2}{m_1}\right)\left(1+\frac{l_1}{l_2}\right)+\sqrt{\left(1+\frac{m_2}{m_1}\right)\left(\left(1-\frac{l_1}{l_2}\right)^2+\frac{m_2}{m_1}\left(1+\frac{l_1}{l_2}\right)^2\right)}\right)
\end{aligned}
\tag{7.1.70}
$$

である。固有値 λ_1，λ_2 に属する固有ベクトル $\boldsymbol{p}_1$，$\boldsymbol{p}_2$ は

$$
\boldsymbol{p}_1 = \begin{bmatrix} u \\ v \end{bmatrix} \qquad \boldsymbol{p}_2 = \begin{bmatrix} -v \\ u \end{bmatrix} \tag{7.1.71}
$$

ととれる。ここで，

$$
u = \sqrt{\frac{1}{2}\left(1+\frac{\delta}{\Delta}\right)} \qquad v = \sqrt{\frac{1}{2}\left(1-\frac{\delta}{\Delta}\right)} \tag{7.1.72}
$$

である。
(2)$\{\boldsymbol{p}_1, \boldsymbol{p}_2\}$ は正規直交基底であるから，その双対基底は $\{\boldsymbol{p}_1^\dagger, \boldsymbol{p}_2^\dagger\}$ である。したがって，λ_1，λ_2，$\boldsymbol{p}_1$，$\boldsymbol{p}_2$ を用いると，A のスペクトル分解は

$$
A = \lambda_1 \boldsymbol{p}_1 \boldsymbol{p}_1^\dagger + \lambda_2 \boldsymbol{p}_2 \boldsymbol{p}_2^\dagger \tag{7.1.73}
$$

となる。
(3) 完全性関係 $I_2 = \boldsymbol{p}_1\boldsymbol{p}_1^\dagger + \boldsymbol{p}_2\boldsymbol{p}_2^\dagger$ および $q_1 = \boldsymbol{p}_1^\dagger\boldsymbol{\phi}$，$q_2 = \boldsymbol{p}_2^\dagger\boldsymbol{\phi}$ より $\boldsymbol{\phi} = I_2\boldsymbol{\phi} = \boldsymbol{p}_1\boldsymbol{p}_1^\dagger\boldsymbol{\phi} + \boldsymbol{p}_2\boldsymbol{p}_2^\dagger\boldsymbol{\phi} = q_1\boldsymbol{p}_1 + q_2\boldsymbol{p}_2$ であるから，$\ddot{\boldsymbol{\phi}} = \ddot{q}_1\boldsymbol{p}_1 + \ddot{q}_2\boldsymbol{p}_2$ と表せる。一方，A のスペクトル分解 (7.1.73) を用いると $A\boldsymbol{\phi} = \lambda_1\boldsymbol{p}_1\boldsymbol{p}_1^\dagger\boldsymbol{\phi} + \lambda_2\boldsymbol{p}_2\boldsymbol{p}_2^\dagger\boldsymbol{\phi} = \lambda_1 q_1\boldsymbol{p}_1 + \lambda_2 q_2\boldsymbol{p}_2$ と表せる。したがって，これらの $\boldsymbol{p}_1$，$\boldsymbol{p}_2$ の係数を比較することにより，$\ddot{q}_1 = \lambda_1 q_1 = -\omega_1^2 q_1$，

$\ddot{q}_2 = \lambda_2 q_2 = -\omega_2^2 q_2$ を得る。
(4)(7.1.68) の一般解は $q_1(t) = q_1(0)\cos\omega_1 t + \frac{\dot{q}_1(0)}{\omega_1}\sin\omega_1 t$，$q_2(t) = q_2(0)\cos\omega_2 t + \frac{\dot{q}_2(0)}{\omega_2}\sin\omega_2 t$ であるから，(7.1.67) の一般解は

$$\boldsymbol{\theta}(t) = \frac{1}{\sqrt{K}}(q_1(t)\boldsymbol{p}_1 + q_2(t)\boldsymbol{p}_2) \tag{7.1.74}$$

と書ける。したがって，(7.1.66) の一般解は

$$\begin{cases} \theta_1(t) = \frac{1}{\sqrt{(m_1+m_2)gl_1}}(uq_1(t) - vq_2(t)) \\ \theta_2(t) = \frac{1}{\sqrt{m_2 gl_2}}(vq_1(t) + uq_2(t)) \end{cases} \tag{7.1.75}$$

である。初期条件 $q_1(0) = \boldsymbol{p}_1^\dagger\boldsymbol{\phi}(0)$, $q_2(0) = \boldsymbol{p}_2^\dagger\boldsymbol{\phi}(0)$, $\dot{q}_1(0) = \boldsymbol{p}_1^\dagger\dot{\boldsymbol{\phi}}(0)$, $\dot{q}_2(0) = \boldsymbol{p}_2^\dagger\dot{\boldsymbol{\phi}}(0)$ は $\theta_1(0)$，$\theta_2(0)$，$\dot{\theta}_1(0)$，$\dot{\theta}_2(0)$ を用いて，

$$\begin{aligned} q_1(0) &= u\sqrt{(m_1+m_2)gl_1}\theta_1(0) + v\sqrt{m_2 gl_2}\theta_2(0) \\ q_2(0) &= -v\sqrt{(m_1+m_2)gl_1}\theta_1(0) + u\sqrt{m_2 gl_2}\theta_2(0) \\ \dot{q}_1(0) &= u\sqrt{(m_1+m_2)gl_1}\dot{\theta}_1(0) + v\sqrt{m_2 gl_2}\dot{\theta}_2(0) \\ \dot{q}_2(0) &= -v\sqrt{(m_1+m_2)gl_1}\dot{\theta}_1(0) + u\sqrt{m_2 gl_2}\dot{\theta}_2(0) \end{aligned} \tag{7.1.76}$$

によって与えられる。
(5) 完全性関係 $I_2 = \boldsymbol{p}_1\boldsymbol{p}_1^\dagger + \boldsymbol{p}_2\boldsymbol{p}_2^\dagger$ を用いると $\boldsymbol{\theta}^\dagger K\boldsymbol{\theta} = \boldsymbol{\phi}^\dagger\boldsymbol{\phi} = \boldsymbol{\phi}^\dagger I_2\boldsymbol{\phi} = \boldsymbol{\phi}^\dagger\boldsymbol{p}_1\boldsymbol{p}_1^\dagger\boldsymbol{\phi} + \boldsymbol{\phi}^\dagger\boldsymbol{p}_2\boldsymbol{p}_2^\dagger\boldsymbol{\phi} = q_1^2 + q_2^2$ と書ける。また, A のスペクトル分解 (7.1.73) を用いると $\dot{\boldsymbol{\theta}}^\dagger M\dot{\boldsymbol{\theta}} = -\dot{\boldsymbol{\phi}}^\dagger A^{-1}\dot{\boldsymbol{\phi}} = -\dot{\boldsymbol{\phi}}^\dagger(\frac{1}{\lambda_1}\boldsymbol{p}_1\boldsymbol{p}_1^\dagger + \frac{1}{\lambda_2}\boldsymbol{p}_2\boldsymbol{p}_2^\dagger)\dot{\boldsymbol{\phi}} = \frac{1}{\omega_1^2}\dot{\boldsymbol{\phi}}^\dagger\boldsymbol{p}_1\boldsymbol{p}_1^\dagger\dot{\boldsymbol{\phi}} + \frac{1}{\omega_2^2}\dot{\boldsymbol{\phi}}^\dagger\boldsymbol{p}_2\boldsymbol{p}_2^\dagger\dot{\boldsymbol{\phi}} = \frac{1}{\omega_1^2}\dot{q}_1^2 + \frac{1}{\omega_2^2}\dot{q}_2^2$ と書ける。したがって,

$$L = \frac{1}{2}\dot{\boldsymbol{\theta}}^\dagger M\dot{\boldsymbol{\theta}} - \frac{1}{2}\boldsymbol{\theta}^\dagger K\boldsymbol{\theta} = \frac{1}{2}\frac{\dot{q}_1^2}{\omega_1^2} - \frac{1}{2}q_1^2 + \frac{1}{2}\frac{\dot{q}_2^2}{\omega_2^2} - \frac{1}{2}q_2^2 \tag{7.1.77}$$

と表せる。

7.1.7 CO_2 分子の伸縮振動

例題 7. 図のように質量 m の原子 1，3(酸素原子) および質量 m' の原子 2(炭素原子) がばね定数 k と k' の 2 種類のばねで連結された系の連成振動を考える。この系

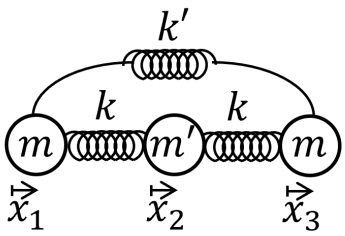
のラグランジアン L は

$$
\begin{aligned}
L &= \frac{1}{2}m\dot{x}_1^2 + \frac{1}{2}m'\dot{x}_2^2 + \frac{1}{2}m\dot{x}_3^2 - \frac{1}{2}k(x_1-x_2)^2 - \frac{1}{2}k(x_2-x_3)^2 - \frac{1}{2}k'(x_1-x_3)^2 \\
&= \frac{1}{2}\dot{\boldsymbol{x}}^\dagger M\dot{\boldsymbol{x}} - \frac{1}{2}\boldsymbol{x}^\dagger K\boldsymbol{x}
\end{aligned}
$$

$$
\boldsymbol{x} = \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{bmatrix} \qquad M = \begin{bmatrix} m & 0 & 0 \\ 0 & m' & 0 \\ 0 & 0 & m \end{bmatrix} \qquad K = \begin{bmatrix} k+k' & -k & -k' \\ -k & 2k & -k \\ -k' & -k & k+k' \end{bmatrix} \tag{7.1.78}
$$

である。ここで，$x_1 = x_1(t)$，$x_2 = x_2(t)$，$x_3 = x_3(t)$ は時刻 t における原子 1，2，3 の平衡位置からの分子軸に平行な方向への変位である。このとき，原子の運動は連立微分方程式

$$
\begin{cases} m\ddot{x}_1 = -(k+k')x_1 + kx_2 + k'x_3 \\ m'\ddot{x}_2 = kx_1 - 2kx_2 + kx_3 \\ m\ddot{x}_3 = k'x_1 + kx_2 - (k+k')x_3 \end{cases} \tag{7.1.79}
$$



によって記述される。あるいは, (7.1.79) は $\boldsymbol{\xi} = \sqrt{M}\boldsymbol{x}$ とエルミート行列 A を用いて

$$
\ddot{\boldsymbol{\xi}} = A\boldsymbol{\xi} \qquad \boldsymbol{\xi} = \begin{bmatrix} \xi_1 \\ \xi_2 \\ \xi_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \sqrt{m}x_1 \\ \sqrt{m'}x_2 \\ \sqrt{m}x_3 \end{bmatrix}
$$

$$
\sqrt{M} = \begin{bmatrix} \sqrt{m} & 0 & 0 \\ 0 & \sqrt{m'} & 0 \\ 0 & 0 & \sqrt{m} \end{bmatrix} \qquad A = -\frac{1}{\sqrt{M}}K\frac{1}{\sqrt{M}} = \begin{bmatrix} -\frac{k+k'}{m} & \frac{k}{\sqrt{mm'}} & \frac{k'}{m} \\ \frac{k}{\sqrt{mm'}} & -\frac{2k}{m'} & \frac{k}{\sqrt{mm'}} \\ \frac{k'}{m} & \frac{k}{\sqrt{mm'}} & -\frac{k+k'}{m} \end{bmatrix} \tag{7.1.80}
$$

と表せる。以下の問いに答えよ。

(1) A の固有値 λ_1，λ_2，λ_3 および正規化された固有ベクトル $\boldsymbol{p}_1$，$\boldsymbol{p}_2$，$\boldsymbol{p}_3$ を求めよ。

(2) A のスペクトル分解を求めよ。

(3) $q_1 = \boldsymbol{p}_1^\dagger\boldsymbol{\xi}$，$q_2 = \boldsymbol{p}_2^\dagger\boldsymbol{\xi}$，$q_3 = \boldsymbol{p}_3^\dagger\boldsymbol{\xi}$，$\omega_1 = \sqrt{-\lambda_1}$，$\omega_2 = \sqrt{-\lambda_2}$，$\omega_3 = \sqrt{-\lambda_3}$ とおくと，q_1，q_2，q_3 は

$$
\ddot{q}_1 = -\omega_1^2 q_1 \qquad \ddot{q}_2 = -\omega_2^2 q_2 \qquad \ddot{q}_3 = -\omega_3^2 q_3 \tag{7.1.81}
$$

を満たすことを示せ。

(4) (7.1.79) の一般解を求めよ。

(5) L は

$$L = \frac{1}{2}\dot{q}_1^2 - \frac{1}{2}\omega_1^2 q_1^2 + \frac{1}{2}\dot{q}_2^2 - \frac{1}{2}\omega_2^2 q_2^2 + \frac{1}{2}\dot{q}_3^2 - \frac{1}{2}\omega_3^2 q_3^2 \tag{7.1.82}$$

と表せることを示せ。

[解答]
(1)$|A - \lambda I_3| = -\lambda(\lambda + \frac{k+2k'}{m})(\lambda + \frac{k}{m} + \frac{2k}{m'}) = 0$ より，

$$\lambda_1 = 0 \qquad \lambda_2 = -\frac{k+2k'}{m} \qquad \lambda_3 = -\left(\frac{k}{m} + \frac{2k}{m'}\right) \tag{7.1.83}$$

である。$\lambda = \lambda_1$ のとき，

$$\begin{bmatrix} -\frac{k+k'}{m} & \frac{k}{\sqrt{mm'}} & \frac{k'}{m} \\ \frac{k}{\sqrt{mm'}} & -\frac{2k}{m'} & \frac{k}{\sqrt{mm'}} \\ \frac{k'}{m} & \frac{k}{\sqrt{mm'}} & -\frac{k+k'}{m} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} c_1 \\ c_2 \\ c_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} \quad \Rightarrow \quad \boldsymbol{p}_1 = \frac{1}{\sqrt{2m+m'}} \begin{bmatrix} \sqrt{m} \\ \sqrt{m'} \\ \sqrt{m} \end{bmatrix} \tag{7.1.84}$$

ととれる。$\lambda = \lambda_2$ のとき，

$$\begin{bmatrix} \frac{k'}{m} & \frac{k}{\sqrt{mm'}} & \frac{k'}{m} \\ \frac{k}{\sqrt{mm'}} & -\frac{2k}{m'} + \frac{k+2k'}{m} & \frac{k}{\sqrt{mm'}} \\ \frac{k'}{m} & \frac{k}{\sqrt{mm'}} & \frac{k'}{m} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} c_1 \\ c_2 \\ c_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} \quad \Rightarrow \quad \boldsymbol{p}_2 = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} -1 \\ 0 \\ 1 \end{bmatrix} \tag{7.1.85}$$

ととれる。$\lambda = \lambda_3$ のとき，

$$\begin{bmatrix} \frac{2k}{m'} - \frac{k'}{m} & \frac{k}{\sqrt{mm'}} & \frac{k'}{m} \\ \frac{k}{\sqrt{mm'}} & \frac{k}{m} & \frac{k}{\sqrt{mm'}} \\ \frac{k'}{m} & \frac{k}{\sqrt{mm'}} & \frac{2k}{m'} - \frac{k'}{m} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} c_1 \\ c_2 \\ c_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} \quad \Rightarrow \quad \boldsymbol{p}_3 = \frac{1}{\sqrt{4m+2m'}} \begin{bmatrix} \sqrt{m'} \\ -2\sqrt{m} \\ \sqrt{m'} \end{bmatrix} \tag{7.1.86}$$

ととれる。
(2)$\{\boldsymbol{p}_1, \boldsymbol{p}_2, \boldsymbol{p}_3\}$ は正規直交基底であるから，その双対基底は $\{\boldsymbol{p}_1^\dagger, \boldsymbol{p}_2^\dagger, \boldsymbol{p}_3^\dagger\}$ である。したがって，λ_1，λ_2，λ_3，$\boldsymbol{p}_1$，$\boldsymbol{p}_2$，$\boldsymbol{p}_3$ を用いると，A のスペクトル分解は

$$A = \lambda_1 \boldsymbol{p}_1 \boldsymbol{p}_1^\dagger + \lambda_2 \boldsymbol{p}_2 \boldsymbol{p}_2^\dagger + \lambda_3 \boldsymbol{p}_3 \boldsymbol{p}_3^\dagger \tag{7.1.87}$$

となる。
(3) 完全性関係 $I_3 = \boldsymbol{p}_1\boldsymbol{p}_1^\dagger + \boldsymbol{p}_2\boldsymbol{p}_2^\dagger + \boldsymbol{p}_3\boldsymbol{p}_3^\dagger$ および $q_1 = \boldsymbol{p}_1^\dagger\boldsymbol{\xi}$，$q_2 = \boldsymbol{p}_2^\dagger\boldsymbol{\xi}$，$q_3 = \boldsymbol{p}_3^\dagger\boldsymbol{\xi}$

より $\boldsymbol{\xi} = I_3\boldsymbol{\xi} = \boldsymbol{p}_1\boldsymbol{p}_1^\dagger\boldsymbol{\xi} + \boldsymbol{p}_2\boldsymbol{p}_2^\dagger\boldsymbol{\xi} + \boldsymbol{p}_3\boldsymbol{p}_3^\dagger\boldsymbol{\xi} = q_1\boldsymbol{p}_1 + q_2\boldsymbol{p}_2 + q_3\boldsymbol{p}_3$ であるから，$\ddot{\boldsymbol{\xi}} = \ddot{q}_1\boldsymbol{p}_1 + \ddot{q}_2\boldsymbol{p}_2 + \ddot{q}_3\boldsymbol{p}_3$ と表せる。一方，A のスペクトル分解 (7.1.87) を用いると $A\boldsymbol{\xi} = \lambda_1\boldsymbol{p}_1\boldsymbol{p}_1^\dagger\boldsymbol{\xi} + \lambda_2\boldsymbol{p}_2\boldsymbol{p}_2^\dagger\boldsymbol{\xi} + \lambda_3\boldsymbol{p}_3\boldsymbol{p}_3^\dagger\boldsymbol{\xi} = \lambda_1 q_1\boldsymbol{p}_1 + \lambda_2 q_2\boldsymbol{p}_2 + \lambda_3 q_3\boldsymbol{p}_3$ と表せる。したがって，これらの $\boldsymbol{p}_1$，$\boldsymbol{p}_2$，$\boldsymbol{p}_3$ の係数を比較することにより，$\ddot{q}_1 = \lambda_1 q_1 = -\omega_1^2 q_1$，$\ddot{q}_2 = \lambda_2 q_2 = -\omega_2^2 q_2$，$\ddot{q}_3 = \lambda_3 q_3 = -\omega_3^2 q_3$ を得る。
(4)(7.1.81) の一般解は，$\omega_1 = 0$ より $q_1(t) = q_1(0) + \dot{q}_1(0)t$，$q_2(t) = q_2(0)\cos\omega_2 t + \frac{\dot{q}_2(0)}{\omega_2}\sin\omega_2 t$，$q_3(t) = q_3(0)\cos\omega_3 t + \frac{\dot{q}_3(0)}{\omega_3}\sin\omega_3 t$ であるから，(7.1.80) の一般解は

$$\boldsymbol{x}(t) = \frac{1}{\sqrt{M}}(q_1(t)\boldsymbol{p}_1 + q_2(t)\boldsymbol{p}_2 + q_3(t)\boldsymbol{p}_3) \tag{7.1.88}$$

と書ける。したがって，(7.1.79) の一般解は

$$\begin{cases} x_1(t) = \frac{1}{\sqrt{m}}(\sqrt{\frac{m}{2m+m'}}q_1(t) - \frac{1}{\sqrt{2}}q_2(t) + \sqrt{\frac{m'}{4m+2m'}}q_3(t)) \\ x_2(t) = \frac{1}{\sqrt{m'}}(\sqrt{\frac{m'}{2m+m'}}q_1(t) - 2\sqrt{\frac{m}{4m+2m'}}q_3(t)) \\ x_3(t) = \frac{1}{\sqrt{m}}(\sqrt{\frac{m}{2m+m'}}q_1(t) + \frac{1}{\sqrt{2}}q_2(t) + \sqrt{\frac{m'}{4m+2m'}}q_3(t)) \end{cases} \tag{7.1.89}$$

である。初期条件 $q_1(0) = \boldsymbol{p}_1^\dagger\boldsymbol{\xi}(0)$, $q_2(0) = \boldsymbol{p}_2^\dagger\boldsymbol{\xi}(0)$, $q_3(0) = \boldsymbol{p}_3^\dagger\boldsymbol{\xi}(0)$, $\dot{q}_1(0) = \boldsymbol{p}_1^\dagger\dot{\boldsymbol{\xi}}(0)$, $\dot{q}_2(0) = \boldsymbol{p}_2^\dagger\dot{\boldsymbol{\xi}}(0)$，$\dot{q}_3(0) = \boldsymbol{p}_3^\dagger\dot{\boldsymbol{\xi}}(0)$ は $x_1(0)$，$x_2(0)$，$x_3(0)$，$\dot{x}_1(0)$，$\dot{x}_2(0)$，$\dot{x}_3(0)$ を用いて，

$$\begin{aligned} q_1(0) &= \frac{1}{\sqrt{2m+m'}}(mx_1(0) + m'x_2(0) + mx_3(0)) \\ q_2(0) &= \frac{1}{\sqrt{2}}(-\sqrt{m}x_1(0) + \sqrt{m}x_3(0) \\ q_3(0) &= \frac{1}{\sqrt{4m+2m'}}(\sqrt{mm'}x_1(0) - 2\sqrt{mm'}x_2(0) + \sqrt{mm'}x_3(0)) \\ \dot{q}_1(0) &= \frac{1}{\sqrt{2m+m'}}(m\dot{x}_1(0) + m'\dot{x}_2(0) + m\dot{x}_3(0)) \\ \dot{q}_2(0) &= \frac{1}{\sqrt{2}}(-\sqrt{m}\dot{x}_1(0) + \sqrt{m}\dot{x}_3(0) \\ \dot{q}_3(0) &= \frac{1}{\sqrt{4m+2m'}}(\sqrt{mm'}\dot{x}_1(0) - 2\sqrt{mm'}\dot{x}_2(0) + \sqrt{mm'}\dot{x}_3(0)) \end{aligned} \tag{7.1.90}$$

によって与えられる。
(5) 完全性関係 $I_3 = \boldsymbol{p}_1\boldsymbol{p}_1^\dagger + \boldsymbol{p}_2\boldsymbol{p}_2^\dagger + \boldsymbol{p}_3\boldsymbol{p}_3^\dagger$ を用いると $\dot{\boldsymbol{x}}^\dagger M\dot{\boldsymbol{x}} = \dot{\boldsymbol{\xi}}^\dagger\dot{\boldsymbol{\xi}} = \dot{\boldsymbol{\xi}}^\dagger I_3\dot{\boldsymbol{\xi}} = \dot{\boldsymbol{\xi}}^\dagger\boldsymbol{p}_1\boldsymbol{p}_1^\dagger\dot{\boldsymbol{\xi}} + \dot{\boldsymbol{\xi}}^\dagger\boldsymbol{p}_2\boldsymbol{p}_2^\dagger\dot{\boldsymbol{\xi}} + \dot{\boldsymbol{\xi}}^\dagger\boldsymbol{p}_3\boldsymbol{p}_3^\dagger\dot{\boldsymbol{\xi}} = \dot{q}_1^2 + \dot{q}_2^2 + \dot{q}_3^2$ と書ける。また，A のスペクトル

分解 (7.1.87) を用いると $\boldsymbol{x}^\dagger K\boldsymbol{x} = -\boldsymbol{\xi}^\dagger A\boldsymbol{\xi} = -\boldsymbol{\xi}^\dagger(\lambda_1\boldsymbol{p}_1\boldsymbol{p}_1^\dagger + \lambda_2\boldsymbol{p}_2\boldsymbol{p}_2^\dagger + \lambda_3\boldsymbol{p}_3\boldsymbol{p}_3^\dagger)\boldsymbol{\xi} = \omega_1^2\boldsymbol{\xi}^\dagger\boldsymbol{p}_1\boldsymbol{p}_1^\dagger\boldsymbol{\xi} + \omega_2^2\boldsymbol{\xi}^\dagger\boldsymbol{p}_2\boldsymbol{p}_2^\dagger\boldsymbol{\xi} + \omega_3^2\boldsymbol{\xi}^\dagger\boldsymbol{p}_3\boldsymbol{p}_3^\dagger\boldsymbol{\xi} = \omega_1^2q_1^2 + \omega_2^2q_2^2 + \omega_3^2q_3^2$ と書ける。したがって，

$$L = \frac{1}{2}\dot{\boldsymbol{x}}^\dagger M\dot{\boldsymbol{x}} - \frac{1}{2}\boldsymbol{x}^\dagger K\boldsymbol{x} = \frac{1}{2}\dot{q}_1^2 - \frac{1}{2}\omega_1^2q_1^2 + \frac{1}{2}\dot{q}_2^2 - \frac{1}{2}\omega_2^2q_2^2 + \frac{1}{2}\dot{q}_3^2 - \frac{1}{2}\omega_3^2q_3^2 \quad (7.1.91)$$

と表せる。

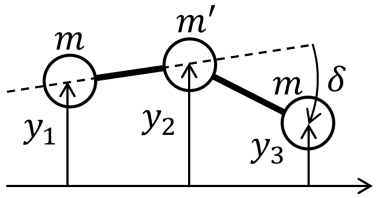
7.1.8 CO_2 分子の変角振動

例題 8. 図のように質量 m の原子 1，3(酸素原子) および質量 m' の原子 2(炭素原子) が連結された系の屈曲に関する連成振動を考える。屈曲 $\delta = -y_1 + 2y_2 - y_3$ に対する復元力がばね定数 k のばねで表されるとすると，この系のラグランジアン L は

$$\begin{aligned} L &= \frac{1}{2}m\dot{y}_1^2 + \frac{1}{2}m'\dot{y}_2^2 + \frac{1}{2}m\dot{y}_3^2 - \frac{1}{2}k(-y_1 + 2y_2 - y_3)^2 \\ &= \frac{1}{2}\dot{\boldsymbol{y}}^\dagger M\dot{\boldsymbol{y}} - \frac{1}{2}\boldsymbol{y}^\dagger K\boldsymbol{y} \\ \boldsymbol{y} &= \begin{bmatrix} y_1 \\ y_2 \\ y_3 \end{bmatrix} \qquad M = \begin{bmatrix} m & 0 & 0 \\ 0 & m' & 0 \\ 0 & 0 & m \end{bmatrix} \qquad K = \begin{bmatrix} k & -2k & k \\ -2k & 4k & -2k \\ k & -2k & k \end{bmatrix} \end{aligned} \quad (7.1.92)$$

である。ここで，$y_1 = y_1(t)$，$y_2 = y_2(t)$，$y_3 = y_3(t)$ は時刻 t における原子 1，2，3 の平衡位置からの分子軸に垂直な方向への変位であり，y_1，y_2，y_3 の互いの差は原子間の距離に比べて十分小さいとする。このとき，原子の運動は連立微分方程式

$$\begin{cases} m\ddot{y}_1 = -ky_1 + 2ky_2 - ky_3 \\ m'\ddot{y}_2 = 2ky_1 - 4ky_2 + 2ky_3 \\ m\ddot{y}_3 = -ky_1 + 2ky_2 - ky_3 \end{cases} \tag{7.1.93}$$



によって記述される。あるいは, (7.1.93) は $\boldsymbol{\eta} = \sqrt{M}\boldsymbol{y}$
とエルミート行列 A を用いて

$$\ddot{\boldsymbol{\eta}} = A\boldsymbol{\eta} \qquad \boldsymbol{\eta} = \begin{bmatrix} \eta_1 \\ \eta_2 \\ \eta_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \sqrt{m}y_1 \\ \sqrt{m'}y_2 \\ \sqrt{m}y_3 \end{bmatrix}$$

$$\sqrt{M} = \begin{bmatrix} \sqrt{m} & 0 & 0 \\ 0 & \sqrt{m'} & 0 \\ 0 & 0 & \sqrt{m} \end{bmatrix} \qquad A = -\frac{1}{\sqrt{M}}K\frac{1}{\sqrt{M}} = \begin{bmatrix} -\frac{k}{m} & \frac{2k}{\sqrt{mm'}} & -\frac{k}{m} \\ \frac{2k}{\sqrt{mm'}} & -\frac{4k}{m'} & \frac{2k}{\sqrt{mm'}} \\ -\frac{k}{m} & \frac{2k}{\sqrt{mm'}} & -\frac{k}{m} \end{bmatrix} \tag{7.1.94}$$

と表せる。以下の問いに答えよ。

(1) A の固有値 λ_1, λ_2, λ_3 および正規化された固有ベクトル $\boldsymbol{p}_1$, $\boldsymbol{p}_2$, $\boldsymbol{p}_3$ を求めよ。

(2) A のスペクトル分解を求めよ。

(3) $q_1 = \boldsymbol{p}_1^\dagger\boldsymbol{\eta}$, $q_2 = \boldsymbol{p}_2^\dagger\boldsymbol{\eta}$, $q_3 = \boldsymbol{p}_3^\dagger\boldsymbol{\eta}$, $\omega_1 = \sqrt{-\lambda_1}$, $\omega_2 = \sqrt{-\lambda_2}$, $\omega_3 = \sqrt{-\lambda_3}$ とおくと, q_1, q_2, q_3 は

$$\ddot{q}_1 = -\omega_1^2 q_1 \qquad \ddot{q}_2 = -\omega_2^2 q_2 \qquad \ddot{q}_3 = -\omega_3^2 q_3 \tag{7.1.95}$$

を満たすことを示せ。

(4) (7.1.93) の一般解を求めよ。

(5) L は

$$L = \frac{1}{2}\dot{q}_1^2 - \frac{1}{2}\omega_1^2 q_1^2 + \frac{1}{2}\dot{q}_2^2 - \frac{1}{2}\omega_2^2 q_2^2 + \frac{1}{2}\dot{q}_3^2 - \frac{1}{2}\omega_3^2 q_3^2 \tag{7.1.96}$$

と表せることを示せ。

[解答]
(1)$|A - \lambda I_3| = -\lambda^2(\lambda + \frac{2k}{m} + \frac{4k}{m'}) = 0$ より,

$$\lambda_1 = 0 \qquad \lambda_2 = 0 \qquad \lambda_3 = -\left(\frac{2k}{m} + \frac{4k}{m'}\right) \tag{7.1.97}$$

である。$\lambda=\lambda_1,\lambda_2$ のとき，

$$\begin{bmatrix} -\frac{k}{m} & \frac{2k}{\sqrt{mm'}} & -\frac{k}{m} \\ \frac{2k}{\sqrt{mm'}} & -\frac{4k}{m'} & \frac{2k}{\sqrt{mm'}} \\ -\frac{k}{m} & \frac{2k}{\sqrt{mm'}} & -\frac{k}{m} \end{bmatrix}\begin{bmatrix} c_1 \\ c_2 \\ c_3 \end{bmatrix}=\begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} \quad \Rightarrow \quad \boldsymbol{p}_1=\frac{1}{\sqrt{2m+m'}}\begin{bmatrix} \sqrt{m} \\ \sqrt{m'} \\ \sqrt{m} \end{bmatrix} \quad \boldsymbol{p}_2=\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{bmatrix} -1 \\ 0 \\ 1 \end{bmatrix} \tag{7.1.98}$$

ととれる。$\lambda=\lambda_3$ のとき，

$$\begin{bmatrix} \frac{k}{m}+\frac{4k}{m'} & \frac{2k}{\sqrt{mm'}} & -\frac{k}{m} \\ \frac{2k}{\sqrt{mm'}} & \frac{2k}{m} & \frac{2k}{\sqrt{mm'}} \\ -\frac{k}{m} & \frac{2k}{\sqrt{mm'}} & \frac{k}{m}+\frac{4k}{m'} \end{bmatrix}\begin{bmatrix} c_1 \\ c_2 \\ c_3 \end{bmatrix}=\begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} \quad \Rightarrow \quad \boldsymbol{p}_3=\frac{1}{\sqrt{4m+2m'}}\begin{bmatrix} \sqrt{m'} \\ -2\sqrt{m} \\ \sqrt{m'} \end{bmatrix} \tag{7.1.99}$$

ととれる。

(2)$\{\boldsymbol{p}_1,\boldsymbol{p}_2,\boldsymbol{p}_3\}$ は正規直交基底であるから，その双対基底は $\{\boldsymbol{p}_1^\dagger,\boldsymbol{p}_2^\dagger,\boldsymbol{p}_3^\dagger\}$ である。したがって，λ_1，λ_2，λ_3，$\boldsymbol{p}_1$，$\boldsymbol{p}_2$，$\boldsymbol{p}_3$ を用いると，A のスペクトル分解は

$$A=\lambda_1\boldsymbol{p}_1\boldsymbol{p}_1^\dagger+\lambda_2\boldsymbol{p}_2\boldsymbol{p}_2^\dagger+\lambda_3\boldsymbol{p}_3\boldsymbol{p}_3^\dagger \tag{7.1.100}$$

となる。

(3) 完全性関係 $I_3=\boldsymbol{p}_1\boldsymbol{p}_1^\dagger+\boldsymbol{p}_2\boldsymbol{p}_2^\dagger+\boldsymbol{p}_3\boldsymbol{p}_3^\dagger$ および $q_1=\boldsymbol{p}_1^\dagger\boldsymbol{\eta}$，$q_2=\boldsymbol{p}_2^\dagger\boldsymbol{\eta}$，$q_3=\boldsymbol{p}_3^\dagger\boldsymbol{\eta}$ より $\boldsymbol{\eta}=I_3\boldsymbol{\eta}=\boldsymbol{p}_1\boldsymbol{p}_1^\dagger\boldsymbol{\eta}+\boldsymbol{p}_2\boldsymbol{p}_2^\dagger\boldsymbol{\eta}+\boldsymbol{p}_3\boldsymbol{p}_3^\dagger\boldsymbol{\eta}=q_1\boldsymbol{p}_1+q_2\boldsymbol{p}_2+q_3\boldsymbol{p}_3$ であるから，$\ddot{\boldsymbol{\eta}}=\ddot{q}_1\boldsymbol{p}_1+\ddot{q}_2\boldsymbol{p}_2+\ddot{q}_3\boldsymbol{p}_3$ と表せる。一方，A のスペクトル分解 (7.1.100) を用いると $A\boldsymbol{\eta}=\lambda_1\boldsymbol{p}_1\boldsymbol{p}_1^\dagger\boldsymbol{\eta}+\lambda_2\boldsymbol{p}_2\boldsymbol{p}_2^\dagger\boldsymbol{\eta}+\lambda_3\boldsymbol{p}_3\boldsymbol{p}_3^\dagger\boldsymbol{\eta}=\lambda_1q_1\boldsymbol{p}_1+\lambda_2q_2\boldsymbol{p}_2+\lambda_3q_3\boldsymbol{p}_3$ と表せる。したがって，これらの $\boldsymbol{p}_1$，$\boldsymbol{p}_2$，$\boldsymbol{p}_3$ の係数を比較することにより，$\ddot{q}_1=\lambda_1q_1=-\omega_1^2q_1$，$\ddot{q}_2=\lambda_2q_2=-\omega_2^2q_2$，$\ddot{q}_3=\lambda_3q_3=-\omega_3^2q_3$ を得る。

(4)(7.1.95) の一般解は，$\omega_1=0$ より $q_1(t)=q_1(0)+\dot{q}_1(0)t$，$\omega_2=0$ より $q_2(t)=q_2(0)+\dot{q}_2(0)t$，$q_3(t)=q_3(0)\cos\omega_3t+\frac{\dot{q}_3(0)}{\omega_3}\sin\omega_3t$ であるから，(7.1.94) の一般解は

$$\boldsymbol{y}(t)=\frac{1}{\sqrt{M}}(q_1(t)\boldsymbol{p}_1+q_2(t)\boldsymbol{p}_2+q_3(t)\boldsymbol{p}_3) \tag{7.1.101}$$

と書ける。したがって，(7.1.93) の一般解は

$$\begin{cases} y_1(t)=\frac{1}{\sqrt{m}}(\sqrt{\frac{m}{2m+m'}}q_1(t)-\frac{1}{\sqrt{2}}q_2(t)+\sqrt{\frac{m'}{4m+2m'}}q_3(t)) \\ y_2(t)=\frac{1}{\sqrt{m'}}(\sqrt{\frac{m'}{2m+m'}}q_1(t)-2\sqrt{\frac{m}{4m+2m'}}q_3(t)) \\ y_3(t)=\frac{1}{\sqrt{m}}(\sqrt{\frac{m}{2m+m'}}q_1(t)+\frac{1}{\sqrt{2}}q_2(t)+\sqrt{\frac{m'}{4m+2m'}}q_3(t)) \end{cases} \tag{7.1.102}$$

である。初期条件 $q_1(0)=\boldsymbol{p}_1^\dagger\boldsymbol{\eta}(0), q_2(0)=\boldsymbol{p}_2^\dagger\boldsymbol{\eta}(0), q_3(0)=\boldsymbol{p}_3^\dagger\boldsymbol{\eta}(0), \dot{q}_1(0)=\boldsymbol{p}_1^\dagger\dot{\boldsymbol{\eta}}(0)$, $\dot{q}_2(0)=\boldsymbol{p}_2^\dagger\dot{\boldsymbol{\eta}}(0)$, $\dot{q}_3(0)=\boldsymbol{p}_3^\dagger\dot{\boldsymbol{\eta}}(0)$ は $y_1(0)$, $y_2(0)$, $y_3(0)$, $\dot{y}_1(0)$, $\dot{y}_2(0)$, $\dot{y}_3(0)$ を用いて,

$$
\begin{aligned}
q_1(0) &= \frac{1}{\sqrt{2m+m'}}(my_1(0)+m'y_2(0)+my_3(0)) \\
q_2(0) &= \frac{1}{\sqrt{2}}(-\sqrt{m}y_1(0)+\sqrt{m}y_3(0) \\
q_3(0) &= \frac{1}{\sqrt{4m+2m'}}(\sqrt{mm'}y_1(0)-2\sqrt{mm'}y_2(0)+\sqrt{mm'}y_3(0)) \\
\dot{q}_1(0) &= \frac{1}{\sqrt{2m+m'}}(m\dot{y}_1(0)+m'\dot{y}_2(0)+m\dot{y}_3(0)) \\
\dot{q}_2(0) &= \frac{1}{\sqrt{2}}(-\sqrt{m}\dot{y}_1(0)+\sqrt{m}\dot{y}_3(0) \\
\dot{q}_3(0) &= \frac{1}{\sqrt{4m+2m'}}(\sqrt{mm'}\dot{y}_1(0)-2\sqrt{mm'}\dot{y}_2(0)+\sqrt{mm'}\dot{y}_3(0))
\end{aligned}
\tag{7.1.103}
$$

によって与えられる。
(5) 完全性関係 $I_3=\boldsymbol{p}_1\boldsymbol{p}_1^\dagger+\boldsymbol{p}_2\boldsymbol{p}_2^\dagger+\boldsymbol{p}_3\boldsymbol{p}_3^\dagger$ を用いると $\dot{\boldsymbol{y}}^\dagger M\dot{\boldsymbol{y}}=\dot{\boldsymbol{\eta}}^\dagger\dot{\boldsymbol{\eta}}=\dot{\boldsymbol{\eta}}^\dagger I_3\dot{\boldsymbol{\eta}}=\dot{\boldsymbol{\eta}}^\dagger\boldsymbol{p}_1\boldsymbol{p}_1^\dagger\dot{\boldsymbol{\eta}}+\dot{\boldsymbol{\eta}}^\dagger\boldsymbol{p}_2\boldsymbol{p}_2^\dagger\dot{\boldsymbol{\eta}}+\dot{\boldsymbol{\eta}}^\dagger\boldsymbol{p}_3\boldsymbol{p}_3^\dagger\dot{\boldsymbol{\eta}}=\dot{q}_1^2+\dot{q}_2^2+\dot{q}_3^2$ と書ける。また，A のスペクトル分解 (7.1.100) を用いると $\boldsymbol{y}^\dagger K\boldsymbol{y}=-\boldsymbol{\eta}^\dagger A\boldsymbol{\eta}=-\boldsymbol{\eta}^\dagger(\lambda_1\boldsymbol{p}_1\boldsymbol{p}_1^\dagger+\lambda_2\boldsymbol{p}_2\boldsymbol{p}_2^\dagger+\lambda_3\boldsymbol{p}_3\boldsymbol{p}_3^\dagger)\boldsymbol{\eta}=\omega_1^2\boldsymbol{\eta}^\dagger\boldsymbol{p}_1\boldsymbol{p}_1^\dagger\boldsymbol{\eta}+\omega_2^2\boldsymbol{\eta}^\dagger\boldsymbol{p}_2\boldsymbol{p}_2^\dagger\boldsymbol{\eta}+\omega_3^2\boldsymbol{\eta}^\dagger\boldsymbol{p}_3\boldsymbol{p}_3^\dagger\boldsymbol{\eta}=\omega_1^2q_1^2+\omega_2^2q_2^2+\omega_3^2q_3^2$ と書ける。したがって,

$$
L=\frac{1}{2}\dot{\boldsymbol{y}}^\dagger M\dot{\boldsymbol{y}}-\frac{1}{2}\boldsymbol{y}^\dagger K\boldsymbol{y}=\frac{1}{2}\dot{q}_1^2-\frac{1}{2}\omega_1^2q_1^2+\frac{1}{2}\dot{q}_2^2-\frac{1}{2}\omega_2^2q_2^2+\frac{1}{2}\dot{q}_3^2-\frac{1}{2}\omega_3^2q_3^2 \tag{7.1.104}
$$

と表せる。

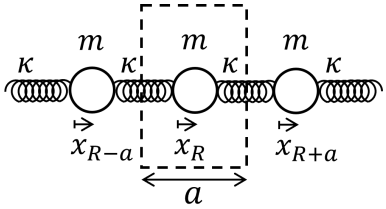
7.1.9 1 次元格子の縦波格子振動 (単位胞に 1 原子の場合)

例題 9. 図のような 1 次元格子の縦波格子振動を周期的境界条件の下で考える。単位胞は質量 m の原子 1 個からなり, 単位胞の総数は N 個である。隣接する原子はばね定数 κ のばねで連結されているとする。格子定数 a，格子ベクトル $R=na\,(n=1,\cdots,N)$ を用いると，この系のラグランジアン L は

$$
L=\sum_R\frac{1}{2}m\dot{x}_R^2-\sum_R\frac{1}{2}\kappa(x_R-x_{R+a})^2 \tag{7.1.105}
$$

である。ここで，$x_R = x_R(t)$ は単位胞 R の原子の時刻 t における平衡位置からの変位である。このとき，原子の運動は連立微分方程式

$$m\ddot{x}_R = \kappa x_{R-a} - 2\kappa x_R + \kappa x_{R+a} \tag{7.1.106}$$



によって記述される。あるいは，(7.1.106) は N 次元列ベクトル $\boldsymbol{x}$ と N 次エルミート行列 A を用いて

$$\ddot{\boldsymbol{x}} = A\boldsymbol{x} \qquad \boldsymbol{x} = \sum_R x_R \boldsymbol{e}_R \qquad x_R = \boldsymbol{e}_R^\dagger \boldsymbol{x} \tag{7.1.107}$$

と表せる。ここで，$\{\boldsymbol{e}_R \,|\, R$ はすべての格子ベクトル$\}$ は N 次元列ベクトル空間の標準基底である。以下の問いに答えよ。

(1) A は

$$A = \sum_R \left(\frac{\kappa}{m} \boldsymbol{e}_R \boldsymbol{e}_{R-a}^\dagger - \frac{2\kappa}{m} \boldsymbol{e}_R \boldsymbol{e}_R^\dagger + \frac{\kappa}{m} \boldsymbol{e}_R \boldsymbol{e}_{R+a}^\dagger \right) \tag{7.1.108}$$

と表せることを示せ。

(2) 並進演算子 U を

$$U = \sum_R \boldsymbol{e}_R \boldsymbol{e}_{R+a}^\dagger \tag{7.1.109}$$

によって定義する。U はユニタリ行列であることを示せ。

(3) U の固有値・固有ベクトルは

$$\begin{gathered} \text{固有値：} e^{ika} \qquad \text{固有ベクトル：} \boldsymbol{l}_k = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_R e^{ikR} \boldsymbol{e}_R \\ \text{ここで，} k = \frac{2\pi}{Na} j \ (j = 0, \cdots, N-1) \text{ は波数ベクトル} \end{gathered} \tag{7.1.110}$$

で与えられることを示せ。

(4) U，A について

$$UAU^\dagger = A \qquad \text{つまり} \qquad [\,U, A\,] = O \tag{7.1.111}$$

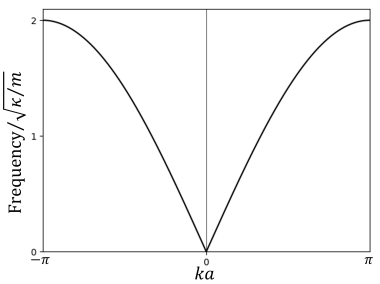
が成り立つことを示せ。

(5) A の固有値 λ_k および格子振動の振動数 $\omega_k = \sqrt{-\lambda_k}$ を求めよ。また，格子振動のスペクトルを図示せよ。ただし，波数ベクトル k は第 1 ブリルアンゾーンにとるものとする。

[解答]
(1)(7.1.106) より, $\ddot{\boldsymbol{x}} = \sum_R \ddot{x}_R \boldsymbol{e}_R = \sum_R \boldsymbol{e}_R \ddot{x}_R = \sum_R \boldsymbol{e}_R(\frac{\kappa}{m}x_{R-a} - \frac{2\kappa}{m}x_R + \frac{\kappa}{m}x_{R+a}) = \sum_R \boldsymbol{e}_R(\frac{\kappa}{m}\boldsymbol{e}^\dagger_{R-a}\boldsymbol{x} - \frac{2\kappa}{m}\boldsymbol{e}^\dagger_R\boldsymbol{x} + \frac{\kappa}{m}\boldsymbol{e}^\dagger_{R+a}\boldsymbol{x}) = \sum_R(\frac{\kappa}{m}\boldsymbol{e}_R\boldsymbol{e}^\dagger_{R-a} - \frac{2\kappa}{m}\boldsymbol{e}_R\boldsymbol{e}^\dagger_R + \frac{\kappa}{m}\boldsymbol{e}_R\boldsymbol{e}^\dagger_{R+a})\boldsymbol{x}$ となる。したがって，(7.1.108) が示された。
(2)$U^\dagger = \sum_R \boldsymbol{e}_{R+a}\boldsymbol{e}^\dagger_R$ より, $UU^\dagger = \sum_R\sum_{R'} \boldsymbol{e}_R\boldsymbol{e}^\dagger_{R+a}\boldsymbol{e}_{R'+a}\boldsymbol{e}^\dagger_{R'} = \sum_R\sum_{R'} \boldsymbol{e}_R\delta_{RR'}\boldsymbol{e}^\dagger_{R'} = \sum_R \boldsymbol{e}_R\boldsymbol{e}^\dagger_R = I$ となる。同様に $U^\dagger U = I$ も示せる。したがって，$U^\dagger = U^{-1}$，つまり，U はユニタリ行列である。
(3)U は補足・計算例 32 で扱った巡回演算子 $\hat{C}^\dagger$ に対応するから，(3.3.79) の $\hat{C}^\dagger$ の固有値・固有ベクトルを適用することにより，(7.1.110) を得る。
(4)$A = \frac{\kappa}{m}U^\dagger - \frac{2\kappa}{m}I + \frac{\kappa}{m}U$ と書けるから，(7.1.111) は明らかに成り立つ。
(5)$[U, A] = O$ より，U と A は同時対角化可能である。U の固有値に重根はないから，U の固有ベクトル $\boldsymbol{l}_k$ は A の固有ベクトルにもなっている。実際，$A\boldsymbol{l}_k = (\frac{\kappa}{m}U^\dagger - \frac{2\kappa}{m}I + \frac{\kappa}{m}U)\boldsymbol{l}_k = \frac{\kappa}{m}U^\dagger\boldsymbol{l}_k - \frac{2\kappa}{m}\boldsymbol{l}_k + \frac{\kappa}{m}U\boldsymbol{l}_k = \frac{\kappa}{m}e^{-ika}\boldsymbol{l}_k - \frac{2\kappa}{m}\boldsymbol{l}_k + \frac{\kappa}{m}e^{ika}\boldsymbol{l}_k = (\frac{\kappa}{m}e^{-ika} - \frac{2\kappa}{m} + \frac{\kappa}{m}e^{ika})\boldsymbol{l}_k = (-\frac{2\kappa}{m} + \frac{2\kappa}{m}\cos ka)\boldsymbol{l}_k = -\frac{4\kappa}{m}\sin^2\frac{ka}{2}\boldsymbol{l}_k$ より，$\boldsymbol{l}_k$ は A の固有値
$\lambda_k = -\frac{4\kappa}{m}\sin^2\frac{ka}{2}$ に属する固有ベクトルである。したがって，格子振動の振動数 $\omega_k = \sqrt{-\lambda_k}$ は

$$\omega_k = 2\sqrt{\frac{\kappa}{m}}\left|\sin\frac{ka}{2}\right| \tag{7.1.112}$$

となる。格子振動のスペクトルは図のようになる。



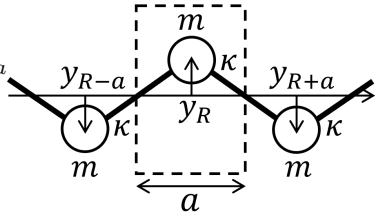
7.1.10　1 次元格子の横波格子振動 (単位胞に 1 原子の場合)

例題 10. 図のような 1 次元格子の横波格子振動を周期的境界条件の下で考える。単位胞は質量 m の原子 1 個からなり，単位胞の総数は N 個である。隣接する原子はばね定数 κ の屈曲のばねで連結されているとする。格子定数 a，格子ベクトル $R = na\,(n = 1, \cdots, N)$ を用いると，この系のラグランジアン L は

$$L = \sum_R \frac{1}{2}m\dot{y}_R^2 - \sum_R \frac{1}{2}\kappa(-y_{R-a} + 2y_R - y_{R+a})^2 \tag{7.1.113}$$

である。ここで，$y_R = y_R(t)$ は単位胞 R の原子の時刻 t における平衡位置から変位であり，格子に対して垂直方向に生じる。このとき，原子の運動は連立微分方程式

$$m\ddot{y}_R = -\kappa y_{R-2a} + 4\kappa y_{R-a} - 6\kappa y_R + 4\kappa y_{R+a} - \kappa y_{R+2a} \tag{7.1.114}$$



によって記述される。あるいは，(7.1.114) は N 次元列ベクトル $\boldsymbol{y}$ と N 次エルミート行列 A を用いて

$$\ddot{\boldsymbol{y}} = A\boldsymbol{y} \qquad \boldsymbol{y} = \sum_R y_R \boldsymbol{e}_R \qquad y_R = \boldsymbol{e}_R^\dagger \boldsymbol{y} \tag{7.1.115}$$

と表せる。ここで，$\{\boldsymbol{e}_R \,|\, R$ はすべての格子ベクトル$\}$ は N 次元列ベクトル空間の標準基底である。以下の問いに答えよ。

(1) A は

$$A = \sum_R \left(-\frac{\kappa}{m}\boldsymbol{e}_R\boldsymbol{e}_{R-2a}^\dagger + \frac{4\kappa}{m}\boldsymbol{e}_R\boldsymbol{e}_{R-a}^\dagger - \frac{6\kappa}{m}\boldsymbol{e}_R\boldsymbol{e}_R^\dagger + \frac{4\kappa}{m}\boldsymbol{e}_R\boldsymbol{e}_{R+a}^\dagger - \frac{\kappa}{m}\boldsymbol{e}_R\boldsymbol{e}_{R+2a}^\dagger \right) \tag{7.1.116}$$

と表せることを示せ。

(2) 並進演算子 U を

$$U = \sum_R \boldsymbol{e}_R\boldsymbol{e}_{R+a}^\dagger \tag{7.1.117}$$

によって定義する。U はユニタリ行列であることを示せ。

(3) U の固有値・固有ベクトルは

$$\text{固有値：} e^{ika} \qquad \text{固有ベクトル：} \boldsymbol{l}_k = \frac{1}{\sqrt{N}}\sum_R e^{ikR}\boldsymbol{e}_R$$
$$\text{ここで，} k = \frac{2\pi}{Na}j \ (j = 0, \cdots, N-1) \text{ は波数ベクトル} \tag{7.1.118}$$

で与えられることを示せ。

(4) U，A について

$$UAU^\dagger = A \qquad \text{つまり} \qquad [U, A] = O \tag{7.1.119}$$

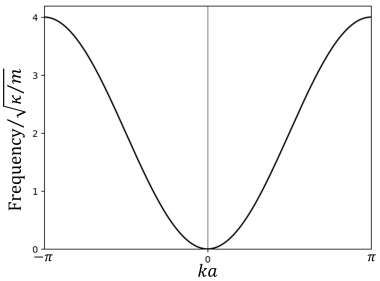
が成り立つことを示せ。

(5) A の固有値 λ_k および格子振動の振動数 $\omega_k = \sqrt{-\lambda_k}$ を求めよ。また，格子振動のスペクトルを図示せよ。ただし，波数ベクトル k は第 1 ブリルアンゾーンにとるものとする。

[解答]
(1)(7.1.114) より，$\ddot{\boldsymbol{y}} = \sum_R \ddot{y}_R \boldsymbol{e}_R = \sum_R \boldsymbol{e}_R \ddot{y}_R = \sum_R \boldsymbol{e}_R(-\frac{\kappa}{m}y_{R-2a} + \frac{4\kappa}{m}y_{R-a} - \frac{6\kappa}{m}y_R + \frac{4\kappa}{m}y_{R+a} - \frac{\kappa}{m}y_{R+2a}) = \sum_R \boldsymbol{e}_R(-\frac{\kappa}{m}\boldsymbol{e}^\dagger_{R-2a}\boldsymbol{y} + \frac{4\kappa}{m}\boldsymbol{e}^\dagger_{R-a}\boldsymbol{y} - \frac{6\kappa}{m}\boldsymbol{e}^\dagger_R\boldsymbol{y} + \frac{4\kappa}{m}\boldsymbol{e}^\dagger_{R+a}\boldsymbol{y} - \frac{\kappa}{m}\boldsymbol{e}^\dagger_{R+2a}\boldsymbol{y}) = \sum_R(-\frac{\kappa}{m}\boldsymbol{e}_R\boldsymbol{e}^\dagger_{R-2a} + \frac{4\kappa}{m}\boldsymbol{e}_R\boldsymbol{e}^\dagger_{R-a} - \frac{6\kappa}{m}\boldsymbol{e}_R\boldsymbol{e}^\dagger_R + \frac{4\kappa}{m}\boldsymbol{e}_R\boldsymbol{e}^\dagger_{R+a} - \frac{\kappa}{m}\boldsymbol{e}_R\boldsymbol{e}^\dagger_{R+2a})\boldsymbol{y}$ となる。したがって，(7.1.116) が示された。
(2)$U^\dagger = \sum_R \boldsymbol{e}_{R+a}\boldsymbol{e}^\dagger_R$ より，$UU^\dagger = \sum_R\sum_{R'} \boldsymbol{e}_R\boldsymbol{e}^\dagger_{R+a}\boldsymbol{e}_{R'+a}\boldsymbol{e}^\dagger_{R'} = \sum_R\sum_{R'} \boldsymbol{e}_R\delta_{RR'}\boldsymbol{e}^\dagger_{R'} = \sum_R \boldsymbol{e}_R\boldsymbol{e}^\dagger_R = I$ となる。同様に $U^\dagger U = I$ も示せる。したがって，$U^\dagger = U^{-1}$，つまり，U はユニタリ行列である。
(3)U は補足・計算例 32 で扱った巡回演算子 $\hat{C}^\dagger$ に対応するから，(3.3.79) の $\hat{C}^\dagger$ の固有値・固有ベクトルを適用することにより，(7.1.118) を得る。
(4)$A = -\frac{\kappa}{m}U^{\dagger 2} + \frac{4\kappa}{m}U^\dagger - \frac{6\kappa}{m}I + \frac{4\kappa}{m}U - \frac{\kappa}{m}U^2$ と書けるから，(7.1.119) は明らかに成り立つ。
(5)$[U, A] = O$ より，U と A は同時対角化可能である。U の固有値に重根はないから，U の固有ベクトル $\boldsymbol{l}_k$ は A の固有ベクトルにもなっている。実際，$A\boldsymbol{l}_k = (-\frac{\kappa}{m}U^{\dagger 2} + \frac{4\kappa}{m}U^\dagger - \frac{6\kappa}{m}I + \frac{4\kappa}{m}U - \frac{\kappa}{m}U^2)\boldsymbol{l}_k = (-\frac{\kappa}{m}U^{\dagger 2}\boldsymbol{l}_k + \frac{4\kappa}{m}U^\dagger\boldsymbol{l}_k - \frac{6\kappa}{m}\boldsymbol{l}_k + \frac{4\kappa}{m}U\boldsymbol{l}_k - \frac{\kappa}{m}U^2\boldsymbol{l}_k) = (-\frac{\kappa}{m}e^{-2ika}\boldsymbol{l}_k + \frac{4\kappa}{m}e^{-ika}\boldsymbol{l}_k - \frac{6\kappa}{m}\boldsymbol{l}_k + \frac{4\kappa}{m}e^{ika}\boldsymbol{l}_k - \frac{\kappa}{m}e^{2ika}\boldsymbol{l}_k) = (-\frac{6\kappa}{m} + \frac{8\kappa}{m}\cos ka - \frac{2\kappa}{m}\cos 2ka)\boldsymbol{l}_k = -4\frac{\kappa}{m}(1-\cos ka)^2\boldsymbol{l}_k = -16\frac{\kappa}{m}\sin^4\frac{ka}{2}\boldsymbol{l}_k$ より，$\boldsymbol{l}_k$ は A の固有値 $\lambda_k = -16\frac{\kappa}{m}\sin^4\frac{ka}{2}$ に属する固有ベクトルである。したがって，格子振動の振動数 $\omega_k = \sqrt{-\lambda_k}$ は

$$\omega_k = 4\sqrt{\frac{\kappa}{m}}\sin^2\frac{ka}{2} \tag{7.1.120}$$

となる。格子振動のスペクトルは図のようになる。



7.1.11　1 次元格子の縦波格子振動 (単位胞に 2 原子の場合)

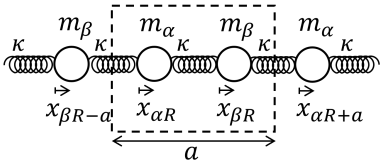
例題 11. 図のような 1 次元格子の縦波格子振動を周期的境界条件の下で考える。単位胞は質量 m_α の原子 α と質量 m_β の原子 β の 2 個の原子からなり，単位胞の総数は N 個である。隣接する原子はばね定数 κ のばねで連結されているとする。格子定数 a，格子ベクトル $R = na\,(n = 1, \cdots, N)$ を用いると，この系のラグランジ

アン L は

$$L = \sum_R \left(\frac{1}{2} m_\alpha \dot{x}_{\alpha R}^2 + \frac{1}{2} m_\beta \dot{x}_{\beta R}^2 \right) - \sum_R \left(\frac{1}{2} \kappa (x_{\alpha R} - x_{\beta R})^2 + \frac{1}{2} \kappa (x_{\beta R} - x_{\alpha R+a})^2 \right) \tag{7.1.121}$$

である。ここで，$x_{\alpha R} = x_{\alpha R}(t)$，$x_{\beta R} = x_{\beta R}(t)$ は単位胞 R の原子 α，原子 β の時刻 t における平衡位置からの変位である。このとき，原子の運動は連立微分方程式

$$\begin{cases} m_\alpha \ddot{x}_{\alpha R} = \kappa x_{\beta R-a} - 2\kappa x_{\alpha R} + \kappa x_{\beta R} \\ m_\beta \ddot{x}_{\beta R} = \kappa x_{\alpha R} - 2\kappa x_{\beta R} + \kappa x_{\alpha R+a} \end{cases} \tag{7.1.122}$$



によって記述される。あるいは，(7.1.122) は $2N$ 次元列ベクトル $\boldsymbol{\xi}$ と $2N$ 次エルミート行列 A を用いて

$$\ddot{\boldsymbol{\xi}} = A\boldsymbol{\xi} \qquad \boldsymbol{\xi} = \sum_R (\xi_{\alpha R} \boldsymbol{e}_{\alpha R} + \xi_{\beta R} \boldsymbol{e}_{\beta R}) \qquad \xi_{\alpha R} = \boldsymbol{e}_{\alpha R}^\dagger \boldsymbol{\xi} \qquad \xi_{\beta R} = \boldsymbol{e}_{\beta R}^\dagger \boldsymbol{\xi} \tag{7.1.123}$$

と表せる。ここで，$\xi_{\alpha R} = \sqrt{m_\alpha} x_{\alpha R}$，$\xi_{\beta R} = \sqrt{m_\beta} x_{\beta R}$ であり，また，$\{\boldsymbol{e}_{\alpha R}, \boldsymbol{e}_{\beta R} \,|\, R$ はすべての格子ベクトル $\}$ は $2N$ 次元列ベクトル空間の標準基底である。以下の問いに答えよ。

(1) A は

$$\begin{aligned} A = \sum_R \Bigg(& \frac{\kappa}{\sqrt{m_\alpha m_\beta}} \boldsymbol{e}_{\alpha R} \boldsymbol{e}_{\beta R-a}^\dagger - \frac{2\kappa}{m_\alpha} \boldsymbol{e}_{\alpha R} \boldsymbol{e}_{\alpha R}^\dagger + \frac{\kappa}{\sqrt{m_\alpha m_\beta}} \boldsymbol{e}_{\alpha R} \boldsymbol{e}_{\beta R}^\dagger \\ & + \frac{\kappa}{\sqrt{m_\alpha m_\beta}} \boldsymbol{e}_{\beta R} \boldsymbol{e}_{\alpha R}^\dagger - \frac{2\kappa}{m_\beta} \boldsymbol{e}_{\beta R} \boldsymbol{e}_{\beta R}^\dagger + \frac{\kappa}{\sqrt{m_\alpha m_\beta}} \boldsymbol{e}_{\beta R} \boldsymbol{e}_{\alpha R+a}^\dagger \Bigg) \end{aligned} \tag{7.1.124}$$

と表せることを示せ。

(2) 並進演算子 U を

$$U = \sum_R \left(\boldsymbol{e}_{\alpha R} \boldsymbol{e}_{\alpha R+a}^\dagger + \boldsymbol{e}_{\beta R} \boldsymbol{e}_{\beta R+a}^\dagger \right) \tag{7.1.125}$$

によって定義する。U はユニタリ行列であることを示せ。

(3) U の固有値・固有ベクトルは

$$\text{固有値：}e^{ika}\ (\text{重根}) \qquad \text{固有ベクトル：}\begin{cases}\boldsymbol{l}_{\alpha k}=\frac{1}{\sqrt{N}}\sum_R e^{ikR}\boldsymbol{e}_{\alpha R}\\ \boldsymbol{l}_{\beta k}=\frac{1}{\sqrt{N}}\sum_R e^{ikR}\boldsymbol{e}_{\beta R}\end{cases}$$

$$\text{ここで，}k=\frac{2\pi}{Na}j\ (j=0,\cdots,N-1)\text{ は波数ベクトル} \tag{7.1.126}$$

で与えられることを示せ。

(4) U，A について

$$UAU^\dagger=A \qquad \text{つまり} \qquad [U,A]=O \tag{7.1.127}$$

が成り立つことを示せ。

(5) A の固有値 $\lambda_{\pm k}$ および格子振動の振動数 $\omega_{\pm k}=\sqrt{-\lambda_{\pm k}}$ を求めよ。また，格子振動のスペクトルを図示せよ。ただし，波数ベクトル k は第 1 ブリルアンゾーンにとるものとする。

[解答]

(1)(7.1.122) より，$\ddot{\xi}_{\alpha R}=\frac{\kappa}{\sqrt{m_\alpha m_\beta}}\xi_{\beta R-a}-\frac{2\kappa}{m_\alpha}\xi_{\alpha R}+\frac{\kappa}{\sqrt{m_\alpha m_\beta}}\xi_{\beta R}$，$\ddot{\xi}_{\beta R}=\frac{\kappa}{\sqrt{m_\alpha m_\beta}}\xi_{\alpha R}-\frac{2\kappa}{m_\beta}\xi_{\beta R}+\frac{\kappa}{\sqrt{m_\alpha m_\beta}}\xi_{\alpha R+a}$ であるから，$\ddot{\boldsymbol{\xi}}=\sum_R(\ddot{\xi}_{\alpha R}\boldsymbol{e}_{\alpha R}+\ddot{\xi}_{\beta R}\boldsymbol{e}_{\beta R})=\sum_R(\boldsymbol{e}_{\alpha R}\ddot{\xi}_{\alpha R}+\boldsymbol{e}_{\beta R}\ddot{\xi}_{\beta R})=\sum_R(\boldsymbol{e}_{\alpha R}(\frac{\kappa}{\sqrt{m_\alpha m_\beta}}\xi_{\beta R-a}-\frac{2\kappa}{m_\alpha}\xi_{\alpha R}+\frac{\kappa}{\sqrt{m_\alpha m_\beta}}\xi_{\beta R})+\boldsymbol{e}_{\beta R}(\frac{\kappa}{\sqrt{m_\alpha m_\beta}}\xi_{\alpha R}-\frac{2\kappa}{m_\beta}\xi_{\beta R}+\frac{\kappa}{\sqrt{m_\alpha m_\beta}}\xi_{\alpha R+a}))=\sum_R(\boldsymbol{e}_{\alpha R}(\frac{\kappa}{\sqrt{m_\alpha m_\beta}}\boldsymbol{e}^\dagger_{\beta R-a}\boldsymbol{\xi}-\frac{2\kappa}{m_\alpha}\boldsymbol{e}^\dagger_{\alpha R}\boldsymbol{\xi}+\frac{\kappa}{\sqrt{m_\alpha m_\beta}}\boldsymbol{e}^\dagger_{\beta R}\boldsymbol{\xi})+\boldsymbol{e}_{\beta R}(\frac{\kappa}{\sqrt{m_\alpha m_\beta}}\boldsymbol{e}^\dagger_{\alpha R}\boldsymbol{\xi}-\frac{2\kappa}{m_\beta}\boldsymbol{e}^\dagger_{\beta R}\boldsymbol{\xi}+\frac{\kappa}{\sqrt{m_\alpha m_\beta}}\boldsymbol{e}^\dagger_{\alpha R+a}\boldsymbol{\xi}))=\sum_R(\frac{\kappa}{\sqrt{m_\alpha m_\beta}}\boldsymbol{e}_{\alpha R}\boldsymbol{e}^\dagger_{\beta R-a}-\frac{2\kappa}{m_\alpha}\boldsymbol{e}_{\alpha R}\boldsymbol{e}^\dagger_{\alpha R}+\frac{\kappa}{\sqrt{m_\alpha m_\beta}}\boldsymbol{e}_{\alpha R}\boldsymbol{e}^\dagger_{\beta R}+\frac{\kappa}{\sqrt{m_\alpha m_\beta}}\boldsymbol{e}_{\beta R}\boldsymbol{e}^\dagger_{\alpha R}-\frac{2\kappa}{m_\beta}\boldsymbol{e}_{\beta R}\boldsymbol{e}^\dagger_{\beta R}+\frac{\kappa}{\sqrt{m_\alpha m_\beta}}\boldsymbol{e}_{\beta R}\boldsymbol{e}^\dagger_{\alpha R+a})\boldsymbol{\xi}$ となる。したがって，(7.1.124) が示された。

(2)$U^\dagger=\sum_R(\boldsymbol{e}_{\alpha R+a}\boldsymbol{e}^\dagger_{\alpha R}+\boldsymbol{e}_{\beta R+a}\boldsymbol{e}^\dagger_{\beta R})$ より，$UU^\dagger=\sum_R\sum_{R'}(\boldsymbol{e}_{\alpha R}\boldsymbol{e}^\dagger_{\alpha R+a}+\boldsymbol{e}_{\beta R}\boldsymbol{e}^\dagger_{\beta R+a})(\boldsymbol{e}_{\alpha R'+a}\boldsymbol{e}^\dagger_{\alpha R'}+\boldsymbol{e}_{\beta R'+a}\boldsymbol{e}^\dagger_{\beta R'})=\sum_R(\boldsymbol{e}_{\alpha R}\boldsymbol{e}^\dagger_{\alpha R}+\boldsymbol{e}_{\beta R}\boldsymbol{e}^\dagger_{\beta R})=I$ となる。同様に $U^\dagger U=I$ も示せる。したがって，$U^\dagger=U^{-1}$，つまり，U はユニタリ行列である。

(3)U は補足・計算例 32 で扱った巡回演算子 $\hat{C}^\dagger$ に対応するから，原子 α の副格子と原子 β の副格子のそれぞれについて (3.3.79) の $\hat{C}^\dagger$ の固有値・固有ベクトルを適用することにより，(7.1.126) を得る。

(4)$U\boldsymbol{e}_{\tau R}\boldsymbol{e}^\dagger_{\tau' R'}U^\dagger=\boldsymbol{e}_{\tau R-a}\boldsymbol{e}^\dagger_{\tau' R'-a}\ (\tau,\tau'=\alpha,\beta)$ となるから，(7.1.127) は明らかに成り立つ。

(5)$[U,A]=O$ より，U と A は同時対角化可能である。U の固有値 e^{ika} は重根で

あるから，2 次元の部分空間 $W_k = \mathrm{span}(\boldsymbol{l}_{\alpha k}, \boldsymbol{l}_{\beta k})$ における A の固有値問題を解けばよい。(7.1.124) を $\boldsymbol{l}_{\alpha k}$，$\boldsymbol{l}_{\beta k}$ に作用させると

$$\begin{cases} A\boldsymbol{l}_{\alpha k} = -\frac{2\kappa}{m_\alpha}\boldsymbol{l}_{\alpha k} + \frac{\kappa}{\sqrt{m_\alpha m_\beta}}\boldsymbol{l}_{\beta k} + \frac{\kappa}{\sqrt{m_\alpha m_\beta}}e^{ika}\boldsymbol{l}_{\beta k} = -\frac{2\kappa}{m_\alpha}\boldsymbol{l}_{\alpha k} + \Delta_k^*\boldsymbol{l}_{\beta k} \\ A\boldsymbol{l}_{\beta k} = \frac{\kappa}{\sqrt{m_\alpha m_\beta}}e^{-ika}\boldsymbol{l}_{\alpha k} + \frac{\kappa}{\sqrt{m_\alpha m_\beta}}\boldsymbol{l}_{\alpha k} - \frac{2\kappa}{m_\beta}\boldsymbol{l}_{\beta k} = \Delta_k\boldsymbol{l}_{\alpha k} - \frac{2\kappa}{m_\beta}\boldsymbol{l}_{\beta k} \end{cases} \tag{7.1.128}$$

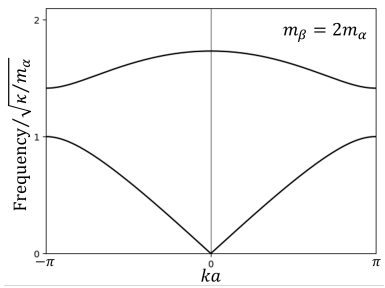
となる。ここで，$\Delta_k = \frac{\kappa}{\sqrt{m_\alpha m_\beta}}(1 + e^{-ika})$ とおいた。したがって，W_k における正規直交基底 $\{\boldsymbol{l}_{\alpha k}, \boldsymbol{l}_{\beta k}\}$ による A の行列表現 A_k は

$$A_k = \begin{bmatrix} -\frac{2\kappa}{m_\alpha} & \Delta_k \\ \Delta_k^* & -\frac{2\kappa}{m_\beta} \end{bmatrix} \tag{7.1.129}$$

となる。A_k の固有値は $\lambda_{\pm k} = -(\kappa(\frac{1}{m_\alpha} + \frac{1}{m_\beta}) \pm \sqrt{(\kappa(\frac{1}{m_\alpha} - \frac{1}{m_\beta}))^2 + |\Delta_k|^2})$ である。ここで, $|\Delta_k|^2 = \frac{4\kappa^2}{m_\alpha m_\beta}\cos^2\frac{ka}{2}$ である。したがって, 格子振動の振動数 $\omega_{\pm k} = \sqrt{-\lambda_{\pm k}}$ は

$$\omega_{\pm k} = \sqrt{\kappa\left(\frac{1}{m_\alpha} + \frac{1}{m_\beta}\right) \pm \sqrt{\left(\kappa\left(\frac{1}{m_\alpha} - \frac{1}{m_\beta}\right)\right)^2 + \frac{4\kappa^2}{m_\alpha m_\beta}\cos^2\frac{ka}{2}}} \tag{7.1.130}$$

となる。$m_\beta/m_\alpha = 2$ として格子振動のスペクトルを描くと図のようになる。



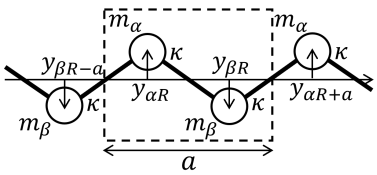
7.1.12　1 次元格子の横波格子振動 (単位胞に 2 原子の場合)

例題 12. 図のような 1 次元格子の横波格子振動を周期的境界条件の下で考える。単位胞は質量 m_α の原子 α と質量 m_β の原子 β の 2 個の原子からなり，単位胞の総数は N 個である。隣接する原子はばね定数 κ の屈曲のばねで連結されているとする。格子定数 a，格子ベクトル $R = na\,(n = 1, \cdots, N)$ を用いると，この系のラグ

ランジアン L は

$$
\begin{aligned}
L = &\sum_R \left(\frac{1}{2} m_\alpha \dot{y}_{\alpha R}^2 + \frac{1}{2} m_\beta \dot{y}_{\beta R}^2 \right) \\
&- \sum_R \left(\frac{1}{2} \kappa (-y_{\beta R-a} + 2y_{\alpha R} - y_{\beta R})^2 + \frac{1}{2} \kappa (-y_{\alpha R} + 2y_{\beta R} - y_{\alpha R+a})^2 \right)
\end{aligned}
\tag{7.1.131}
$$

である。ここで，$y_{\alpha R} = y_{\alpha R}(t)$，$y_{\beta R} = y_{\beta R}(t)$ は単位胞 R の原子 α，原子 β の時刻 t における平衡位置からの変位であり，格子に対して垂直方向に生じる。このとき，原子の運動は連立微分方程式



$$
\begin{cases}
m_\alpha \ddot{y}_{\alpha R} = -\kappa y_{\alpha R-a} + 4\kappa y_{\beta R-a} - 6\kappa y_{\alpha R} + 4\kappa y_{\beta R} - \kappa y_{\alpha R+a} \\
m_\beta \ddot{y}_{\beta R} = -\kappa y_{\beta R-a} + 4\kappa y_{\alpha R} - 6\kappa y_{\beta R} + 4\kappa y_{\alpha R+a} - \kappa y_{\beta R+a}
\end{cases}
\tag{7.1.132}
$$

によって記述される。あるいは，(7.1.132) は $2N$ 次元列ベクトル $\boldsymbol{\eta}$ と $2N$ 次エルミート行列 A を用いて

$$
\ddot{\boldsymbol{\eta}} = A\boldsymbol{\eta} \qquad \boldsymbol{\eta} = \sum_R (\eta_{\alpha R} \boldsymbol{e}_{\alpha R} + \eta_{\beta R} \boldsymbol{e}_{\beta R}) \qquad \eta_{\alpha R} = \boldsymbol{e}_{\alpha R}^\dagger \boldsymbol{\eta} \qquad \eta_{\beta R} = \boldsymbol{e}_{\beta R}^\dagger \boldsymbol{\eta}
\tag{7.1.133}
$$

と表せる。ここで，$\eta_{\alpha R} = \sqrt{m_\alpha} y_{\alpha R}$，$\eta_{\beta R} = \sqrt{m_\beta} y_{\beta R}$ であり，また，$\{\boldsymbol{e}_{\alpha R}, \boldsymbol{e}_{\beta R} \,|\, R$ はすべての格子ベクトル $\}$ は $2N$ 次元列ベクトル空間の標準基底である。以下の問いに答えよ。

(1) A は

$$
\begin{aligned}
A = \sum_R \Bigg(&- \frac{\kappa}{m_\alpha} \boldsymbol{e}_{\alpha R} \boldsymbol{e}_{\alpha R-a}^\dagger + \frac{4\kappa}{\sqrt{m_\alpha m_\beta}} \boldsymbol{e}_{\alpha R} \boldsymbol{e}_{\beta R-a}^\dagger - \frac{6\kappa}{m_\alpha} \boldsymbol{e}_{\alpha R} \boldsymbol{e}_{\alpha R}^\dagger \\
&\qquad + \frac{4\kappa}{\sqrt{m_\alpha m_\beta}} \boldsymbol{e}_{\alpha R} \boldsymbol{e}_{\beta R}^\dagger - \frac{\kappa}{m_\alpha} \boldsymbol{e}_{\alpha R} \boldsymbol{e}_{\alpha R+a}^\dagger \\
&- \frac{\kappa}{m_\beta} \boldsymbol{e}_{\beta R} \boldsymbol{e}_{\beta R-a}^\dagger + \frac{4\kappa}{\sqrt{m_\alpha m_\beta}} \boldsymbol{e}_{\beta R} \boldsymbol{e}_{\alpha R}^\dagger - \frac{6\kappa}{m_\beta} \boldsymbol{e}_{\beta R} \boldsymbol{e}_{\beta R}^\dagger \\
&\qquad + \frac{4\kappa}{\sqrt{m_\alpha m_\beta}} \boldsymbol{e}_{\beta R} \boldsymbol{e}_{\alpha R+a}^\dagger - \frac{\kappa}{m_\beta} \boldsymbol{e}_{\beta R} \boldsymbol{e}_{\beta R+a}^\dagger \Bigg)
\end{aligned}
\tag{7.1.134}
$$

と表せることを示せ。

(2) 並進演算子 U を

$$U = \sum_R \left(\boldsymbol{e}_{\alpha R} \boldsymbol{e}^\dagger_{\alpha R+a} + \boldsymbol{e}_{\beta R} \boldsymbol{e}^\dagger_{\beta R+a} \right) \tag{7.1.135}$$

によって定義する。U はユニタリ行列であることを示せ。

(3) U の固有値・固有ベクトルは

$$\text{固有値：} e^{ika}\ (\text{重根}) \qquad \text{固有ベクトル：} \begin{cases} \boldsymbol{l}_{\alpha k} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_R e^{ikR} \boldsymbol{e}_{\alpha R} \\ \boldsymbol{l}_{\beta k} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_R e^{ikR} \boldsymbol{e}_{\beta R} \end{cases}$$

$$\text{ここで，} k = \frac{2\pi}{Na} j\ (j = 0, \cdots, N-1) \text{ は波数ベクトル} \tag{7.1.136}$$

で与えられることを示せ。

(4) U，A について

$$UAU^\dagger = A \qquad \text{つまり} \qquad [U, A] = O \tag{7.1.137}$$

が成り立つことを示せ。

(5) A の固有値 $\lambda_{\pm k}$ および格子振動の振動数 $\omega_{\pm k} = \sqrt{-\lambda_{\pm k}}$ を求めよ。また，格子振動のスペクトルを図示せよ。ただし，波数ベクトル k は第 1 ブリルアンゾーンにとるものとする。

[解答]

(1)(7.1.132) より，$\ddot{\eta}_{\alpha R} = -\frac{\kappa}{m_\alpha}\eta_{\alpha R-a} + \frac{4\kappa}{\sqrt{m_\alpha m_\beta}}\eta_{\beta R-a} - \frac{6\kappa}{m_\alpha}\eta_{\alpha R} + \frac{4\kappa}{\sqrt{m_\alpha m_\beta}}\eta_{\beta R} - \frac{\kappa}{m_\alpha}\eta_{\alpha R+a}$，$\ddot{\eta}_{\beta R} = -\frac{\kappa}{m_\beta}\eta_{\beta R-a} + \frac{4\kappa}{\sqrt{m_\alpha m_\beta}}\eta_{\alpha R} - \frac{6\kappa}{m_\beta}\eta_{\beta R} + \frac{4\kappa}{\sqrt{m_\alpha m_\beta}}\eta_{\alpha R+a} - \frac{\kappa}{m_\beta}\eta_{\beta R+a}$ であるから，$\ddot{\boldsymbol{\eta}} = \sum_R(\ddot{\eta}_{\alpha R}\boldsymbol{e}_{\alpha R} + \ddot{\eta}_{\beta R}\boldsymbol{e}_{\beta R}) = \sum_R(\boldsymbol{e}_{\alpha R}\ddot{\eta}_{\alpha R} + \boldsymbol{e}_{\beta R}\ddot{\eta}_{\beta R}) = \sum_R(\boldsymbol{e}_{\alpha R}(-\frac{\kappa}{m_\alpha}\eta_{\alpha R-a} + \frac{4\kappa}{\sqrt{m_\alpha m_\beta}}\eta_{\beta R-a} - \frac{6\kappa}{m_\alpha}\eta_{\alpha R} + \frac{4\kappa}{\sqrt{m_\alpha m_\beta}}\eta_{\beta R} - \frac{\kappa}{m_\alpha}\eta_{\alpha R+a}) + \boldsymbol{e}_{\beta R}(-\frac{\kappa}{m_\beta}\eta_{\beta R-a} + \frac{4\kappa}{\sqrt{m_\alpha m_\beta}}\eta_{\alpha R} - \frac{6\kappa}{m_\beta}\eta_{\beta R} + \frac{4\kappa}{\sqrt{m_\alpha m_\beta}}\eta_{\alpha R+a} - \frac{\kappa}{m_\beta}\eta_{\beta R+a})) = \sum_R(\boldsymbol{e}_{\alpha R}(-\frac{\kappa}{m_\alpha}\boldsymbol{e}^\dagger_{\alpha R-a}\boldsymbol{\eta} + \frac{4\kappa}{\sqrt{m_\alpha m_\beta}}\boldsymbol{e}^\dagger_{\beta R-a}\boldsymbol{\eta} - \frac{6\kappa}{m_\alpha}\boldsymbol{e}^\dagger_{\alpha R}\boldsymbol{\eta} + \frac{4\kappa}{\sqrt{m_\alpha m_\beta}}\boldsymbol{e}^\dagger_{\beta R}\boldsymbol{\eta} - \frac{\kappa}{m_\alpha}\boldsymbol{e}^\dagger_{\alpha R+a}\boldsymbol{\eta}) + \boldsymbol{e}_{\beta R}(-\frac{\kappa}{m_\beta}\boldsymbol{e}^\dagger_{\beta R-a}\boldsymbol{\eta} + \frac{4\kappa}{\sqrt{m_\alpha m_\beta}}\boldsymbol{e}^\dagger_{\alpha R}\boldsymbol{\eta} - \frac{6\kappa}{m_\beta}\boldsymbol{e}^\dagger_{\beta R}\boldsymbol{\eta} + \frac{4\kappa}{\sqrt{m_\alpha m_\beta}}\boldsymbol{e}^\dagger_{\alpha R+a}\boldsymbol{\eta} - \frac{\kappa}{m_\beta}\boldsymbol{e}^\dagger_{\beta R+a}\boldsymbol{\eta})) = \sum_R(-\frac{\kappa}{m_\alpha}\boldsymbol{e}_{\alpha R}\boldsymbol{e}^\dagger_{\alpha R-a} + \frac{4\kappa}{\sqrt{m_\alpha m_\beta}}\boldsymbol{e}_{\alpha R}\boldsymbol{e}^\dagger_{\beta R-a} - \frac{6\kappa}{m_\alpha}\boldsymbol{e}_{\alpha R}\boldsymbol{e}^\dagger_{\alpha R} + \frac{4\kappa}{\sqrt{m_\alpha m_\beta}}\boldsymbol{e}_{\alpha R}\boldsymbol{e}^\dagger_{\beta R} - \frac{\kappa}{m_\alpha}\boldsymbol{e}_{\alpha R}\boldsymbol{e}^\dagger_{\alpha R+a} - \frac{\kappa}{m_\beta}\boldsymbol{e}_{\beta R}\boldsymbol{e}^\dagger_{\beta R-a} + \frac{4\kappa}{\sqrt{m_\alpha m_\beta}}\boldsymbol{e}_{\beta R}\boldsymbol{e}^\dagger_{\alpha R} - \frac{6\kappa}{m_\beta}\boldsymbol{e}_{\beta R}\boldsymbol{e}^\dagger_{\beta R} + \frac{4\kappa}{\sqrt{m_\alpha m_\beta}}\boldsymbol{e}_{\beta R}\boldsymbol{e}^\dagger_{\alpha R+a} - \frac{\kappa}{m_\beta}\boldsymbol{e}_{\beta R}\boldsymbol{e}^\dagger_{\beta R+a})\boldsymbol{\eta}$ となる。したがって，(7.1.134) が示された。

(2)$U^\dagger = \sum_R(\boldsymbol{e}_{\alpha R+a}\boldsymbol{e}^\dagger_{\alpha R} + \boldsymbol{e}_{\beta R+a}\boldsymbol{e}^\dagger_{\beta R})$ より，$UU^\dagger = \sum_R\sum_{R'}(\boldsymbol{e}_{\alpha R}\boldsymbol{e}^\dagger_{\alpha R+a} + \boldsymbol{e}_{\beta R}\boldsymbol{e}^\dagger_{\beta R+a})(\boldsymbol{e}_{\alpha R'+a}\boldsymbol{e}^\dagger_{\alpha R'} + \boldsymbol{e}_{\beta R'+a}\boldsymbol{e}^\dagger_{\beta R'}) = \sum_R(\boldsymbol{e}_{\alpha R}\boldsymbol{e}^\dagger_{\alpha R} + \boldsymbol{e}_{\beta R}\boldsymbol{e}^\dagger_{\beta R}) = I$ となる。同様に $U^\dagger U = I$ も示せる。し

たがって，$U^\dagger = U^{-1}$，つまり，U はユニタリ行列である。
(3)U は補足・計算例 32 で扱った巡回演算子 $\hat{C}^\dagger$ に対応するから，原子 α の副格子と原子 β の副格子のそれぞれについて (3.3.79) の $\hat{C}^\dagger$ の固有値・固有ベクトルを適用することにより，(7.1.136) を得る。
(4)$U\boldsymbol{e}_{\tau R}\boldsymbol{e}^\dagger_{\tau' R'}U^\dagger = \boldsymbol{e}_{\tau R-a}\boldsymbol{e}^\dagger_{\tau' R'-a}\,(\tau, \tau' = \alpha, \beta)$ となるから，(7.1.137) は明らかに成り立つ。
(5)$[U, A] = O$ より，U と A は同時対角化可能である。U の固有値 e^{ika} は重根であるから，2 次元の部分空間 $W_k = \mathrm{span}(\boldsymbol{l}_{\alpha k}, \boldsymbol{l}_{\beta k})$ における A の固有値問題を解けばよい。(7.1.134) を $\boldsymbol{l}_{\alpha k}$，$\boldsymbol{l}_{\beta k}$ に作用させると

$$\begin{cases} A\boldsymbol{l}_{\alpha k} = -\frac{\kappa}{m_\alpha}e^{-ika}\boldsymbol{l}_{\alpha k} - \frac{6\kappa}{m_\alpha}\boldsymbol{l}_{\alpha k} - \frac{\kappa}{m_\alpha}e^{ika}\boldsymbol{l}_{\alpha k} + \frac{4\kappa}{\sqrt{m_\alpha m_\beta}}\boldsymbol{l}_{\beta k} + \frac{4\kappa}{\sqrt{m_\alpha m_\beta}}e^{ika}\boldsymbol{l}_{\beta k} \\ \qquad = (-\frac{6\kappa}{m_\alpha} - \frac{2\kappa}{m_\alpha}\cos ka)\boldsymbol{l}_{\alpha k} + \Delta_k^*\boldsymbol{l}_{\beta k} \\ A\boldsymbol{l}_{\beta k} = -\frac{\kappa}{m_\beta}e^{-ika}\boldsymbol{l}_{\beta k} - \frac{6\kappa}{m_\beta}\boldsymbol{l}_{\beta k} - \frac{\kappa}{m_\beta}e^{ika}\boldsymbol{l}_{\beta k} + \frac{4\kappa}{\sqrt{m_\alpha m_\beta}}\boldsymbol{l}_{\alpha k} + \frac{4\kappa}{\sqrt{m_\alpha m_\beta}}e^{-ika}\boldsymbol{l}_{\alpha k} \\ \qquad = \Delta_k\boldsymbol{l}_{\alpha k} + (-\frac{6\kappa}{m_\beta} - \frac{2\kappa}{m_\beta}\cos ka)\boldsymbol{l}_{\beta k} \end{cases} \tag{7.1.138}$$

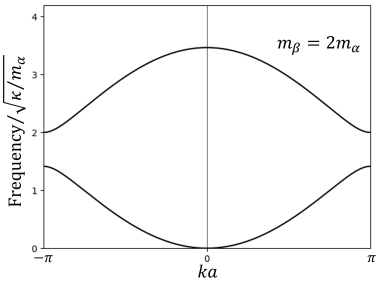
となる。ここで，$\Delta_k = \frac{4\kappa}{\sqrt{m_\alpha m_\beta}}(1 + e^{-ika})$ とおいた。したがって，W_k における正規直交基底 $\{\boldsymbol{l}_{\alpha k}, \boldsymbol{l}_{\beta k}\}$ による A の行列表現 A_k は

$$A_k = \begin{bmatrix} -\frac{6\kappa}{m_\alpha} - \frac{2\kappa}{m_\alpha}\cos ka & \Delta_k \\ \Delta_k^* & -\frac{6\kappa}{m_\beta} - \frac{2\kappa}{m_\beta}\cos ka \end{bmatrix} \tag{7.1.139}$$

となる。A_k の固有値は $\lambda_{\pm k} = -(\kappa(\frac{1}{m_\alpha}+\frac{1}{m_\beta})(3+\cos ka) \pm \sqrt{(\kappa(\frac{1}{m_\alpha} - \frac{1}{m_\beta})(3 + \cos ka))^2 + |\Delta_k|^2})$ である。ここで，$|\Delta_k|^2 = \frac{64\kappa^2}{m_\alpha m_\beta}\cos^2\frac{ka}{2}$ である。したがって，格子振動の振動数 $\omega_{\pm k} = \sqrt{-\lambda_{\pm k}}$ は

$$\omega_{\pm k} = \sqrt{\kappa\left(\frac{1}{m_\alpha} + \frac{1}{m_\beta}\right)(3 + \cos ka) \pm \sqrt{\left(\kappa\left(\frac{1}{m_\alpha} - \frac{1}{m_\beta}\right)(3 + \cos ka)\right)^2 + |\Delta_k|^2}} \tag{7.1.140}$$

となる。$m_\beta/m_\alpha = 2$ として格子振動のスペクトルを描くと図のようになる。

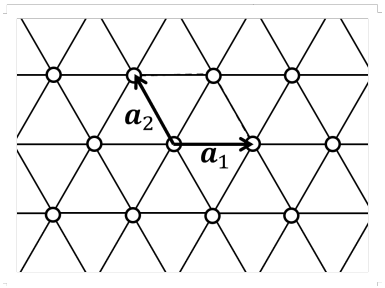


7.1.13　2 次元六方格子の面直格子振動 (単位胞に 1 原子の場合)

例題 13. 図のような 2 次元六方格子の面直格子振動を周期的境界条件の下で考える。ただし, 格子には張りを与えてあるとする。単位胞は質量 m の原子 1 個からなり, 単位胞の総数は N 個である。基本並進ベクトル $\boldsymbol{a}_1$, $\boldsymbol{a}_2$ 方向の単位胞の数を N_1, N_2 とすると $N = N_1 N_2$ である。隣接する原子はばね定数 κ のばねで連結されているとする。格子定数 a, 格子ベクトル $\boldsymbol{R} = n_1\boldsymbol{a}_1 + n_2\boldsymbol{a}_2$ $(n_1 = 1, \cdots, N_1,\ n_2 = 1, \cdots, N_2)$ を用いると, この系のラグランジアン L は

$$
\begin{aligned}
L = &\sum_{\boldsymbol{R}} \frac{1}{2} m \dot{z}_{\boldsymbol{R}}^2 \\
&- \sum_{\boldsymbol{R}} \left(\frac{1}{2}\kappa(z_{\boldsymbol{R}} - z_{\boldsymbol{R}+\boldsymbol{a}_1})^2 + \frac{1}{2}\kappa(z_{\boldsymbol{R}} - z_{\boldsymbol{R}+\boldsymbol{a}_2})^2 + \frac{1}{2}\kappa(z_{\boldsymbol{R}} - z_{\boldsymbol{R}+\boldsymbol{a}_1+\boldsymbol{a}_2})^2 \right)
\end{aligned}
\tag{7.1.141}
$$

である。ここで, $z_{\boldsymbol{R}} = z_{\boldsymbol{R}}(t)$ は単位胞 $\boldsymbol{R}$ の原子の時刻 t における平衡位置からの変位であり, 格子に対して面直方向に生じる。このとき, 原子の運動は連立微分方程式



$$
\begin{aligned}
m\ddot{z}_{\boldsymbol{R}} = &-6\kappa z_{\boldsymbol{R}} + \kappa z_{\boldsymbol{R}-\boldsymbol{a}_1} + \kappa z_{\boldsymbol{R}-\boldsymbol{a}_2} + \kappa z_{\boldsymbol{R}-\boldsymbol{a}_1-\boldsymbol{a}_2} \\
&+ \kappa z_{\boldsymbol{R}+\boldsymbol{a}_1} + \kappa z_{\boldsymbol{R}+\boldsymbol{a}_2} + \kappa z_{\boldsymbol{R}+\boldsymbol{a}_1+\boldsymbol{a}_2}
\end{aligned}
\tag{7.1.142}
$$

によって記述される。あるいは, (7.1.142) は N 次元列ベクトル $\boldsymbol{z}$ と N 次エルミート行列 A を用いて

$$
\ddot{\boldsymbol{z}} = A\boldsymbol{z} \qquad \boldsymbol{z} = \sum_{\boldsymbol{R}} z_{\boldsymbol{R}} \boldsymbol{e}_{\boldsymbol{R}} \qquad z_{\boldsymbol{R}} = \boldsymbol{e}_{\boldsymbol{R}}^{\dagger} \boldsymbol{z}
\tag{7.1.143}
$$

と表せる。ここで, $\{\boldsymbol{e}_{\boldsymbol{R}} \,|\, \boldsymbol{R}$ はすべての格子ベクトル$\}$ は N 次元列ベクトル空間の標準基底である。以下の問いに答えよ。

(1) A は

$$
\begin{aligned}
A = \sum_{\boldsymbol{R}} \Bigg(&-\frac{6\kappa}{m} \boldsymbol{e}_{\boldsymbol{R}} \boldsymbol{e}_{\boldsymbol{R}}^{\dagger} + \frac{\kappa}{m} \boldsymbol{e}_{\boldsymbol{R}} \boldsymbol{e}_{\boldsymbol{R}-\boldsymbol{a}_1}^{\dagger} + \frac{\kappa}{m} \boldsymbol{e}_{\boldsymbol{R}} \boldsymbol{e}_{\boldsymbol{R}-\boldsymbol{a}_2}^{\dagger} + \frac{\kappa}{m} \boldsymbol{e}_{\boldsymbol{R}} \boldsymbol{e}_{\boldsymbol{R}-\boldsymbol{a}_1-\boldsymbol{a}_2}^{\dagger} \\
&+ \frac{\kappa}{m} \boldsymbol{e}_{\boldsymbol{R}} \boldsymbol{e}_{\boldsymbol{R}+\boldsymbol{a}_1}^{\dagger} + \frac{\kappa}{m} \boldsymbol{e}_{\boldsymbol{R}} \boldsymbol{e}_{\boldsymbol{R}+\boldsymbol{a}_2}^{\dagger} + \frac{\kappa}{m} \boldsymbol{e}_{\boldsymbol{R}} \boldsymbol{e}_{\boldsymbol{R}+\boldsymbol{a}_1+\boldsymbol{a}_2}^{\dagger} \Bigg)
\end{aligned}
\tag{7.1.144}
$$

と表せることを示せ。

(2) 並進演算子 U_1，U_2 を

$$U_1 = \sum_{\boldsymbol{R}} \boldsymbol{e}_{\boldsymbol{R}} \boldsymbol{e}^{\dagger}_{\boldsymbol{R}+\boldsymbol{a}_1} \qquad\qquad U_2 = \sum_{\boldsymbol{R}} \boldsymbol{e}_{\boldsymbol{R}} \boldsymbol{e}^{\dagger}_{\boldsymbol{R}+\boldsymbol{a}_2} \tag{7.1.145}$$

によって定義する。U_1，U_2 はユニタリ行列であることを示せ。

(3) U_1，U_2 の固有値 (上段：U_1，下段：U_2)・固有ベクトル (U_1，U_2 に共通) は

$$\text{固有値：}\begin{cases} e^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{a}_1} \\ e^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{a}_2} \end{cases} \qquad \text{固有ベクトル：}\boldsymbol{l}_{\boldsymbol{k}} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\boldsymbol{R}} e^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{R}} \boldsymbol{e}_{\boldsymbol{R}}$$

ここで, $\boldsymbol{k} = \dfrac{j_1}{N_1}\boldsymbol{b}_1 + \dfrac{j_2}{N_2}\boldsymbol{b}_2$ ($j_1 = 0, \cdots, N_1 - 1$, $j_2 = 0, \cdots, N_2 - 1$)
は波数ベクトル ($\boldsymbol{b}_1$, $\boldsymbol{b}_2$は逆格子ベクトル)

(7.1.146)

で与えられることを示せ。

(4) U_1，U_2，A について

$$[\,U_1, U_2\,] = O \qquad [\,U_1, A\,] = O \qquad [\,U_2, A\,] = O \tag{7.1.147}$$

が成り立つことを示せ。

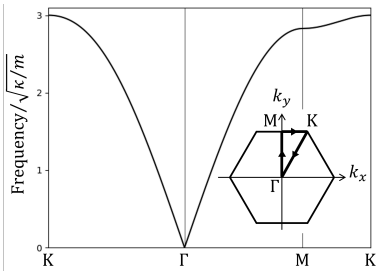
(5) A の固有値 $\lambda_{\boldsymbol{k}}$ および格子振動の振動数 $\omega_{\boldsymbol{k}} = \sqrt{-\lambda_{\boldsymbol{k}}}$ を求めよ。また，格子振動のスペクトルを図示せよ。ただし，波数ベクトル $\boldsymbol{k}$ は第 1 ブリルアンゾーンにとるものとし，経路を $\mathrm{K} \to \Gamma \to \mathrm{M} \to \mathrm{K}$ とせよ ($\boldsymbol{k}_{\mathrm{K}} = \frac{1}{3}\boldsymbol{b}_1 + \frac{1}{3}\boldsymbol{b}_2$, $\boldsymbol{k}_{\Gamma} = \boldsymbol{0}$，$\boldsymbol{k}_{\mathrm{M}} = \frac{1}{2}\boldsymbol{b}_2$)。

[解答]
(1)(7.1.142) より，$\ddot{\boldsymbol{z}} = \sum_{\boldsymbol{R}} \ddot{z}_{\boldsymbol{R}} \boldsymbol{e}_{\boldsymbol{R}} = \sum_{\boldsymbol{R}} \boldsymbol{e}_{\boldsymbol{R}} \ddot{z}_{\boldsymbol{R}} = \sum_{\boldsymbol{R}} \boldsymbol{e}_{\boldsymbol{R}}(-\frac{6\kappa}{m} z_{\boldsymbol{R}} + \frac{\kappa}{m} z_{\boldsymbol{R}-\boldsymbol{a}_1} + \frac{\kappa}{m} z_{\boldsymbol{R}-\boldsymbol{a}_2} + \frac{\kappa}{m} z_{\boldsymbol{R}-\boldsymbol{a}_1-\boldsymbol{a}_2} + \frac{\kappa}{m} z_{\boldsymbol{R}+\boldsymbol{a}_1} + \frac{\kappa}{m} z_{\boldsymbol{R}+\boldsymbol{a}_2} + \frac{\kappa}{m} z_{\boldsymbol{R}+\boldsymbol{a}_1+\boldsymbol{a}_2}) = \sum_{\boldsymbol{R}} \boldsymbol{e}_{\boldsymbol{R}}(-\frac{6\kappa}{m} \boldsymbol{e}^{\dagger}_{\boldsymbol{R}} \boldsymbol{z} + \frac{\kappa}{m} \boldsymbol{e}^{\dagger}_{\boldsymbol{R}-\boldsymbol{a}_1} \boldsymbol{z} + \frac{\kappa}{m} \boldsymbol{e}^{\dagger}_{\boldsymbol{R}-\boldsymbol{a}_2} \boldsymbol{z} + \frac{\kappa}{m} \boldsymbol{e}^{\dagger}_{\boldsymbol{R}-\boldsymbol{a}_1-\boldsymbol{a}_2} \boldsymbol{z} + \frac{\kappa}{m} \boldsymbol{e}^{\dagger}_{\boldsymbol{R}+\boldsymbol{a}_1} \boldsymbol{z} + \frac{\kappa}{m} \boldsymbol{e}^{\dagger}_{\boldsymbol{R}+\boldsymbol{a}_2} \boldsymbol{z} + \frac{\kappa}{m} \boldsymbol{e}^{\dagger}_{\boldsymbol{R}+\boldsymbol{a}_1+\boldsymbol{a}_2} \boldsymbol{z}) = \sum_{\boldsymbol{R}}(-\frac{6\kappa}{m} \boldsymbol{e}_{\boldsymbol{R}} \boldsymbol{e}^{\dagger}_{\boldsymbol{R}} + \frac{\kappa}{m} \boldsymbol{e}_{\boldsymbol{R}} \boldsymbol{e}^{\dagger}_{\boldsymbol{R}-\boldsymbol{a}_1} + \frac{\kappa}{m} \boldsymbol{e}_{\boldsymbol{R}} \boldsymbol{e}^{\dagger}_{\boldsymbol{R}-\boldsymbol{a}_2} + \frac{\kappa}{m} \boldsymbol{e}_{\boldsymbol{R}} \boldsymbol{e}^{\dagger}_{\boldsymbol{R}-\boldsymbol{a}_1-\boldsymbol{a}_2} + \frac{\kappa}{m} \boldsymbol{e}_{\boldsymbol{R}} \boldsymbol{e}^{\dagger}_{\boldsymbol{R}+\boldsymbol{a}_1} + \frac{\kappa}{m} \boldsymbol{e}_{\boldsymbol{R}} \boldsymbol{e}^{\dagger}_{\boldsymbol{R}+\boldsymbol{a}_2} + \frac{\kappa}{m} \boldsymbol{e}_{\boldsymbol{R}} \boldsymbol{e}^{\dagger}_{\boldsymbol{R}+\boldsymbol{a}_1+\boldsymbol{a}_2})\boldsymbol{z}$ となる。したがって，(7.1.144) が示された。
(2)$i = 1, 2$ として, $U_i^{\dagger} = \sum_{\boldsymbol{R}} \boldsymbol{e}_{\boldsymbol{R}+\boldsymbol{a}_i} \boldsymbol{e}^{\dagger}_{\boldsymbol{R}}$ より, $U_i U_i^{\dagger} = \sum_{\boldsymbol{R}} \sum_{\boldsymbol{R}'} \boldsymbol{e}_{\boldsymbol{R}} \boldsymbol{e}^{\dagger}_{\boldsymbol{R}+\boldsymbol{a}_i} \boldsymbol{e}_{\boldsymbol{R}'+\boldsymbol{a}_i} \boldsymbol{e}^{\dagger}_{\boldsymbol{R}'} = \sum_{\boldsymbol{R}} \sum_{\boldsymbol{R}'} \boldsymbol{e}_{\boldsymbol{R}} \delta_{\boldsymbol{R}\boldsymbol{R}'} \boldsymbol{e}^{\dagger}_{\boldsymbol{R}'} = \sum_{\boldsymbol{R}} \boldsymbol{e}_{\boldsymbol{R}} \boldsymbol{e}^{\dagger}_{\boldsymbol{R}} = I$ となる。同様に $U_i^{\dagger} U_i = I$ も示せる。したがって，$U_i^{\dagger} = U_i^{-1}$，つまり，U_i はユニタリ行列である。
(3)U_1，U_2 は補足・計算例 32 で扱った巡回演算子 $\hat{C}^{\dagger}$ に対応するから，(3.3.79) の $\hat{C}^{\dagger}$ の固有値・固有ベクトルを適用することにより，(7.1.146) を得る。

(4)(2) と同様に計算すると，$U_1U_2 = \sum_{\boldsymbol{R}} \boldsymbol{e}_{\boldsymbol{R}} \boldsymbol{e}^{\dagger}_{\boldsymbol{R}+\boldsymbol{a}_1+\boldsymbol{a}_2}$，$U_2U_1 = \sum_{\boldsymbol{R}} \boldsymbol{e}_{\boldsymbol{R}} \boldsymbol{e}^{\dagger}_{\boldsymbol{R}+\boldsymbol{a}_1+\boldsymbol{a}_2}$ となるから，$U_1U_2 = U_2U_1$ である。また，$A = -\frac{6\kappa}{m}I + \frac{\kappa}{m}U_1^\dagger + \frac{\kappa}{m}U_2^\dagger + \frac{\kappa}{m}U_1^\dagger U_2^\dagger + \frac{\kappa}{m}U_1 + \frac{\kappa}{m}U_2 + \frac{\kappa}{m}U_1U_2$ と書ける。以上より，(7.1.147) は明らかに成り立つ。
(5)U_1，U_2，A は互いに可換であるから，同時対角化可能である。U_1，U_2 の固有ベクトル $\boldsymbol{l}_{\boldsymbol{k}}$ は A の固有ベクトルにもなっている。実際，$A\boldsymbol{l}_{\boldsymbol{k}} = (-\frac{6\kappa}{m}I + \frac{\kappa}{m}U_1^\dagger + \frac{\kappa}{m}U_2^\dagger + \frac{\kappa}{m}U_1^\dagger U_2^\dagger + \frac{\kappa}{m}U_1 + \frac{\kappa}{m}U_2 + \frac{\kappa}{m}U_1U_2)\boldsymbol{l}_{\boldsymbol{k}} = (-\frac{6\kappa}{m} + \frac{\kappa}{m}e^{-i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{a}_1} + \frac{\kappa}{m}e^{-i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{a}_2} + \frac{\kappa}{m}e^{-i\boldsymbol{k}\cdot(\boldsymbol{a}_1+\boldsymbol{a}_2)} + \frac{\kappa}{m}e^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{a}_1} + \frac{\kappa}{m}e^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{a}_2} + \frac{\kappa}{m}e^{i\boldsymbol{k}\cdot(\boldsymbol{a}_1+\boldsymbol{a}_2)})\boldsymbol{l}_{\boldsymbol{k}} = -\frac{2\kappa}{m}(3 - \cos\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{a}_1 - \cos\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{a}_2 - \cos\boldsymbol{k}\cdot(\boldsymbol{a}_1+\boldsymbol{a}_2))\boldsymbol{l}_{\boldsymbol{k}}$ より，$\boldsymbol{l}_{\boldsymbol{k}}$ は A の固有値 $\lambda_{\boldsymbol{k}} = -\frac{2\kappa}{m}(3 - \cos\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{a}_1 - \cos\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{a}_2 - \cos\boldsymbol{k}\cdot(\boldsymbol{a}_1+\boldsymbol{a}_2))$ に属する固有ベクトルである。したがって，格子振動の振動数 $\omega_{\boldsymbol{k}} = \sqrt{-\lambda_{\boldsymbol{k}}}$ は

$$\omega_{\boldsymbol{k}} = \sqrt{\frac{2\kappa}{m}(3 - \cos\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{a}_1 - \cos\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{a}_2 - \cos\boldsymbol{k}\cdot(\boldsymbol{a}_1+\boldsymbol{a}_2))} \tag{7.1.148}$$

となる。格子振動のスペクトルは図のようになる。

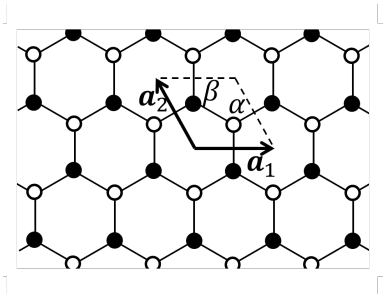


7.1.14　2 次元六方格子の面直格子振動 (単位胞に 2 原子の場合)

例題 14. 図のような 2 次元六方格子の面直格子振動を周期的境界条件の下で考える。ただし，格子には張りを与えてあるとする。単位胞は質量 m_α の原子 α と質量 m_β の原子 β の 2 個の原子からなり，単位胞の総数は N 個である。基本並進ベクトル $\boldsymbol{a}_1$，$\boldsymbol{a}_2$ 方向の単位胞の数を N_1，N_2 とすると $N = N_1N_2$ である。隣接する原子はばね定数 κ のばねで連結されているとする。格子定数 a，格子ベクトル $\boldsymbol{R} = n_1\boldsymbol{a}_1 + n_2\boldsymbol{a}_2\,(n_1 = 1, \cdots, N_1,\ n_2 = 1, \cdots, N_2)$ を用いると，この系のラグランジアン L は

$$\begin{aligned} L = &\sum_{\boldsymbol{R}} \left(\frac{1}{2}m_\alpha \dot{z}^2_{\alpha\boldsymbol{R}} + \frac{1}{2}m_\beta \dot{z}^2_{\beta\boldsymbol{R}} \right) \\ &- \sum_{\boldsymbol{R}} \left(\frac{1}{2}\kappa(z_{\alpha\boldsymbol{R}} - z_{\beta\boldsymbol{R}})^2 + \frac{1}{2}\kappa(z_{\beta\boldsymbol{R}} - z_{\alpha\boldsymbol{R}-\boldsymbol{a}_1})^2 + \frac{1}{2}\kappa(z_{\alpha\boldsymbol{R}} - z_{\beta\boldsymbol{R}-\boldsymbol{a}_2})^2 \right. \\ &\qquad \left. + \frac{1}{2}\kappa(z_{\alpha\boldsymbol{R}} - z_{\beta\boldsymbol{R}+\boldsymbol{a}_1})^2 + \frac{1}{2}\kappa(z_{\beta\boldsymbol{R}} - z_{\alpha\boldsymbol{R}+\boldsymbol{a}_2})^2 \right) \end{aligned} \tag{7.1.149}$$

である。ここで，$z_{\alpha\boldsymbol{R}} = z_{\alpha\boldsymbol{R}}(t)$，$z_{\beta\boldsymbol{R}} = z_{\beta\boldsymbol{R}}(t)$ は単位胞 $\boldsymbol{R}$ の原子 α，原子 β の時刻 t における平衡位置からの変位である。このとき，原子の運動は連立微分方程式



$$\begin{cases} m_\alpha \ddot{z}_{\alpha\boldsymbol{R}} = -3\kappa z_{\alpha\boldsymbol{R}} + \kappa z_{\beta\boldsymbol{R}} + \kappa z_{\beta\boldsymbol{R}-\boldsymbol{a}_2} + \kappa z_{\beta\boldsymbol{R}+\boldsymbol{a}_1} \\ m_\beta \ddot{z}_{\beta\boldsymbol{R}} = -3\kappa z_{\beta\boldsymbol{R}} + \kappa z_{\alpha\boldsymbol{R}} + \kappa z_{\alpha\boldsymbol{R}-\boldsymbol{a}_1} + \kappa z_{\alpha\boldsymbol{R}+\boldsymbol{a}_2} \end{cases} \tag{7.1.150}$$

によって記述される。あるいは，(7.1.150) は $2N$ 次元列ベクトル $\boldsymbol{\zeta}$ と $2N$ 次エルミート行列 A を用いて

$$\ddot{\boldsymbol{\zeta}} = A\boldsymbol{\zeta} \qquad \boldsymbol{\zeta} = \sum_{\boldsymbol{R}} (\zeta_{\alpha\boldsymbol{R}}\boldsymbol{e}_{\alpha\boldsymbol{R}} + \zeta_{\beta\boldsymbol{R}}\boldsymbol{e}_{\beta\boldsymbol{R}}) \qquad \zeta_{\alpha\boldsymbol{R}} = \boldsymbol{e}_{\alpha\boldsymbol{R}}^\dagger\boldsymbol{\zeta} \qquad \zeta_{\beta\boldsymbol{R}} = \boldsymbol{e}_{\beta\boldsymbol{R}}^\dagger\boldsymbol{\zeta} \tag{7.1.151}$$

と表せる。ここで，$\zeta_{\alpha\boldsymbol{R}} = \sqrt{m_\alpha} z_{\alpha\boldsymbol{R}}$, $\zeta_{\beta\boldsymbol{R}} = \sqrt{m_\beta} z_{\beta\boldsymbol{R}}$ であり，また，$\{\boldsymbol{e}_{\alpha\boldsymbol{R}}, \boldsymbol{e}_{\beta\boldsymbol{R}} \,|\, \boldsymbol{R}$ はすべての格子ベクトル $\}$ は $2N$ 次元列ベクトル空間の標準基底である。以下の問いに答えよ。

(1) A は

$$\begin{aligned} A = \sum_{\boldsymbol{R}} \Bigg(& -\frac{3\kappa}{m_\alpha}\boldsymbol{e}_{\alpha\boldsymbol{R}}\boldsymbol{e}_{\alpha\boldsymbol{R}}^\dagger + \frac{\kappa}{\sqrt{m_\alpha m_\beta}}\Big(\boldsymbol{e}_{\alpha\boldsymbol{R}}\boldsymbol{e}_{\beta\boldsymbol{R}}^\dagger + \boldsymbol{e}_{\alpha\boldsymbol{R}}\boldsymbol{e}_{\beta\boldsymbol{R}-\boldsymbol{a}_2}^\dagger + \boldsymbol{e}_{\alpha\boldsymbol{R}}\boldsymbol{e}_{\beta\boldsymbol{R}+\boldsymbol{a}_1}^\dagger\Big) \\ & -\frac{3\kappa}{m_\beta}\boldsymbol{e}_{\beta\boldsymbol{R}}\boldsymbol{e}_{\beta\boldsymbol{R}}^\dagger + \frac{\kappa}{\sqrt{m_\alpha m_\beta}}\Big(\boldsymbol{e}_{\beta\boldsymbol{R}}\boldsymbol{e}_{\alpha\boldsymbol{R}}^\dagger + \boldsymbol{e}_{\beta\boldsymbol{R}}\boldsymbol{e}_{\alpha\boldsymbol{R}-\boldsymbol{a}_1}^\dagger + \boldsymbol{e}_{\beta\boldsymbol{R}}\boldsymbol{e}_{\alpha\boldsymbol{R}+\boldsymbol{a}_2}^\dagger\Big)\Bigg) \end{aligned} \tag{7.1.152}$$

と表せることを示せ。

(2) 並進演算子 U_1，U_2 を

$$\begin{aligned} U_1 &= \sum_{\boldsymbol{R}} \Big(\boldsymbol{e}_{\alpha\boldsymbol{R}}\boldsymbol{e}_{\alpha\boldsymbol{R}+\boldsymbol{a}_1}^\dagger + \boldsymbol{e}_{\beta\boldsymbol{R}}\boldsymbol{e}_{\beta\boldsymbol{R}+\boldsymbol{a}_1}^\dagger\Big) \\ U_2 &= \sum_{\boldsymbol{R}} \Big(\boldsymbol{e}_{\alpha\boldsymbol{R}}\boldsymbol{e}_{\alpha\boldsymbol{R}+\boldsymbol{a}_2}^\dagger + \boldsymbol{e}_{\beta\boldsymbol{R}}\boldsymbol{e}_{\beta\boldsymbol{R}+\boldsymbol{a}_2}^\dagger\Big) \end{aligned} \tag{7.1.153}$$

によって定義する。U_1，U_2 はユニタリ行列であることを示せ。

(3) U_1，U_2 の固有値 (上段：U_1，下段：U_2)・固有ベクトル (U_1，U_2 に共通) は

$$\text{固有値：}\begin{cases} e^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{a}_1}\ (\text{重根}) \\ e^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{a}_2}\ (\text{重根}) \end{cases} \qquad \text{固有ベクトル：}\begin{cases} \boldsymbol{l}_{\alpha\boldsymbol{k}} = \frac{1}{\sqrt{N}}\sum_{\boldsymbol{R}} e^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{R}}\boldsymbol{e}_{\alpha\boldsymbol{R}} \\ \boldsymbol{l}_{\beta\boldsymbol{k}} = \frac{1}{\sqrt{N}}\sum_{\boldsymbol{R}} e^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{R}}\boldsymbol{e}_{\beta\boldsymbol{R}} \end{cases}$$

ここで，$\boldsymbol{k} = \dfrac{j_1}{N_1}\boldsymbol{b}_1 + \dfrac{j_2}{N_2}\boldsymbol{b}_2$ ($j_1 = 0, \cdots, N_1 - 1$, $j_2 = 0, \cdots, N_2 - 1$)
は波数ベクトル ($\boldsymbol{b}_1$, $\boldsymbol{b}_2$は逆格子ベクトル)

(7.1.154)

で与えられることを示せ。

(4) U_1，U_2，A について

$$[\,U_1, U_2\,] = O \qquad [\,U_1, A\,] = O \qquad [\,U_2, A\,] = O \tag{7.1.155}$$

が成り立つことを示せ。

(5) A の固有値 $\lambda_{\pm\boldsymbol{k}}$ および格子振動の振動数 $\omega_{\pm\boldsymbol{k}} = \sqrt{-\lambda_{\pm\boldsymbol{k}}}$ を求めよ。また，格子振動のスペクトルを図示せよ。ただし，波数ベクトル $\boldsymbol{k}$ は第 1 ブリルアンゾーンにとるものとし，経路を $\mathrm{K} \to \Gamma \to \mathrm{M} \to \mathrm{K}$ とせよ ($\boldsymbol{k}_{\mathrm{K}} = \frac{1}{3}\boldsymbol{b}_1 + \frac{1}{3}\boldsymbol{b}_2$, $\boldsymbol{k}_\Gamma = \boldsymbol{0}$，$\boldsymbol{k}_{\mathrm{M}} = \frac{1}{2}\boldsymbol{b}_2$)。

[解答]
(1)(7.1.150) より，$\ddot{\boldsymbol{\zeta}} = \sum_{\boldsymbol{R}}(\ddot{\zeta}_{\alpha\boldsymbol{R}}\boldsymbol{e}_{\alpha\boldsymbol{R}} + \ddot{\zeta}_{\beta\boldsymbol{R}}\boldsymbol{e}_{\beta\boldsymbol{R}}) = \sum_{\boldsymbol{R}}(\boldsymbol{e}_{\alpha\boldsymbol{R}}\ddot{\zeta}_{\alpha\boldsymbol{R}} + \boldsymbol{e}_{\beta\boldsymbol{R}}\ddot{\zeta}_{\beta\boldsymbol{R}}) = \sum_{\boldsymbol{R}}(\boldsymbol{e}_{\alpha\boldsymbol{R}}(-\frac{3\kappa}{m_\alpha}\zeta_{\alpha\boldsymbol{R}} + \frac{\kappa}{\sqrt{m_\alpha m_\beta}}(\zeta_{\beta\boldsymbol{R}} + \zeta_{\beta\boldsymbol{R}-\boldsymbol{a}_2} + \zeta_{\beta\boldsymbol{R}+\boldsymbol{a}_1})) + \boldsymbol{e}_{\beta\boldsymbol{R}}(-\frac{3\kappa}{m_\beta}\zeta_{\beta\boldsymbol{R}} + \frac{\kappa}{\sqrt{m_\alpha m_\beta}}(\zeta_{\alpha\boldsymbol{R}} + \zeta_{\alpha\boldsymbol{R}-\boldsymbol{a}_1} + \zeta_{\alpha\boldsymbol{R}+\boldsymbol{a}_2}))) = \sum_{\boldsymbol{R}}(\boldsymbol{e}_{\alpha\boldsymbol{R}}(-\frac{3\kappa}{m_\alpha}\boldsymbol{e}^\dagger_{\alpha\boldsymbol{R}}\boldsymbol{\zeta} + \frac{\kappa}{\sqrt{m_\alpha m_\beta}}(\boldsymbol{e}^\dagger_{\beta\boldsymbol{R}}\boldsymbol{\zeta} + \boldsymbol{e}^\dagger_{\beta\boldsymbol{R}-\boldsymbol{a}_2}\boldsymbol{\zeta} + \boldsymbol{e}^\dagger_{\beta\boldsymbol{R}+\boldsymbol{a}_1}\boldsymbol{\zeta})) + \boldsymbol{e}_{\beta\boldsymbol{R}}(-\frac{3\kappa}{m_\beta}\boldsymbol{e}^\dagger_{\beta\boldsymbol{R}}\boldsymbol{\zeta} + \frac{\kappa}{\sqrt{m_\alpha m_\beta}}(\boldsymbol{e}^\dagger_{\alpha\boldsymbol{R}}\boldsymbol{\zeta} + \boldsymbol{e}^\dagger_{\alpha\boldsymbol{R}-\boldsymbol{a}_1}\boldsymbol{\zeta} + \boldsymbol{e}^\dagger_{\alpha\boldsymbol{R}+\boldsymbol{a}_2}\boldsymbol{\zeta}))) = \sum_{\boldsymbol{R}}(-\frac{3\kappa}{m_\alpha}\boldsymbol{e}_{\alpha\boldsymbol{R}}\boldsymbol{e}^\dagger_{\alpha\boldsymbol{R}} + \frac{\kappa}{\sqrt{m_\alpha m_\beta}}(\boldsymbol{e}_{\alpha\boldsymbol{R}}\boldsymbol{e}^\dagger_{\beta\boldsymbol{R}} + \boldsymbol{e}_{\alpha\boldsymbol{R}}\boldsymbol{e}^\dagger_{\beta\boldsymbol{R}-\boldsymbol{a}_2} + \boldsymbol{e}_{\alpha\boldsymbol{R}}\boldsymbol{e}^\dagger_{\beta\boldsymbol{R}+\boldsymbol{a}_1}) - \frac{3\kappa}{m_\beta}\boldsymbol{e}_{\beta\boldsymbol{R}}\boldsymbol{e}^\dagger_{\beta\boldsymbol{R}} + \frac{\kappa}{\sqrt{m_\alpha m_\beta}}(\boldsymbol{e}_{\beta\boldsymbol{R}}\boldsymbol{e}^\dagger_{\alpha\boldsymbol{R}} + \boldsymbol{e}_{\beta\boldsymbol{R}}\boldsymbol{e}^\dagger_{\alpha\boldsymbol{R}-\boldsymbol{a}_1} + \boldsymbol{e}_{\beta\boldsymbol{R}}\boldsymbol{e}^\dagger_{\alpha\boldsymbol{R}+\boldsymbol{a}_2}))\boldsymbol{\zeta}$ となる。したがって，(7.1.152) が示された。
(2)$i = 1, 2$ として，$U_i^\dagger = \sum_{\boldsymbol{R}}(\boldsymbol{e}_{\alpha\boldsymbol{R}+\boldsymbol{a}_i}\boldsymbol{e}^\dagger_{\alpha\boldsymbol{R}} + \boldsymbol{e}_{\beta\boldsymbol{R}+\boldsymbol{a}_i}\boldsymbol{e}^\dagger_{\beta\boldsymbol{R}})$ より，$U_iU_i^\dagger = \sum_{\boldsymbol{R}}\sum_{\boldsymbol{R}'}(\boldsymbol{e}_{\alpha\boldsymbol{R}}\boldsymbol{e}^\dagger_{\alpha\boldsymbol{R}+\boldsymbol{a}_i} + \boldsymbol{e}_{\beta\boldsymbol{R}}\boldsymbol{e}^\dagger_{\beta\boldsymbol{R}+\boldsymbol{a}_i})(\boldsymbol{e}_{\alpha\boldsymbol{R}'+\boldsymbol{a}_i}\boldsymbol{e}^\dagger_{\alpha\boldsymbol{R}'} + \boldsymbol{e}_{\beta\boldsymbol{R}'+\boldsymbol{a}_i}\boldsymbol{e}^\dagger_{\beta\boldsymbol{R}'}) = \sum_{\boldsymbol{R}}(\boldsymbol{e}_{\alpha\boldsymbol{R}}\boldsymbol{e}^\dagger_{\alpha\boldsymbol{R}} + \boldsymbol{e}_{\beta\boldsymbol{R}}\boldsymbol{e}^\dagger_{\beta\boldsymbol{R}}) = I$ となる。同様に $U_i^\dagger U_i = I$ も示せる。したがって，$U_i^\dagger = U_i^{-1}$，つまり，U_i はユニタリ行列である。
(3)U_1，U_2 は補足・計算例 32 で扱った巡回演算子 $\hat{C}^\dagger$ に対応するから，原子 α の副格子と原子 β の副格子のそれぞれについて (3.3.79) の $\hat{C}^\dagger$ の固有値・固有ベクトルを適用することにより，(7.1.154) を得る。
(4)(2) と同様に計算すると，$U_1U_2 = \sum_{\boldsymbol{R}}(\boldsymbol{e}_{\alpha\boldsymbol{R}}\boldsymbol{e}^\dagger_{\alpha\boldsymbol{R}+\boldsymbol{a}_1+\boldsymbol{a}_2} + \boldsymbol{e}_{\beta\boldsymbol{R}}\boldsymbol{e}^\dagger_{\beta\boldsymbol{R}+\boldsymbol{a}_1+\boldsymbol{a}_2})$，$U_2U_1 = \sum_{\boldsymbol{R}}(\boldsymbol{e}_{\alpha\boldsymbol{R}}\boldsymbol{e}^\dagger_{\alpha\boldsymbol{R}+\boldsymbol{a}_1+\boldsymbol{a}_2} + \boldsymbol{e}_{\beta\boldsymbol{R}}\boldsymbol{e}^\dagger_{\beta\boldsymbol{R}+\boldsymbol{a}_1+\boldsymbol{a}_2})$ となるから，$U_1U_2 = U_2U_1$ である。また，

$i=1,2$ として，$U_i \boldsymbol{e}_{\tau \boldsymbol{R}} \boldsymbol{e}^{\dagger}_{\tau' \boldsymbol{R}'} U_i^{\dagger} = \boldsymbol{e}_{\tau \boldsymbol{R}-\boldsymbol{a}_i} \boldsymbol{e}^{\dagger}_{\tau' \boldsymbol{R}'-\boldsymbol{a}_i}$ $(\tau, \tau' = \alpha, \beta)$ と書ける。以上より，(7.1.155) は明らかに成り立つ。
(5)U_1，U_2，A は互いに可換であるから，同時対角化可能である。U_1，U_2 の固有値 $e^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{a}_1}$，$e^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{a}_2}$ は重根であるから，2 次元の部分空間 $W_{\boldsymbol{k}} = \mathrm{span}(\boldsymbol{l}_{\alpha\boldsymbol{k}}, \boldsymbol{l}_{\beta\boldsymbol{k}})$ における A の固有値問題を解けばよい。(7.1.152) を $\boldsymbol{l}_{\alpha\boldsymbol{k}}$，$\boldsymbol{l}_{\beta\boldsymbol{k}}$ に作用させると

$$\begin{cases} A\boldsymbol{l}_{\alpha\boldsymbol{k}} = -\frac{3\kappa}{m_\alpha}\boldsymbol{l}_{\alpha\boldsymbol{k}} + \Delta^*_{\boldsymbol{k}}\boldsymbol{l}_{\beta\boldsymbol{k}} \\ A\boldsymbol{l}_{\beta\boldsymbol{k}} = \Delta_{\boldsymbol{k}}\boldsymbol{l}_{\alpha\boldsymbol{k}} - \frac{3\kappa}{m_\beta}\boldsymbol{l}_{\beta\boldsymbol{k}} \end{cases} \tag{7.1.156}$$

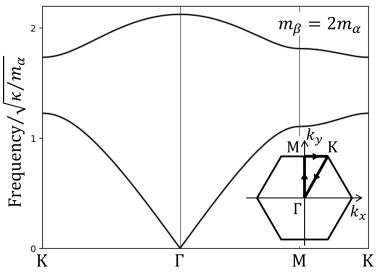
となる。ここで，$\Delta_{\boldsymbol{k}} = \frac{\kappa}{\sqrt{m_\alpha m_\beta}}(1 + e^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{a}_1} + e^{-i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{a}_2})$ とおいた。したがって，$W_{\boldsymbol{k}}$ における正規直交基底 $\{\boldsymbol{l}_{\alpha\boldsymbol{k}}, \boldsymbol{l}_{\beta\boldsymbol{k}}\}$ による A の行列表現 $A_{\boldsymbol{k}}$ は

$$A_{\boldsymbol{k}} = \begin{bmatrix} -\frac{3\kappa}{m_\alpha} & \Delta_{\boldsymbol{k}} \\ \Delta^*_{\boldsymbol{k}} & -\frac{3\kappa}{m_\beta} \end{bmatrix} \tag{7.1.157}$$

となる。$A_{\boldsymbol{k}}$ の固有値は $\lambda_{\pm\boldsymbol{k}} = -(\frac{3\kappa}{2}(\frac{1}{m_\alpha} + \frac{1}{m_\beta}) \pm \sqrt{(\frac{3\kappa}{2}(\frac{1}{m_\alpha} - \frac{1}{m_\beta}))^2 + |\Delta_{\boldsymbol{k}}|^2})$ である。ここで，$|\Delta_{\boldsymbol{k}}|^2 = \frac{\kappa^2}{m_\alpha m_\beta}(3 + 2\cos\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{a}_1 + 2\cos\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{a}_2 + 2\cos\boldsymbol{k}\cdot(\boldsymbol{a}_1 + \boldsymbol{a}_2))$ である。したがって，格子振動の振動数 $\omega_{\pm\boldsymbol{k}} = \sqrt{-\lambda_{\pm\boldsymbol{k}}}$ は

$$\omega_{\pm\boldsymbol{k}} = \sqrt{\frac{3\kappa}{2}\left(\frac{1}{m_\alpha} + \frac{1}{m_\beta}\right) \pm \sqrt{\left(\frac{3\kappa}{2}\left(\frac{1}{m_\alpha} - \frac{1}{m_\beta}\right)\right)^2 + |\Delta_{\boldsymbol{k}}|^2}} \tag{7.1.158}$$

となる。$m_\beta/m_\alpha = 2$ として格子振動のスペクトルを描くと図のようになる。



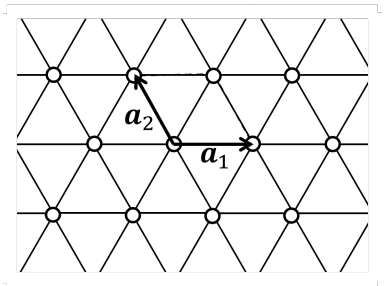
7.1.15　2 次元六方格子の面内格子振動 (単位胞に 1 原子の場合)

例題 15. 図のような 2 次元六方格子の面内格子振動を周期的境界条件の下で考える。単位胞は質量 m の原子 1 個からなり，単位胞の総数は N 個である。基本並進ベクトル $\boldsymbol{a}_1$，$\boldsymbol{a}_2$ 方向の単位胞の数を N_1，N_2 とすると $N = N_1 N_2$ である。隣接する原子はばね定数 κ のばねで連結されているとする。格子定数 a，格子ベクトル

$\boldsymbol{R} = n_1\boldsymbol{a}_1 + n_2\boldsymbol{a}_2\,(n_1 = 1, \cdots, N_1,\ n_2 = 1, \cdots, N_2)$ を用いると，この系のラグランジアン L は

$$
\begin{aligned}
L = &\sum_{\boldsymbol{R}} \frac{1}{2} m\left(\dot{x}_{\boldsymbol{R}}^2 + \dot{y}_{\boldsymbol{R}}^2\right) \\
&- \sum_{\boldsymbol{R}} \frac{1}{2}\kappa \left((x_{\boldsymbol{R}} - x_{\boldsymbol{R}+\boldsymbol{a}_1})^2 + \left(-\frac{1}{2}(x_{\boldsymbol{R}} - x_{\boldsymbol{R}+\boldsymbol{a}_2}) + \frac{\sqrt{3}}{2}(y_{\boldsymbol{R}} - y_{\boldsymbol{R}+\boldsymbol{a}_2}) \right)^2 \right. \\
&\qquad \left. + \left(\frac{1}{2}(x_{\boldsymbol{R}} - x_{\boldsymbol{R}+\boldsymbol{a}_1+\boldsymbol{a}_2}) + \frac{\sqrt{3}}{2}(y_{\boldsymbol{R}} - y_{\boldsymbol{R}+\boldsymbol{a}_1+\boldsymbol{a}_2}) \right)^2 \right)
\end{aligned}
\tag{7.1.159}
$$

である。ここで，$x_{\boldsymbol{R}} = x_{\boldsymbol{R}}(t)$，$y_{\boldsymbol{R}} = y_{\boldsymbol{R}}(t)$ は単位胞 $\boldsymbol{R}$ の原子の時刻 t における平衡位置からの変位の x 方向 ($\boldsymbol{a}_1$ に平行な右向きの方向) の成分，y 方向 ($\boldsymbol{a}_1$ に垂直な上向きの方向) の成分である。このとき，原子の運動は連立微分方程式



$$
\begin{cases}
m\ddot{x}_{\boldsymbol{R}} = \frac{\kappa}{4}(-12x_{\boldsymbol{R}} + 4x_{\boldsymbol{R}-\boldsymbol{a}_1} + 4x_{\boldsymbol{R}+\boldsymbol{a}_1} + x_{\boldsymbol{R}-\boldsymbol{a}_2} + x_{\boldsymbol{R}+\boldsymbol{a}_2} + x_{\boldsymbol{R}-\boldsymbol{a}_1-\boldsymbol{a}_2} + x_{\boldsymbol{R}+\boldsymbol{a}_1+\boldsymbol{a}_2} \\
\qquad\qquad -\sqrt{3}y_{\boldsymbol{R}-\boldsymbol{a}_2} - \sqrt{3}y_{\boldsymbol{R}+\boldsymbol{a}_2} + \sqrt{3}y_{\boldsymbol{R}-\boldsymbol{a}_1-\boldsymbol{a}_2} + \sqrt{3}y_{\boldsymbol{R}+\boldsymbol{a}_1+\boldsymbol{a}_2}) \\
m\ddot{y}_{\boldsymbol{R}} = \frac{\kappa}{4}(-12y_{\boldsymbol{R}} + 3y_{\boldsymbol{R}-\boldsymbol{a}_2} + 3y_{\boldsymbol{R}+\boldsymbol{a}_2} + 3y_{\boldsymbol{R}-\boldsymbol{a}_1-\boldsymbol{a}_2} + 3y_{\boldsymbol{R}+\boldsymbol{a}_1+\boldsymbol{a}_2} \\
\qquad\qquad -\sqrt{3}x_{\boldsymbol{R}-\boldsymbol{a}_2} - \sqrt{3}x_{\boldsymbol{R}+\boldsymbol{a}_2} + \sqrt{3}x_{\boldsymbol{R}-\boldsymbol{a}_1-\boldsymbol{a}_2} + \sqrt{3}x_{\boldsymbol{R}+\boldsymbol{a}_1+\boldsymbol{a}_2})
\end{cases}
\tag{7.1.160}
$$

によって記述される。あるいは，(7.1.160) は $2N$ 次元列ベクトル $\boldsymbol{r}$ と $2N$ 次エルミート行列 A を用いて

$$
\ddot{\boldsymbol{r}} = A\boldsymbol{r} \qquad \boldsymbol{r} = \sum_{\boldsymbol{R}} (x_{\boldsymbol{R}}\boldsymbol{e}_{x\boldsymbol{R}} + y_{\boldsymbol{R}}\boldsymbol{e}_{y\boldsymbol{R}}) \qquad x_{\boldsymbol{R}} = \boldsymbol{e}_{x\boldsymbol{R}}^{\dagger}\boldsymbol{r} \qquad y_{\boldsymbol{R}} = \boldsymbol{e}_{y\boldsymbol{R}}^{\dagger}\boldsymbol{r}
\tag{7.1.161}
$$

と表せる。ここで，$\{\boldsymbol{e}_{x\boldsymbol{R}}, \boldsymbol{e}_{y\boldsymbol{R}} \,|\, \boldsymbol{R}$ はすべての格子ベクトル$\}$ は $2N$ 次元列ベクトル空間の標準基底である。以下の問いに答えよ。

(1) A は

$$
\begin{aligned}
A = \textstyle\sum_{\boldsymbol{R}} \frac{\kappa}{4m}(&-12\boldsymbol{e}_{x\boldsymbol{R}}\boldsymbol{e}^{\dagger}_{x\boldsymbol{R}} + 4\boldsymbol{e}_{x\boldsymbol{R}}\boldsymbol{e}^{\dagger}_{x\boldsymbol{R}-\boldsymbol{a}_1} + 4\boldsymbol{e}_{x\boldsymbol{R}}\boldsymbol{e}^{\dagger}_{x\boldsymbol{R}+\boldsymbol{a}_1} \\
&+ \boldsymbol{e}_{x\boldsymbol{R}}\boldsymbol{e}^{\dagger}_{x\boldsymbol{R}-\boldsymbol{a}_2} + \boldsymbol{e}_{x\boldsymbol{R}}\boldsymbol{e}^{\dagger}_{x\boldsymbol{R}+\boldsymbol{a}_2} \\
&+ \boldsymbol{e}_{x\boldsymbol{R}}\boldsymbol{e}^{\dagger}_{x\boldsymbol{R}-\boldsymbol{a}_1-\boldsymbol{a}_2} + \boldsymbol{e}_{x\boldsymbol{R}}\boldsymbol{e}^{\dagger}_{x\boldsymbol{R}+\boldsymbol{a}_1+\boldsymbol{a}_2} \\
&- \sqrt{3}\boldsymbol{e}_{x\boldsymbol{R}}\boldsymbol{e}^{\dagger}_{y\boldsymbol{R}-\boldsymbol{a}_2} - \sqrt{3}\boldsymbol{e}_{x\boldsymbol{R}}\boldsymbol{e}^{\dagger}_{y\boldsymbol{R}+\boldsymbol{a}_2} \\
&+ \sqrt{3}\boldsymbol{e}_{x\boldsymbol{R}}\boldsymbol{e}^{\dagger}_{y\boldsymbol{R}-\boldsymbol{a}_1-\boldsymbol{a}_2} + \sqrt{3}\boldsymbol{e}_{x\boldsymbol{R}}\boldsymbol{e}^{\dagger}_{y\boldsymbol{R}+\boldsymbol{a}_1+\boldsymbol{a}_2} \\
&-12\boldsymbol{e}_{y\boldsymbol{R}}\boldsymbol{e}^{\dagger}_{y\boldsymbol{R}} + 3\boldsymbol{e}_{y\boldsymbol{R}}\boldsymbol{e}^{\dagger}_{y\boldsymbol{R}-\boldsymbol{a}_2} + 3\boldsymbol{e}_{y\boldsymbol{R}}\boldsymbol{e}^{\dagger}_{y\boldsymbol{R}+\boldsymbol{a}_2} \\
&+ 3\boldsymbol{e}_{y\boldsymbol{R}}\boldsymbol{e}^{\dagger}_{y\boldsymbol{R}-\boldsymbol{a}_1-\boldsymbol{a}_2} + 3\boldsymbol{e}_{y\boldsymbol{R}}\boldsymbol{e}^{\dagger}_{y\boldsymbol{R}+\boldsymbol{a}_1+\boldsymbol{a}_2} \\
&- \sqrt{3}\boldsymbol{e}_{y\boldsymbol{R}}\boldsymbol{e}^{\dagger}_{x\boldsymbol{R}-\boldsymbol{a}_2} - \sqrt{3}\boldsymbol{e}_{y\boldsymbol{R}}\boldsymbol{e}^{\dagger}_{x\boldsymbol{R}+\boldsymbol{a}_2} \\
&+ \sqrt{3}\boldsymbol{e}_{y\boldsymbol{R}}\boldsymbol{e}^{\dagger}_{x\boldsymbol{R}-\boldsymbol{a}_1-\boldsymbol{a}_2} + \sqrt{3}\boldsymbol{e}_{y\boldsymbol{R}}\boldsymbol{e}^{\dagger}_{x\boldsymbol{R}+\boldsymbol{a}_1+\boldsymbol{a}_2})
\end{aligned}
\tag{7.1.162}
$$

と表せることを示せ。

(2) 並進演算子 U_1，U_2 を

$$
\begin{aligned}
U_1 &= \sum_{\boldsymbol{R}} \left(\boldsymbol{e}_{x\boldsymbol{R}}\boldsymbol{e}^{\dagger}_{x\boldsymbol{R}+\boldsymbol{a}_1} + \boldsymbol{e}_{y\boldsymbol{R}}\boldsymbol{e}^{\dagger}_{y\boldsymbol{R}+\boldsymbol{a}_1} \right) \\
U_2 &= \sum_{\boldsymbol{R}} \left(\boldsymbol{e}_{x\boldsymbol{R}}\boldsymbol{e}^{\dagger}_{x\boldsymbol{R}+\boldsymbol{a}_2} + \boldsymbol{e}_{y\boldsymbol{R}}\boldsymbol{e}^{\dagger}_{y\boldsymbol{R}+\boldsymbol{a}_2} \right)
\end{aligned}
\tag{7.1.163}
$$

によって定義する。U_1，U_2 はユニタリ行列であることを示せ。

(3) U_1，U_2 の固有値 (上段：U_1，下段：U_2)・固有ベクトル (U_1，U_2 に共通) は

固有値：$\begin{cases} e^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{a}_1} \text{ (重根)} \\ e^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{a}_2} \text{ (重根)} \end{cases}$　　固有ベクトル：$\begin{cases} \boldsymbol{l}_{x\boldsymbol{k}} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\boldsymbol{R}} e^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{R}} \boldsymbol{e}_{x\boldsymbol{R}} \\ \boldsymbol{l}_{y\boldsymbol{k}} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\boldsymbol{R}} e^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{R}} \boldsymbol{e}_{y\boldsymbol{R}} \end{cases}$

ここで, $\boldsymbol{k} = \dfrac{j_1}{N_1}\boldsymbol{b}_1 + \dfrac{j_2}{N_2}\boldsymbol{b}_2$ ($j_1 = 0, \cdots, N_1 - 1$, $j_2 = 0, \cdots, N_2 - 1$)
は波数ベクトル ($\boldsymbol{b}_1$, $\boldsymbol{b}_2$は逆格子ベクトル)

(7.1.164)

で与えられることを示せ。

(4) U_1，U_2，A について

$$
[\,U_1, U_2\,] = O \qquad [\,U_1, A\,] = O \qquad [\,U_2, A\,] = O \tag{7.1.165}
$$

が成り立つことを示せ。

(5) A の固有値 $\lambda_{\pm\boldsymbol{k}}$ および格子振動の振動数 $\omega_{\pm\boldsymbol{k}} = \sqrt{-\lambda_{\pm\boldsymbol{k}}}$ を求めよ。また，格子振動のスペクトルを図示せよ。ただし，波数ベクトル $\boldsymbol{k}$ は第 1 ブリルアンゾーンにとるものとし，経路を $\mathrm{K} \to \Gamma \to \mathrm{M} \to \mathrm{K}$ とせよ ($\boldsymbol{k}_{\mathrm{K}} = \frac{1}{3}\boldsymbol{b}_1 + \frac{1}{3}\boldsymbol{b}_2$, $\boldsymbol{k}_\Gamma = \boldsymbol{0}$，$\boldsymbol{k}_{\mathrm{M}} = \frac{1}{2}\boldsymbol{b}_2$)。

[解答]

(1)$\ddot{\boldsymbol{r}} = \sum_{\boldsymbol{R}}(\ddot{x}_{\boldsymbol{R}}\boldsymbol{e}_{x\boldsymbol{R}} + \ddot{y}_{\boldsymbol{R}}\boldsymbol{e}_{y\boldsymbol{R}}) = \sum_{\boldsymbol{R}}(\boldsymbol{e}_{x\boldsymbol{R}}\ddot{x}_{\boldsymbol{R}} + \boldsymbol{e}_{y\boldsymbol{R}}\ddot{y}_{\boldsymbol{R}})$ と書いて $\ddot{x}_{\boldsymbol{R}}$，$\ddot{y}_{\boldsymbol{R}}$ を (7.1.160) により $x_{\boldsymbol{R}}$, $y_{\boldsymbol{R}}$ などで表して，さらに，$x_{\boldsymbol{R}} = \boldsymbol{e}^\dagger_{x\boldsymbol{R}}\boldsymbol{r}$, $y_{\boldsymbol{R}} = \boldsymbol{e}^\dagger_{y\boldsymbol{R}}\boldsymbol{r}$ を用いると，(7.1.162) を示せる。

(2)$i = 1, 2$ として，$U_i^\dagger = \sum_{\boldsymbol{R}}(\boldsymbol{e}_{x\boldsymbol{R}+\boldsymbol{a}_i}\boldsymbol{e}^\dagger_{x\boldsymbol{R}} + \boldsymbol{e}_{y\boldsymbol{R}+\boldsymbol{a}_i}\boldsymbol{e}^\dagger_{y\boldsymbol{R}})$ より，$U_iU_i^\dagger = \sum_{\boldsymbol{R}}\sum_{\boldsymbol{R}'}(\boldsymbol{e}_{x\boldsymbol{R}}\boldsymbol{e}^\dagger_{x\boldsymbol{R}+\boldsymbol{a}_i} + \boldsymbol{e}_{y\boldsymbol{R}}\boldsymbol{e}^\dagger_{y\boldsymbol{R}+\boldsymbol{a}_i})(\boldsymbol{e}_{x\boldsymbol{R}'+\boldsymbol{a}_i}\boldsymbol{e}^\dagger_{x\boldsymbol{R}'} + \boldsymbol{e}_{y\boldsymbol{R}'+\boldsymbol{a}_i}\boldsymbol{e}^\dagger_{y\boldsymbol{R}'}) = \sum_{\boldsymbol{R}}(\boldsymbol{e}_{x\boldsymbol{R}}\boldsymbol{e}^\dagger_{x\boldsymbol{R}} + \boldsymbol{e}_{y\boldsymbol{R}}\boldsymbol{e}^\dagger_{y\boldsymbol{R}}) = I$ となる。同様に $U_i^\dagger U_i = I$ も示せる。したがって，$U_i^\dagger = U_i^{-1}$，つまり，U_i はユニタリ行列である。

(3)U_1，U_2 は補足・計算例 32 で扱った巡回演算子 $\hat{C}^\dagger$ に対応するから，原子変位の x 成分と y 成分のそれぞれについて (3.3.79) の $\hat{C}^\dagger$ の固有値・固有ベクトルを適用することにより，(7.1.164) を得る。

(4)(2) と同様に計算すると，$U_1U_2 = \sum_{\boldsymbol{R}}(\boldsymbol{e}_{x\boldsymbol{R}}\boldsymbol{e}^\dagger_{x\boldsymbol{R}+\boldsymbol{a}_1+\boldsymbol{a}_2} + \boldsymbol{e}_{y\boldsymbol{R}}\boldsymbol{e}^\dagger_{y\boldsymbol{R}+\boldsymbol{a}_1+\boldsymbol{a}_2})$，$U_2U_1 = \sum_{\boldsymbol{R}}(\boldsymbol{e}_{x\boldsymbol{R}}\boldsymbol{e}^\dagger_{x\boldsymbol{R}+\boldsymbol{a}_1+\boldsymbol{a}_2} + \boldsymbol{e}_{y\boldsymbol{R}}\boldsymbol{e}^\dagger_{y\boldsymbol{R}+\boldsymbol{a}_1+\boldsymbol{a}_2})$ となるから，$U_1U_2 = U_2U_1$ である。また，$i = 1, 2$ として，$U_i\boldsymbol{e}_{\tau\boldsymbol{R}}\boldsymbol{e}^\dagger_{\tau'\boldsymbol{R}'}U_i^\dagger = \boldsymbol{e}_{\tau\boldsymbol{R}-\boldsymbol{a}_i}\boldsymbol{e}^\dagger_{\tau'\boldsymbol{R}'-\boldsymbol{a}_i}$ $(\tau, \tau' = x, y)$ と書ける。以上より，(7.1.165) は明らかに成り立つ。

(5)U_1，U_2，A は互いに可換であるから，同時対角化可能である。U_1，U_2 の固有値 $e^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{a}_1}$，$e^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{a}_2}$ は重根であるから，2 次元の部分空間 $W_{\boldsymbol{k}} = \mathrm{span}(\boldsymbol{l}_{x\boldsymbol{k}}, \boldsymbol{l}_{y\boldsymbol{k}})$ における A の固有値問題を解けばよい。(7.1.162) を $\boldsymbol{l}_{x\boldsymbol{k}}$，$\boldsymbol{l}_{y\boldsymbol{k}}$ に作用させると

$$\begin{cases} A\boldsymbol{l}_{x\boldsymbol{k}} = \alpha_{\boldsymbol{k}}\boldsymbol{l}_{x\boldsymbol{k}} + \gamma_{\boldsymbol{k}}\boldsymbol{l}_{y\boldsymbol{k}} \\ A\boldsymbol{l}_{y\boldsymbol{k}} = \gamma_{\boldsymbol{k}}\boldsymbol{l}_{x\boldsymbol{k}} + \beta_{\boldsymbol{k}}\boldsymbol{l}_{y\boldsymbol{k}} \end{cases}$$
$$\begin{aligned} \alpha_{\boldsymbol{k}} &= -\frac{3\kappa}{m} + \frac{2\kappa}{m}\cos\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{a}_1 + \frac{\kappa}{2m}(\cos\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{a}_2 + \cos\boldsymbol{k}\cdot(\boldsymbol{a}_1 + \boldsymbol{a}_2)) \\ \beta_{\boldsymbol{k}} &= -\frac{3\kappa}{m} + \frac{3\kappa}{2m}(\cos\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{a}_2 + \cos\boldsymbol{k}\cdot(\boldsymbol{a}_1 + \boldsymbol{a}_2)) \\ \gamma_{\boldsymbol{k}} &= -\frac{\sqrt{3}\kappa}{2m}(\cos\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{a}_2 - \cos\boldsymbol{k}\cdot(\boldsymbol{a}_1 + \boldsymbol{a}_2)) \end{aligned} \tag{7.1.166}$$

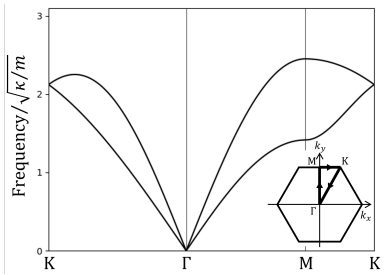
となる。したがって，$W_{\boldsymbol{k}}$ における正規直交基底 $\{\boldsymbol{l}_{x\boldsymbol{k}}, \boldsymbol{l}_{y\boldsymbol{k}}\}$ による A の行列表現 $A_{\boldsymbol{k}}$ は

$$A_{\boldsymbol{k}} = \begin{bmatrix} \alpha_{\boldsymbol{k}} & \gamma_{\boldsymbol{k}} \\ \gamma_{\boldsymbol{k}} & \beta_{\boldsymbol{k}} \end{bmatrix} \tag{7.1.167}$$

となる。$A_{\boldsymbol{k}}$ の固有値は $\lambda_{\pm\boldsymbol{k}} = \frac{1}{2}(\alpha_{\boldsymbol{k}} + \beta_{\boldsymbol{k}}) \mp \sqrt{(\frac{1}{2}(\alpha_{\boldsymbol{k}} - \beta_{\boldsymbol{k}}))^2 + \gamma_{\boldsymbol{k}}^2}$ である。したがって，格子振動の振動数 $\omega_{\pm\boldsymbol{k}} = \sqrt{-\lambda_{\pm\boldsymbol{k}}}$ は

$$\omega_{\pm\boldsymbol{k}} = \sqrt{-\frac{1}{2}(\alpha_{\boldsymbol{k}} + \beta_{\boldsymbol{k}}) \pm \sqrt{\left(\frac{1}{2}(\alpha_{\boldsymbol{k}} - \beta_{\boldsymbol{k}})\right)^2 + \gamma_{\boldsymbol{k}}^2}} \tag{7.1.168}$$

となる。格子振動のスペクトルは図のようになる。

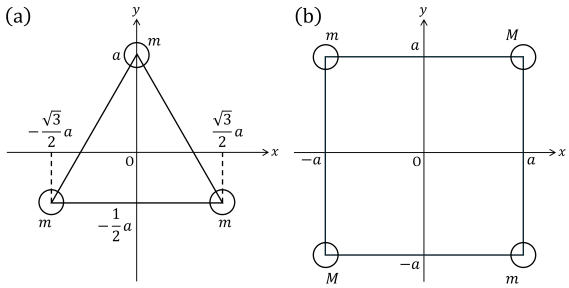


7.1.16　剛体の慣性テンソル

例題 16. N 個の粒子からなる剛体の慣性テンソル $\mathscr{I}$ は

$$\begin{aligned}\mathscr{I} &= \sum_{i=1}^{N} m_i \begin{bmatrix} y_i^2 + z_i^2 & -x_i y_i & -z_i x_i \\ -x_i y_i & z_i^2 + x_i^2 & -y_i z_i \\ -z_i x_i & -y_i z_i & x_i^2 + y_i^2 \end{bmatrix} \\ &= \sum_{i=1}^{N} m_i \Big(r_i^2 I_3 - \boldsymbol{r}_i \boldsymbol{r}_i^\dagger \Big) = \sum_{i=1}^{N} m_i r_i^2 \Big(I_3 - \boldsymbol{e}_i \boldsymbol{e}_i^\dagger \Big)\end{aligned} \tag{7.1.169}$$

によって定義される。ここで，m_i および x_i，y_i，z_i は i 番目の粒子の質量および位置の x 座標，y 座標，z 座標である。また，x 軸，y 軸，z 軸の正の向きを向く単位ベクトルを $\boldsymbol{e}_x$, $\boldsymbol{e}_y$, $\boldsymbol{e}_z$ として，$\boldsymbol{r}_i = x_i\,\boldsymbol{e}_x + y_i\,\boldsymbol{e}_y + z_i\,\boldsymbol{e}_z$, $r_i = |\boldsymbol{r}_i| = \sqrt{x_i^2 + y_i^2 + z_i^2}$，$\boldsymbol{e}_i = \boldsymbol{r}_i / r_i$ である。以下の問いに答えよ。



(1) 図の (a) に示すような正三角形の頂点に配置された質量 m の 3 個の粒子からなる剛体の慣性テンソル $\mathscr{I}$ を求めよ。また，その固有値・固有ベクトルを求めよ。

(2) 図の (b) に示すような正方形の頂点に配置された質量 M，m の計 4 個の粒子からなる剛体の慣性テンソル $\mathscr{I}$ を求めよ。また，その固有値・固有ベクトルを求めよ。

[解答]
(1)(7.1.169) より，

$$\begin{aligned}\mathscr{I} &= m\begin{bmatrix} a^2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & a^2 \end{bmatrix} + m\begin{bmatrix} a^2/4 & \sqrt{3}a^2/4 & 0 \\ \sqrt{3}a^2/4 & 3a^2/4 & 0 \\ 0 & 0 & a^2 \end{bmatrix} + m\begin{bmatrix} a^2/4 & -\sqrt{3}a^2/4 & 0 \\ -\sqrt{3}a^2/4 & 3a^2/4 & 0 \\ 0 & 0 & a^2 \end{bmatrix} \\ &= \begin{bmatrix} 3ma^2/2 & 0 & 0 \\ 0 & 3ma^2/2 & 0 \\ 0 & 0 & 3ma^2 \end{bmatrix}\end{aligned} \tag{7.1.170}$$

である。したがって，$\mathscr{I}$ の固有値・固有ベクトルは

$$\begin{cases} \text{固有値：}\frac{3}{2}ma^2\ (\text{重根}) & \text{固有ベクトル：}\boldsymbol{e}_x,\ \boldsymbol{e}_y \\ \text{固有値：}3ma^2 & \text{固有ベクトル：}\boldsymbol{e}_z \end{cases} \tag{7.1.171}$$

である。ただし，固有値 $\frac{3}{2}ma^2$ は重根であるから，その固有ベクトルは xy 平面上の互いに直交する 2 つの単位ベクトルであれば上記以外のものを選んでもよい。
(2)(7.1.169) より，

$$\begin{aligned}\mathscr{I} &= m\begin{bmatrix} a^2 & a^2 & 0 \\ a^2 & a^2 & 0 \\ 0 & 0 & 2a^2 \end{bmatrix} + m\begin{bmatrix} a^2 & a^2 & 0 \\ a^2 & a^2 & 0 \\ 0 & 0 & 2a^2 \end{bmatrix} + M\begin{bmatrix} a^2 & -a^2 & 0 \\ -a^2 & a^2 & 0 \\ 0 & 0 & 2a^2 \end{bmatrix} + M\begin{bmatrix} a^2 & -a^2 & 0 \\ -a^2 & a^2 & 0 \\ 0 & 0 & 2a^2 \end{bmatrix} \\ &= \begin{bmatrix} 2(m+M)a^2 & 2(m-M)a^2 & 0 \\ 2(m-M)a^2 & 2(m+M)a^2 & 0 \\ 0 & 0 & 4(m+M)a^2 \end{bmatrix}\end{aligned} \tag{7.1.172}$$

である。したがって，$\mathscr{I}$ の固有値・固有ベクトルは

$$\begin{cases} \text{固有値：}4ma^2 & \text{固有ベクトル：}\frac{1}{\sqrt{2}}\boldsymbol{e}_x + \frac{1}{\sqrt{2}}\boldsymbol{e}_y \\ \text{固有値：}4Ma^2 & \text{固有ベクトル：}-\frac{1}{\sqrt{2}}\boldsymbol{e}_x + \frac{1}{\sqrt{2}}\boldsymbol{e}_y \\ \text{固有値：}4(m+M)a^2 & \text{固有ベクトル：}\boldsymbol{e}_z \end{cases} \tag{7.1.173}$$

である。ただし，$m = M$ のときは固有値 $4ma^2$ と $4Ma^2$ は重根となるから，$\boldsymbol{p}_1$，$\boldsymbol{p}_2$ は xy 平面上の互いに直交する 2 つの単位ベクトルであれば上記以外のものを選んでもよい。

7.1.17　剛体の自由回転

例題 17. 主慣性モーメント (慣性テンソルの固有値)I_1，I_2，I_3 をもつ剛体の自由回転は，これらに対応する慣性主軸 (慣性テンソルの固有ベクトルに対応する軸) を用いることにより，オイラーの運動方程式

$$\begin{cases} I_1\dot{\omega}_1 = (I_2 - I_3)\omega_2\omega_3 \\ I_2\dot{\omega}_2 = (I_3 - I_1)\omega_3\omega_1 \\ I_3\dot{\omega}_3 = (I_1 - I_2)\omega_1\omega_2 \end{cases} \tag{7.1.174}$$

によって記述される。ここで，I_1，I_2，I_3 に対応する固有ベクトルを $\boldsymbol{e}_1$，$\boldsymbol{e}_2$，$\boldsymbol{e}_3$ とすると，ω_1，ω_2，ω_3 は剛体の角速度ベクトルの $\boldsymbol{e}_1$ 成分，$\boldsymbol{e}_2$ 成分，$\boldsymbol{e}_3$ 成分である。以下の問いに答えよ。

(1) $I_1 = I_2$ のとき，(7.1.174) の一般解を求めよ。

(2) 時間的に一定な角速度ベクトル $(\omega_1, 0, 0)$，$(0, \omega_2, 0)$，$(0, 0, \omega_3)$ の回転運動は (7.1.174) の定常解である。$I_1 < I_2 < I_3$ として角速度ベクトルの各成分が以下の (a)，(b)，(c) の場合を考えることにより，定常解 $(\omega_1, 0, 0)$，$(0, \omega_2, 0)$，$(0, 0, \omega_3)$ の安定性について調べよ[3]。

(a)$|\omega_1| \gg |\omega_2|, |\omega_3|$　　(b)$|\omega_2| \gg |\omega_1|, |\omega_3|$　　(c)$|\omega_3| \gg |\omega_1|, |\omega_2|$

[解答]

(1)$I_1 = I_2$ のとき，(7.1.174) の第 3 式より $\dot{\omega}_3 = 0$ であるから，ω_3 は定数となる。このとき，$\Omega = (I_3 - I_1)\omega_3/I_1$ とおくと，(7.1.174) は

$$\begin{cases} \dot{\omega}_1 = -\Omega\omega_2 \\ \dot{\omega}_2 = \Omega\omega_1 \end{cases} \quad \text{あるいは} \quad \dot{\boldsymbol{\omega}} = A\boldsymbol{\omega} \quad \text{ここで}, \boldsymbol{\omega} = \begin{bmatrix} \omega_1 \\ \omega_2 \end{bmatrix} \quad A = \begin{bmatrix} 0 & -\Omega \\ \Omega & 0 \end{bmatrix} \tag{7.1.175}$$

と表せる。A は歪エルミート行列であり，その固有値・固有ベクトルは

$$\begin{cases} \text{固有値：} \lambda_1 = i\Omega & \text{固有ベクトル：} \boldsymbol{p}_1 = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{bmatrix} 1 \\ -i \end{bmatrix} \\ \text{固有値：} \lambda_2 = -i\Omega & \text{固有ベクトル：} \boldsymbol{p}_2 = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{bmatrix} 1 \\ i \end{bmatrix} \end{cases} \tag{7.1.176}$$

[3] この結果は「テニスラケットの定理」として知られています。

である。$\{\boldsymbol{p}_1, \boldsymbol{p}_2\}$ は正規直交基底であるから，その双対基底は $\{\boldsymbol{p}_1^\dagger, \boldsymbol{p}_2^\dagger\}$ である。したがって，λ_1，λ_2，$\boldsymbol{p}_1$，$\boldsymbol{p}_2$ を用いると，A のスペクトル分解は

$$A = \lambda_1 \boldsymbol{p}_1 \boldsymbol{p}_1^\dagger + \lambda_2 \boldsymbol{p}_2 \boldsymbol{p}_2^\dagger \tag{7.1.177}$$

となる。$q_1 = \boldsymbol{p}_1^\dagger \boldsymbol{\omega}$，$q_2 = \boldsymbol{p}_2^\dagger \boldsymbol{\omega}$ とおくと，$\boldsymbol{\omega} = q_1 \boldsymbol{p}_1 + q_2 \boldsymbol{p}_2$ より $\dot{q}_1 = \lambda_1 q_1$，$\dot{q}_2 = \lambda_2 q_2$ となるから，$q_1(t) = q_1(0) e^{i\Omega t}$，$q_2(t) = q_2(0) e^{-i\Omega t}$ である。したがって，$\omega_1(t) = \frac{1}{\sqrt{2}}(q_1(t) + q_2(t))$，$\omega_2(t) = \frac{1}{\sqrt{2}i}(q_1(t) - q_2(t))$ より，

$$\begin{cases} \omega_1(t) = \omega_1(0) \cos \Omega t - \omega_2(0) \sin \Omega t \\ \omega_2(t) = \omega_1(0) \sin \Omega t + \omega_2(0) \cos \Omega t \end{cases} \tag{7.1.178}$$

を得る。
(2)(a)，(b)，(c) について調べると以下のようになる。
(a)$|\omega_1| \gg |\omega_2|, |\omega_3|$ が成り立つ時間領域では $\omega_1 =$ 一定 とみなせるから，(7.1.174) の第 2 式，第 3 式は

$$\begin{bmatrix} \dot{\omega}_2 \\ \dot{\omega}_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 & (I_3 - I_1)\omega_1 / I_2 \\ -(I_2 - I_1)\omega_1 / I_3 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \omega_2 \\ \omega_3 \end{bmatrix} \tag{7.1.179}$$

と近似できる。(7.1.179) の右辺の行列は純虚数の固有値 $\pm i \sqrt{\frac{(I_2 - I_1)(I_3 - I_1)}{I_2 I_3}} |\omega_1|$ をもつから，$\Omega = \sqrt{\frac{(I_2 - I_1)(I_3 - I_1)}{I_2 I_3}} |\omega_1|$ とおくと ω_2，ω_3 は $\cos \Omega t$ と $\sin \Omega t$ の線形結合によって表される周期解となる。したがって，定常解 $(\omega_1, 0, 0)$ は安定である。
(b)$|\omega_2| \gg |\omega_1|, |\omega_3|$ が成り立つ時間領域では $\omega_2 =$ 一定 とみなせるから，(7.1.174) の第 1 式，第 3 式は

$$\begin{bmatrix} \dot{\omega}_1 \\ \dot{\omega}_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 & -(I_3 - I_2)\omega_2 / I_1 \\ -(I_2 - I_1)\omega_2 / I_3 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \omega_1 \\ \omega_3 \end{bmatrix} \tag{7.1.180}$$

と近似できる。(7.1.180) の右辺の行列は実数の固有値 $\pm \sqrt{\frac{(I_3 - I_2)(I_2 - I_1)}{I_1 I_3}} |\omega_2|$ をもつから，$\Gamma = \sqrt{\frac{(I_3 - I_2)(I_2 - I_1)}{I_1 I_3}} |\omega_2|$ とおくと ω_1，ω_3 は $e^{\Gamma t}$ と $e^{-\Gamma t}$ の線形結合として表される非周期解となる。したがって，定常解 $(0, \omega_2, 0)$ は不安定である。
(c)$|\omega_3| \gg |\omega_1|, |\omega_2|$ が成り立つ時間領域では $\omega_3 =$ 一定 とみなせるから，(7.1.174) の第 1 式，第 2 式は

$$\begin{bmatrix} \dot{\omega}_1 \\ \dot{\omega}_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 & -(I_3 - I_2)\omega_3 / I_1 \\ (I_3 - I_1)\omega_3 / I_2 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \omega_1 \\ \omega_2 \end{bmatrix} \tag{7.1.181}$$

と近似できる。(7.1.181) の右辺の行列は純虚数の固有値 $\pm i\sqrt{\frac{(I_3-I_1)(I_3-I_2)}{I_1 I_2}}|\omega_3|$ をもつから，$\Omega = \sqrt{\frac{(I_3-I_1)(I_3-I_2)}{I_1 I_2}}|\omega_3|$ とおくと ω_1，ω_2 は $\cos\Omega t$ と $\sin\Omega t$ の線形結合によって表される周期解となる。したがって，定常解 $(0, 0, \omega_3)$ は安定である。

7.2 波動

7.2.1 弦の振動 (ディリクレ境界条件)

例題 18. x 軸上の区間 $0 \leq x \leq a$ で張られた弦の振動をディリクレ境界条件 (弦の両端は x 軸上に固定) の下で考える。時刻 t における位置 x での弦の振幅を $u(x,t)$ とすると，弦の振動は波動方程式

$$\frac{\partial^2}{\partial t^2}u(x,t) = -\mathscr{L}u(x,t) \qquad \mathscr{L} = -c^2\frac{\partial^2}{\partial x^2} \qquad \begin{cases} u(0,t) = 0 \\ u(a,t) = 0 \end{cases} \tag{7.2.1}$$

によって記述される。あるいは，(7.2.1) は $u(x,t) = \langle x|u(t)\rangle$ なる関数 $|u(t)\rangle$ とエルミート演算子 $\hat{L}$ を用いて

$$\frac{\partial^2}{\partial t^2}|u(t)\rangle = -\hat{L}|u(t)\rangle \qquad \hat{L} = \int_0^a dx\ |x\rangle\,\mathscr{L}\,\langle x| \tag{7.2.2}$$

と表せる。以下の問いに答えよ。

(1) $\hat{L}$ の固有値 λ_n および正規化された固有関数 $X_n(x) = \langle x|X_n\rangle$ を求めよ。

(2) $\hat{L}$ のスペクトル分解を求めよ。

(3) $u_n(t) = \langle X_n|u(t)\rangle$，$\omega_n = \sqrt{\lambda_n}$ とおくと，$u_n(t)$ は

$$\ddot{u}_n(t) = -\omega_n^2 u_n(t) \tag{7.2.3}$$

を満たすことを示せ。

(4) (7.2.1) の一般解を求めよ。

[解答]
(1)$\mathscr{L}X(x) = -c^2\partial_x^2 X(x) = \lambda X(x)$ の一般解は $k = \sqrt{\lambda}/c$ とおくと $X(x) = A\sin(kx) + B\cos(kx)$ である。$X(0) = 0$ より $B = 0$ である。さらに，$X(a) = 0$ より $k_n = \frac{n\pi}{a}$ $(n = 1, 2, \cdots)$ である。したがって，$\hat{L}$ の固有値は $\lambda_n = c^2 k_n^2 = \frac{n^2\pi^2c^2}{a^2}$ である。

A は $X_n(x)$ が正規化されるように決める。$\int_0^a dx\,|A\sin(k_n x)|^2 = \frac{a}{2}|A|^2 = 1$ より，$A = \sqrt{\frac{2}{a}}$ と選べばよい。以上より，

$$\text{固有値：}\lambda_n = c^2 k_n^2 \qquad \text{固有関数：}X_n(x) = \sqrt{\frac{2}{a}}\sin(k_n x) \tag{7.2.4}$$

$$k_n = \frac{n\pi}{a} \qquad (n = 1, 2, \cdots) \tag{7.2.5}$$

である。
(2)$\{\,|X_n\rangle \mid n = 1, 2, \cdots\}$ は完全正規直交系であるから，$\hat{L}$ のスペクトル分解は

$$\hat{L} = \sum_{n=1}^{\infty} \lambda_n\,|X_n\rangle\langle X_n| \tag{7.2.6}$$

となる。
(3)$\hat{L}$ のスペクトル分解 (7.2.6) および $\langle X_n|X_{n'}\rangle = \delta_{nn'}$ を用いると $\ddot{u}_n(t) = \partial_t^2\,\langle X_n|u(t)\rangle = \langle X_n|\,\partial_t^2\,|u(t)\rangle = -\,\langle X_n|\hat{L}|u(t)\rangle = -\lambda_n\,\langle X_n|u(t)\rangle = -\omega_n^2 u_n(t)$ となる。
(4)(7.2.3) の一般解は $u_n(t) = u_n(0)\cos\omega_n t + \frac{\dot{u}_n(0)}{\omega_n}\sin\omega_n t$ である。また，完全性関係 $\hat{I} = \sum_{n=1}^{\infty}|X_n\rangle\langle X_n|$ を用いると $u(x,t) = \langle x|u(t)\rangle = \sum_{n=1}^{\infty}\langle x|X_n\rangle\langle X_n|u(t)\rangle = \sum_{n=1}^{\infty} u_n(t)X_n(x)$ と書ける。したがって，(7.2.1) の一般解

$$u(x,t) = \sum_{n=1}^{\infty}\left(u_n(0)\cos\omega_n t + \frac{\dot{u}_n(0)}{\omega_n}\sin\omega_n t\right)X_n(x) \tag{7.2.7}$$

を得る。ここで，$\omega_n = ck_n$ である。初期条件 $u_n(0)$，$\dot{u}_n(0)$ は，$u(x,0)$，$\frac{\partial u}{\partial t}(x,0)$ を用いて，

$$u_n(0) = \int_0^a dx\,X_n(x)^* u(x,0) \qquad \dot{u}_n(0) = \int_0^a dx\,X_n(x)^*\frac{\partial u}{\partial t}(x,0) \tag{7.2.8}$$

によって与えられる。

7.2.2 弦の振動 (ノイマン境界条件)

例題 19. x 軸上の区間 $0 \le x \le a$ で張られた弦の振動をノイマン境界条件 (弦の両端は x 軸に垂直な方向に可動) の下で考える。時刻 t における位置 x での弦の振幅を $u(x,t)$ とすると，弦の振動は波動方程式

$$\frac{\partial^2}{\partial t^2}u(x,t) = -\mathscr{L}u(x,t) \qquad \mathscr{L} = -c^2\frac{\partial^2}{\partial x^2} \qquad \begin{cases}\frac{\partial u}{\partial x}(0,t) = 0\\ \frac{\partial u}{\partial x}(a,t) = 0\end{cases} \tag{7.2.9}$$

によって記述される。あるいは，(7.2.9) は $u(x,t) = \langle x|u(t)\rangle$ なる関数 $|u(t)\rangle$ とエルミート演算子 $\hat{L}$ を用いて

$$\frac{\partial^2}{\partial t^2}|u(t)\rangle = -\hat{L}\,|u(t)\rangle \qquad \hat{L} = \int_0^a dx\ |x\rangle\,\mathscr{L}\,\langle x| \tag{7.2.10}$$

と表せる。以下の問いに答えよ。

(1) $\hat{L}$ の固有値 λ_n および正規化された固有関数 $X_n(x) = \langle x|X_n\rangle$ を求めよ。

(2) $\hat{L}$ のスペクトル分解を求めよ。

(3) $u_n(t) = \langle X_n|u(t)\rangle$，$\omega_n = \sqrt{\lambda_n}$ とおくと，$u_n(t)$ は

$$\ddot{u}_n(t) = -\omega_n^2 u_n(t) \tag{7.2.11}$$

を満たすことを示せ。

(4) (7.2.9) の一般解を求めよ。

[解答]
(1)$\mathscr{L}X(x) = -c^2\partial_x^2 X(x) = \lambda X(x)$ の一般解は $k = \sqrt{\lambda}/c$ とおくと $X(x) = A\sin(kx) + B\cos(kx)$ である。$\frac{\partial X}{\partial x}(0) = 0$ より $A = 0$ である。さらに，$\frac{\partial X}{\partial x}(a) = 0$ より $k_n = \frac{n\pi}{a}\,(n = 0, 1, 2, \cdots)$ である。したがって，$\hat{L}$ の固有値は $\lambda_n = c^2 k_n^2 = \frac{n^2\pi^2c^2}{a^2}$ である。B は $X_n(x)$ が正規化されるように決める。$n = 0$ のとき $\int_0^a dx\,|B|^2 = a|B|^2 = 1$ より $B = \sqrt{\frac{1}{a}}$ と選べばよい。$n = 1, 2, \cdots$ のとき $\int_0^a dx\,|B\cos(k_n x)|^2 = \frac{a}{2}|B|^2 = 1$ より，$B = \sqrt{\frac{2}{a}}$ と選べばよい。以上より，

$$\text{固有値：}\lambda_n = c^2k_n^2 \qquad \text{固有関数：}X_n(x) = \begin{cases} \sqrt{\frac{1}{a}} & (n = 0) \\ \sqrt{\frac{2}{a}}\cos(k_n x) & (n = 1, 2, \cdots) \end{cases} \tag{7.2.12}$$

$$k_n = \frac{n\pi}{a} \qquad (n = 0, 1, 2, \cdots) \tag{7.2.13}$$

である。
(2)$\{\,|X_n\rangle\ |\,n = 0, 1, 2, \cdots\}$ は完全正規直交系であるから，$\hat{L}$ のスペクトル分解は

$$\hat{L} = \sum_{n=0}^{\infty} \lambda_n\,|X_n\rangle\langle X_n| \tag{7.2.14}$$

となる。
(3)$\hat{L}$ のスペクトル分解 (7.2.14) および $\langle X_n|X_{n'}\rangle = \delta_{nn'}$ を用いると $\ddot{u}_n(t) = \partial_t^2 \langle X_n|u(t)\rangle = \langle X_n| \partial_t^2 |u(t)\rangle = -\langle X_n|\hat{L}|u(t)\rangle = -\lambda_n \langle X_n|u(t)\rangle = -\omega_n^2 u_n(t)$ となる。
(4)(7.2.11) の一般解は, $n=0$ のとき $u_0(t) = u_0(0)+\dot{u}_0(0)t$ であり, $n=1,2,\cdots$ のとき $u_n(t) = u_n(0)\cos\omega_n t + \frac{\dot{u}_n(0)}{\omega_n}\sin\omega_n t$ である。また, 完全性関係 $\hat{I} = \sum_{n=0}^{\infty} |X_n\rangle\langle X_n|$ を用いると $u(x,t) = \langle x|u(t)\rangle = \sum_{n=0}^{\infty} \langle x|X_n\rangle\langle X_n|u(t)\rangle = \sum_{n=0}^{\infty} u_n(t)X_n(x)$ と書ける。したがって，(7.2.9) の一般解

$$u(x,t) = (u_0(0)+\dot{u}_0(0)t)X_0(x) + \sum_{n=1}^{\infty}\left(u_n(0)\cos\omega_n t + \frac{\dot{u}_n(0)}{\omega_n}\sin\omega_n t\right)X_n(x) \tag{7.2.15}$$

を得る。ここで，$\omega_n = ck_n$ である。初期条件 $u_n(0)$，$\dot{u}_n(0)$ は，$u(x,0)$，$\frac{\partial u}{\partial t}(x,0)$ を用いて,

$$u_n(0) = \int_0^a dx\, X_n(x)^* u(x,0) \qquad \dot{u}_n(0) = \int_0^a dx\, X_n(x)^* \frac{\partial u}{\partial t}(x,0) \tag{7.2.16}$$

によって与えられる。

7.2.3 弦の振動 (混合境界条件)

例題 20. x 軸上の区間 $0 \le x \le a$ で張られた弦の振動を混合境界条件 (弦の $x=0$ の端は x 軸上に固定，$x=a$ の端は x 軸に垂直な方向に可動) の下で考える。時刻 t における位置 x での弦の振幅を $u(x,t)$ とすると，弦の振動は波動方程式

$$\frac{\partial^2}{\partial t^2}u(x,t) = -\mathscr{L}u(x,t) \qquad \mathscr{L} = -c^2\frac{\partial^2}{\partial x^2} \qquad \begin{cases} u(0,t) = 0 \\ \frac{\partial u}{\partial x}(a,t) = 0 \end{cases} \tag{7.2.17}$$

によって記述される。あるいは，(7.2.17) は $u(x,t) = \langle x|u(t)\rangle$ なる関数 $|u(t)\rangle$ とエルミート演算子 $\hat{L}$ を用いて

$$\frac{\partial^2}{\partial t^2}|u(t)\rangle = -\hat{L}|u(t)\rangle \qquad \hat{L} = \int_0^a dx\, |x\rangle\, \mathscr{L}\, \langle x| \tag{7.2.18}$$

と表せる。以下の問いに答えよ。

(1) $\hat{L}$ の固有値 λ_n および正規化された固有関数 $X_n(x) = \langle x|X_n\rangle$ を求めよ。

(2) $\hat{L}$ のスペクトル分解を求めよ。

(3) $u_n(t) = \langle X_n|u(t)\rangle$，$\omega_n = \sqrt{\lambda_n}$ とおくと，$u_n(t)$ は

$$\ddot{u}_n(t) = -\omega_n^2 u_n(t) \tag{7.2.19}$$

を満たすことを示せ。

(4) (7.2.17) の一般解を求めよ。

[解答]
(1)$\mathscr{L}X(x) = -c^2\partial_x^2 X(x) = \lambda X(x)$ の一般解は $k = \sqrt{\lambda}/c$ とおくと $X(x) = A\sin(kx) + B\cos(kx)$ である。$X(0) = 0$ より $B = 0$ である。さらに，$\frac{\partial X}{\partial x}(a) = 0$ より $k_n = \frac{(2n-1)\pi}{2a}$ $(n = 1, 2, \cdots)$ である。したがって，$\hat{L}$ の固有値は $\lambda_n = c^2 k_n^2 = \frac{(2n-1)^2\pi^2c^2}{4a^2}$ である。A は $X_n(x)$ が正規化されるように決める。$\int_0^a dx\,|A\sin(k_n x)|^2 = \frac{a}{2}|A|^2 = 1$ より，$A = \sqrt{\frac{2}{a}}$ と選べばよい。以上より，

$$\text{固有値：}\lambda_n = c^2 k_n^2 \qquad \text{固有関数：}X_n(x) = \sqrt{\frac{2}{a}}\sin(k_n x) \tag{7.2.20}$$

$$k_n = \frac{(2n-1)\pi}{2a} \qquad (n = 1, 2, \cdots) \tag{7.2.21}$$

である。
(2)$\{\,|X_n\rangle \mid n = 1, 2, \cdots\}$ は完全正規直交系であるから，$\hat{L}$ のスペクトル分解は

$$\hat{L} = \sum_{n=1}^{\infty} \lambda_n\,|X_n\rangle\langle X_n| \tag{7.2.22}$$

となる。
(3)$\hat{L}$ のスペクトル分解 (7.2.22) および $\langle X_n|X_{n'}\rangle = \delta_{nn'}$ を用いると $\ddot{u}_n(t) = \partial_t^2\,\langle X_n|u(t)\rangle = \langle X_n|\,\partial_t^2\,|u(t)\rangle = -\,\langle X_n|\hat{L}|u(t)\rangle = -\lambda_n\,\langle X_n|u(t)\rangle = -\omega_n^2 u_n(t)$ となる。
(4)(7.2.19) の一般解は $u_n(t) = u_n(0)\cos\omega_n t + \frac{\dot{u}_n(0)}{\omega_n}\sin\omega_n t$ である。また，完全性関係 $\hat{I} = \sum_{n=1}^{\infty}|X_n\rangle\langle X_n|$ を用いると $u(x,t) = \langle x|u(t)\rangle = \sum_{n=1}^{\infty}\langle x|X_n\rangle\langle X_n|u(t)\rangle = \sum_{n=1}^{\infty} u_n(t)X_n(x)$ と書ける。したがって，(7.2.17) の一般解

$$u(x,t) = \sum_{n=1}^{\infty}\left(u_n(0)\cos\omega_n t + \frac{\dot{u}_n(0)}{\omega_n}\sin\omega_n t\right)X_n(x) \tag{7.2.23}$$

を得る。ここで，$\omega_n = ck_n$ である。初期条件 $u_n(0)$，$\dot{u}_n(0)$ は，$u(x,0)$，$\frac{\partial u}{\partial t}(x,0)$ を用いて，

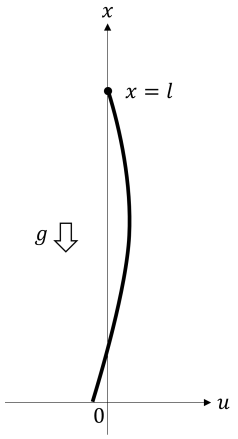
$$u_n(0) = \int_0^a dx\,X_n(x)^* u(x,0) \qquad \dot{u}_n(0) = \int_0^a dx\,X_n(x)^*\frac{\partial u}{\partial t}(x,0) \tag{7.2.24}$$

によって与えられる。

7.2.4　つり下げた鎖の振動

例題 21. x 軸を鉛直上向きにとり，その軸上の点 $x = l$ に一端を固定してつり下げた長さ l の鎖を考える。ただし，鎖の線密度は一定とする。時刻 t における高さ x での鎖の振幅を $u(x,t)$ とすると，鎖の振動は一般化された波動方程式

$$\frac{\partial^2}{\partial t^2}u(x,t) = -\mathscr{L}u(x,t) \qquad \mathscr{L} = -g\frac{\partial}{\partial x}x\frac{\partial}{\partial x} \qquad u(l,t) = 0 \tag{7.2.25}$$



によって記述される。あるいは，(7.2.25) は $u(x,t) = \langle x|u(t)\rangle$ なる関数 $|u(t)\rangle$ とエルミート演算子 $\hat{L}$ を用いて

$$\frac{\partial^2}{\partial t^2}|u(t)\rangle = -\hat{L}|u(t)\rangle \qquad \hat{L} = \int_0^l dx\ |x\rangle\,\mathscr{L}\,\langle x| \tag{7.2.26}$$

と表せる。以下の問いに答えよ。

(1) $\hat{L}$ の固有値 λ_n および正規化された固有関数 $\varphi_n(x) = \langle x|\varphi_n\rangle$ を求めよ。

(2) $\hat{L}$ のスペクトル分解を求めよ。

(3) $u_n(t) = \langle\varphi_n|u(t)\rangle$，$\omega_n = \sqrt{\lambda_n}$ とおくと，$u_n(t)$ は

$$\ddot{u}_n(t) = -\omega_n^2 u_n(t) \tag{7.2.27}$$

を満たすことを示せ。

(4) (7.2.25) の一般解を求めよ。

[解答]
(1) 変数変換 $\xi = 2\sqrt{x/g}$ を行うと, $x = \frac{g}{4}\xi^2$ より $dx = \frac{g\xi}{2}d\xi$ である。そこで, 重み関数を $w(\xi) = \frac{g\xi}{2}$ とし，$|\xi\rangle = |x\rangle$ とすると，$\langle\xi|\xi'\rangle = \langle x|x'\rangle = \delta(x-x') = \delta(\frac{g}{4}\xi^2 - \frac{g}{4}\xi'^2) = \frac{2}{g\xi}\delta(\xi-\xi') = \frac{1}{w(\xi)}\delta(\xi-\xi')$ である。また，$\partial_x = \frac{2}{g\xi}\partial_\xi$ より，$\mathscr{L} = -g\partial_x x\partial_x = -g\frac{2}{g\xi}\partial_\xi\frac{g}{4}\xi^2\frac{2}{g\xi}\partial_\xi = -\frac{1}{\xi}\partial_\xi\xi\partial_\xi$ であるから，$\hat{L} = \int_0^a w(\xi)d\xi\ |\xi\rangle\,(-\frac{1}{\xi}\partial_\xi\xi\partial_\xi)\,\langle\xi|$ と表せる。ここで, $a = 2\sqrt{l/g}$ とおいた。$\varphi(\xi) = \langle\xi|\varphi\rangle$ なる $\hat{L}$ の固有関数 $|\varphi\rangle$ は, $\hat{L}|\varphi\rangle = \lambda|\varphi\rangle$, つまり,

$$-\frac{1}{\xi}\frac{\partial}{\partial\xi}\xi\frac{\partial}{\partial\xi}\varphi(\xi) = \lambda\varphi(\xi) \tag{7.2.28}$$

を満たす。$\omega=\sqrt{\lambda}$，$\zeta=\omega\xi$，$y(\zeta)=\varphi(\xi)$ とおくと，(7.2.28) は

$$\frac{d^2}{d\zeta^2}y+\frac{1}{\zeta}\frac{d}{d\zeta}y+y=0 \tag{7.2.29}$$

と書ける。(7.2.29) は 0 次のベッセルの微分方程式であり, 原点で正則な解は 0 次のベッセル関数 $J_0(\zeta)$ で与えられる。境界条件 $\varphi(a)=0$ より, ω は $J_0(\zeta)$ の零点 j_{0n} から決まる。ここで，$J_0(j_{0n})=0\,(n=1,2,\cdots)$ である。よって $\varphi_n(\xi)=A_nJ_0(\omega_n\xi)$ である。正規化因子 A_n は $\int_0^a\frac{g\xi}{2}d\xi\,|\varphi_n(\xi)|^2=1$ より, $A_n=\sqrt{\frac{4}{J_1(j_{0n})^2ga^2}}=\sqrt{\frac{1}{J_1(j_{0n})^2l}}$ と選ぶ。以上より,

$$\text{固有値：}\lambda_n=\omega_n^2 \qquad \text{固有関数：}\varphi_n(\xi)=A_nJ_0(\omega_n\xi) \tag{7.2.30}$$

$$\omega_n=\frac{j_{0n}}{a} \qquad (n=1,2,\cdots) \tag{7.2.31}$$

である。
(2)$\{\,|\varphi_n\rangle\mid n=1,2,\cdots\}$ は完全正規直交系であるから，$\hat{L}$ のスペクトル分解は

$$\hat{L}=\sum_{n=1}^{\infty}\lambda_n\,|\varphi_n\rangle\langle\varphi_n| \tag{7.2.32}$$

となる。
(3)$\hat{L}$ のスペクトル分解 (7.2.32) および $\langle\varphi_n|\varphi_{n'}\rangle=\delta_{nn'}$ を用いると $\ddot{u}_n(t)=\partial_t^2\langle\varphi_n|u(t)\rangle=\langle\varphi_n|\,\partial_t^2\,|u(t)\rangle=-\langle\varphi_n|\hat{L}|u(t)\rangle=-\lambda_n\langle\varphi_n|u(t)\rangle=-\omega_n^2u_n(t)$ となる。
(4)(7.2.27) の一般解は $u_n(t)=u_n(0)\cos\omega_nt+\frac{\dot{u}_n(0)}{\omega_n}\sin\omega_nt$ である。また, 完全性関係 $\hat{I}=\sum_{n=1}^{\infty}|\varphi_n\rangle\langle\varphi_n|$ を用いると $u(x,t)=\langle x|u(t)\rangle=\langle\xi|u(t)\rangle=\sum_{n=1}^{\infty}\langle\xi|\varphi_n\rangle\langle\varphi_n|u(t)\rangle=\sum_{n=1}^{\infty}u_n(t)\varphi_n(\xi)$ と書ける。したがって，(7.2.25) の一般解

$$u(x,t)=\sum_{n=1}^{\infty}\left(u_n(0)\cos\omega_nt+\frac{\dot{u}_n(0)}{\omega_n}\sin\omega_nt\right)\varphi_n(2\sqrt{x/g}) \tag{7.2.33}$$

を得る。初期条件 $u_n(0)$，$\dot{u}_n(0)$ は，$u(x,0)$，$\frac{\partial u}{\partial t}(x,0)$ を用いて，

$$u_n(0)=\int_0^l dx\,\varphi_n(2\sqrt{x/g})^*u(x,0) \qquad \dot{u}_n(0)=\int_0^l dx\,\varphi_n(2\sqrt{x/g})^*\frac{\partial u}{\partial t}(x,0) \tag{7.2.34}$$

によって与えられる。

7.2.5 膜の振動 (矩形膜)

例題 22. xy 平面上の領域 $\Omega = \{\boldsymbol{r} \,|\, \boldsymbol{r} = x\,\boldsymbol{e}_x + y\,\boldsymbol{e}_y, 0 \le x \le a, 0 \le y \le b\}$ で張られた矩形膜の振動をディリクレ境界条件 (膜の縁は Ω の境界 $\partial\Omega$ に固定) の下で考える。時刻 t における位置 $\boldsymbol{r}$ での膜の振幅を $u(\boldsymbol{r}, t)$ とすると，膜の振動は波動方程式

$$\begin{aligned} &\frac{\partial^2}{\partial t^2} u(\boldsymbol{r}, t) = -\mathscr{L} u(\boldsymbol{r}, t) \qquad \mathscr{L} = \mathscr{L}_x + \mathscr{L}_y \\ &\mathscr{L}_x = -c^2 \frac{\partial^2}{\partial x^2} \qquad \mathscr{L}_y = -c^2 \frac{\partial^2}{\partial y^2} \qquad u(\boldsymbol{r}, t) = 0 \ (\boldsymbol{r} \in \partial\Omega) \end{aligned} \tag{7.2.35}$$

によって記述される。あるいは，(7.2.35) は $u(\boldsymbol{r}, t) = \langle \boldsymbol{r} | u(t) \rangle$ なる関数 $|u(t)\rangle$ とエルミート演算子 $\hat{L}$ を用いて

$$\begin{aligned} &\frac{\partial^2}{\partial t^2} |u(t)\rangle = -\hat{L}\,|u(t)\rangle \qquad \hat{L} = \hat{L}_x \otimes \hat{I}_y + \hat{I}_x \otimes \hat{L}_y \\ &\hat{L}_x = \int_0^a dx\ |x\rangle\, \mathscr{L}_x\, \langle x| \qquad \hat{L}_y = \int_0^b dy\ |y\rangle\, \mathscr{L}_y\, \langle y| \\ &\hat{I}_x = \int_0^a dx\ |x\rangle\langle x| \qquad \hat{I}_y = \int_0^b dy\ |y\rangle\langle y| \end{aligned} \tag{7.2.36}$$

と表せる。ここで，x を変数とする関数の関数空間 V_x におけるデルタ関数を $|x\rangle$，y を変数とする関数の関数空間 V_y におけるデルタ関数を $|y\rangle$ として，$|\boldsymbol{r}\rangle = |x\rangle \otimes |y\rangle$ は $\boldsymbol{r}$ を変数とする関数の関数空間 $V_x \otimes V_y$ におけるデルタ関数である。以下の問いに答えよ。

(1) $\hat{L}$ の固有値 $\lambda_{\boldsymbol{n}}$ および正規化された固有関数 $\varphi_{\boldsymbol{n}}(\boldsymbol{r}) = \langle \boldsymbol{r} | \varphi_{\boldsymbol{n}} \rangle$ を求めよ。ここで，$\boldsymbol{n} = (m, n)$ である。

(2) $\hat{L}$ のスペクトル分解を求めよ。

(3) $u_{\boldsymbol{n}}(t) = \langle \varphi_{\boldsymbol{n}} | u(t) \rangle$，$\omega_{\boldsymbol{n}} = \sqrt{\lambda_{\boldsymbol{n}}}$ とおくと，$u_{\boldsymbol{n}}(t)$ は

$$\ddot{u}_{\boldsymbol{n}}(t) = -\omega_{\boldsymbol{n}}^2 u_{\boldsymbol{n}}(t) \tag{7.2.37}$$

を満たすことを示せ。

(4) (7.2.35) の一般解を求めよ。

[解答]
(1)$\hat{L}$ は V_x の演算子 $\hat{L}_x$ と V_y の恒等演算子 $\hat{I}_y$ のテンソル積 $\hat{L}_x \otimes \hat{I}_y$ と V_x の恒等

演算子 $\hat{I}_x$ と V_y の演算子 $\hat{L}_y$ のテンソル積 $\hat{I}_x \otimes \hat{L}_y$ の和として表される。したがって，$\hat{L}$ の固有値 $\lambda_{\boldsymbol{n}}$ は $\hat{L}_x$ の固有値 λ_m と $\hat{L}_y$ の固有値 λ_n の和 $\lambda_{\boldsymbol{n}} = \lambda_m + \lambda_n$ で与えられ，また，$\hat{L}$ の固有関数 $|\varphi_{\boldsymbol{n}}\rangle$ は $\hat{L}_x$ の固有関数 $|X_m\rangle$ と $\hat{L}_y$ の固有関数 $|Y_n\rangle$ のテンソル積 $|\varphi_{\boldsymbol{n}}\rangle = |X_m\rangle \otimes |Y_n\rangle$ で与えられる。$\hat{L}_x$ の固有値・固有関数は以下のように求められる。$\mathscr{L}_x X(x) = -c^2\partial_x^2 X(x) = \lambda X(x)$ の一般解は $k = \sqrt{\lambda}/c$ とおくと $X(x) = A\sin(kx) + B\cos(kx)$ である。$X(0) = 0$ より $B = 0$ である。さらに，$X(a) = 0$ より $k = \frac{m\pi}{a}\,(m = 1, 2, \cdots)$ である。したがって，$\hat{L}_x$ の固有値は $\lambda_m = c^2k_m^2 = \frac{m^2\pi^2c^2}{a^2}$ である。A は $X_m(x)$ が正規化されるように決める。$\int_0^a dx\,|A\sin(k_m x)|^2 = \frac{a}{2}|A|^2 = 1$ より，$A = \sqrt{\frac{2}{a}}$ と選べばよい。$\hat{L}_y$ の固有値・固有関数についても同様に求められる。以上より，

$$\text{固有値：}\lambda_{\boldsymbol{n}} = c^2k_m^2 + c^2k_n^2 \qquad \text{固有関数：}\varphi_{\boldsymbol{n}}(\boldsymbol{r}) = X_m(x)Y_n(y) \tag{7.2.38}$$

$$X_m(x) = \sqrt{\frac{2}{a}}\sin(k_m x) \qquad Y_n(y) = \sqrt{\frac{2}{b}}\sin(k_n y) \tag{7.2.39}$$

$$k_m = \frac{m\pi}{a} \quad (m = 1, 2, \cdots) \qquad k_n = \frac{n\pi}{b} \quad (n = 1, 2, \cdots) \tag{7.2.40}$$

である。

(2)$\{\,|\varphi_{\boldsymbol{n}}\rangle \mid \boldsymbol{n} = (m, n), m = 1, 2, \cdots, n = 1, 2, \cdots\}$ は完全正規直交系であるから，$\hat{L}$ のスペクトル分解は

$$\hat{L} = \sum_{\boldsymbol{n}} \lambda_{\boldsymbol{n}}\,|\varphi_{\boldsymbol{n}}\rangle\langle\varphi_{\boldsymbol{n}}| \tag{7.2.41}$$

となる。

(3)$\hat{L}$ のスペクトル分解 (7.2.41) および $\langle\varphi_{\boldsymbol{n}}|\varphi_{\boldsymbol{n}'}\rangle = \delta_{\boldsymbol{n}\boldsymbol{n}'} = \delta_{mm'}\delta_{nn'}$ を用いると
$\ddot{u}_{\boldsymbol{n}}(t) = \partial_t^2\,\langle\varphi_{\boldsymbol{n}}|u(t)\rangle = \langle\varphi_{\boldsymbol{n}}|\,\partial_t^2\,|u(t)\rangle = -\,\langle\varphi_{\boldsymbol{n}}|\hat{L}|u(t)\rangle = -\lambda_{\boldsymbol{n}}\,\langle\varphi_{\boldsymbol{n}}|u(t)\rangle = -\omega_{\boldsymbol{n}}^2 u_{\boldsymbol{n}}(t)$
となる。

(4)(7.2.37) の一般解は $u_{\boldsymbol{n}}(t) = u_{\boldsymbol{n}}(0)\cos\omega_{\boldsymbol{n}}t + \frac{\dot{u}_{\boldsymbol{n}}(0)}{\omega_{\boldsymbol{n}}}\sin\omega_{\boldsymbol{n}}t$ である。また，完全性関係 $\hat{I} = \sum_{\boldsymbol{n}}|\varphi_{\boldsymbol{n}}\rangle\langle\varphi_{\boldsymbol{n}}|$ を用いると $u(\boldsymbol{r}, t) = \langle\boldsymbol{r}|u(t)\rangle = \sum_{\boldsymbol{n}}\langle\boldsymbol{r}|\varphi_{\boldsymbol{n}}\rangle\langle\varphi_{\boldsymbol{n}}|u(t)\rangle = \sum_{\boldsymbol{n}} u_{\boldsymbol{n}}(t)\varphi_{\boldsymbol{n}}(\boldsymbol{r})$ と書ける。したがって，(7.2.35) の一般解

$$u(\boldsymbol{r}, t) = \sum_{\boldsymbol{n}}\left(u_{\boldsymbol{n}}(0)\cos\omega_{\boldsymbol{n}}t + \frac{\dot{u}_{\boldsymbol{n}}(0)}{\omega_{\boldsymbol{n}}}\sin\omega_{\boldsymbol{n}}t\right)\varphi_{\boldsymbol{n}}(\boldsymbol{r}) \tag{7.2.42}$$

を得る。ここで，$\omega_{\boldsymbol{n}} = c\sqrt{k_m^2 + k_n^2}$ である。初期条件 $u_{\boldsymbol{n}}(0)$，$\dot{u}_{\boldsymbol{n}}(0)$ は，$u(\boldsymbol{r}, 0)$，$\frac{\partial u}{\partial t}(\boldsymbol{r}, 0)$ を用いて，

$$
\begin{aligned}
u_{\boldsymbol{n}}(0) &= \int_0^a dx \int_0^b dy\, \varphi_{\boldsymbol{n}}(\boldsymbol{r})^* u(\boldsymbol{r}, 0) \\
\dot{u}_{\boldsymbol{n}}(0) &= \int_0^a dx \int_0^b dy\, \varphi_{\boldsymbol{n}}(\boldsymbol{r})^* \frac{\partial u}{\partial t}(\boldsymbol{r}, 0)
\end{aligned}
\tag{7.2.43}
$$

によって与えられる。

7.2.6 膜の振動 (円形膜)

例題 23. xy 平面上の領域 $\Omega = \{\boldsymbol{r} \,|\, \boldsymbol{r} = \rho\cos\phi\, \boldsymbol{e}_x + \rho\sin\phi\, \boldsymbol{e}_y, 0 \le \rho \le a, 0 \le \phi \le 2\pi\}$ で張られた円形膜の振動をディリクレ境界条件 (膜の縁は円周 $\partial\Omega$ に固定) の下で考える。時刻 t における位置 $\boldsymbol{r}$ での膜の振幅を $u(\boldsymbol{r}, t)$ とすると，膜の振動は波動方程式

$$
\begin{aligned}
&\frac{\partial^2}{\partial t^2} u(\boldsymbol{r}, t) = -\mathscr{L} u(\boldsymbol{r}, t) \qquad \mathscr{L} = c^2\left(-\frac{1}{\rho}\frac{\partial}{\partial\rho}\rho\frac{\partial}{\partial\rho} + \frac{1}{\rho^2}\ell_z^2\right) \\
&\ell_z = -i\frac{\partial}{\partial\phi} \qquad u(\boldsymbol{r}, t) = 0\ (\rho = a)
\end{aligned}
\tag{7.2.44}
$$

によって記述される。あるいは，(7.2.44) は $u(\boldsymbol{r}, t) = \langle \boldsymbol{r} | u(t) \rangle$ なる関数 $|u(t)\rangle$ とエルミート演算子 $\hat{L}$ を用いて

$$
\begin{aligned}
&\frac{\partial^2}{\partial t^2} |u(t)\rangle = -\hat{L}\, |u(t)\rangle \\
&\hat{L} = c^2\left(\int_0^a \rho d\rho\, |\rho\rangle \left(-\frac{1}{\rho}\frac{\partial}{\partial\rho}\rho\frac{\partial}{\partial\rho}\right) \langle\rho| \otimes \hat{I}_\phi + \int_0^a \rho d\rho\, |\rho\rangle\, \frac{1}{\rho^2} \langle\rho| \otimes \hat{l}_z^2\right) \\
&\hat{l}_z = \int_0^{2\pi} d\phi\, |\phi\rangle\, \ell_z\, \langle\phi| \qquad \hat{I}_\phi = \int_0^{2\pi} d\phi\, |\phi\rangle\langle\phi|
\end{aligned}
\tag{7.2.45}
$$

と表せる。ここで，$|\rho\rangle$ は ρ を変数とする関数の関数空間 V_ρ(重み関数：ρ) におけるデルタ関数 $\langle\rho|\rho'\rangle = \frac{1}{\rho}\delta(\rho - \rho')$ であり，また，$|\phi\rangle$ は ϕ を変数とする関数の関数空間 V_ϕ におけるデルタ関数 $\langle\phi|\phi'\rangle = \delta(\phi - \phi')$ である[4]。以下の問いに答えよ。

(1) $\hat{L}$ の固有値 $\lambda_{\boldsymbol{n}}$ および正規化された固有関数 $\varphi_{\boldsymbol{n}}(\boldsymbol{r}) = \langle \boldsymbol{r} | \varphi_{\boldsymbol{n}} \rangle$ を求めよ。ここで，$\boldsymbol{n} = (m, n)$ である。

[4]重み付き内積の場合のデルタ関数については §5.2.5 の (5.2.74) および補章 C.1 を参照してください。

(2) $\hat{L}$ のスペクトル分解を求めよ。

(3) $u_{\boldsymbol{n}}(t) = \langle \varphi_{\boldsymbol{n}} | u(t) \rangle$，$\omega_{\boldsymbol{n}} = \sqrt{\lambda_{\boldsymbol{n}}}$ とおくと，$u_{\boldsymbol{n}}(t)$ は

$$\ddot{u}_{\boldsymbol{n}}(t) = -\omega_{\boldsymbol{n}}^2 u_{\boldsymbol{n}}(t) \tag{7.2.46}$$

を満たすことを示せ。

(4) (7.2.44) の一般解を求めよ。

[解答]
(1)$[\hat{l}_z, \hat{L}] = 0$ であるから，$\hat{l}_z$ と $\hat{L}$ は同時対角化可能である。$\hat{l}_z$ は角運動量演算子の z 成分であるから，固有値は m (m: 整数)，固有関数は $\Phi_m(\phi) = \langle \phi | \Phi_m \rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{im\phi}$ である。次に，$\hat{l}_z$ の固有値 m に対応する V_ϕ における $\hat{l}_z$ の固有空間を $W_m = \mathrm{span}(|\Phi_m\rangle)$ として，$V_\rho \otimes W_m$ における $\hat{L}$ の固有値問題を考える。$\langle \boldsymbol{r} | \varphi_{\boldsymbol{n}} \rangle = R(\rho)\Phi_m(\phi)$ とすると，$R(\rho)$ は

$$c^2 \left(-\frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} \rho \frac{\partial}{\partial \rho} + \frac{m^2}{\rho^2} \right) R(\rho) = \lambda R(\rho) \tag{7.2.47}$$

を満たす。$k = \sqrt{\lambda}/c$，$\zeta = k\rho$，$y(\zeta) = R(\rho)$ とおくと，(7.2.47) は

$$\frac{d^2}{d\zeta^2} y + \frac{1}{\zeta} \frac{d}{d\zeta} y + \left(1 - \frac{m^2}{\zeta^2} \right) y = 0 \tag{7.2.48}$$

と書ける。(7.2.48) はベッセルの微分方程式であり，原点で正則な解はベッセル関数 $J_m(\zeta)$ で与えられる。境界条件 $R(a) = 0$ より，k は $J_m(\zeta)$ の零点 j_{mn} から決まる。ここで，$J_m(j_{mn}) = 0$ $(n = 1, 2, \cdots)$ である。よって $R_{mn}(\rho) = A_{mn} J_m(k_{mn}\rho)$ である。正規化因子 A_{mn} は $\int_0^a \rho d\rho \, |R_{mn}(\rho)|^2 = 1$ より，$A_{mn} = \sqrt{\frac{2}{J_{m+1}(j_{mn})^2 a^2}}$ と選ぶ。以上より，

$$\text{固有値：} \lambda_{\boldsymbol{n}} = c^2 k_{mn}^2 \qquad \text{固有関数：} \varphi_{\boldsymbol{n}}(\boldsymbol{r}) = A_{mn} J_m(k_{mn}\rho) \Phi_m(\phi) \tag{7.2.49}$$

$$k_{mn} = \frac{j_{mn}}{a} \qquad (m\text{: 整数}, \ n = 1, 2, \cdots) \tag{7.2.50}$$

である。ただし，整数次数のベッセル関数の性質 $J_{-m}(x) = (-1)^m J_m(x)$ より，k_{mn} の m として零または正の整数 $(m = 0, 1, 2, \cdots)$ を考えればよい。
(2)$\{ |\varphi_{\boldsymbol{n}}\rangle \mid \boldsymbol{n} = (m, n), \ m\text{: 整数}, \ n = 1, 2, \cdots \}$ は完全正規直交系であるから，$\hat{L}$ のスペクトル分解は

$$\hat{L} = \sum_{\boldsymbol{n}} \lambda_{\boldsymbol{n}} |\varphi_{\boldsymbol{n}}\rangle\langle\varphi_{\boldsymbol{n}}| \tag{7.2.51}$$

となる。
(3)$\hat{L}$ のスペクトル分解 (7.2.51) および $\langle\varphi_{\boldsymbol{n}}|\varphi_{\boldsymbol{n}'}\rangle = \delta_{\boldsymbol{n}\boldsymbol{n}'} = \delta_{mm'}\delta_{nn'}$ を用いると
$\ddot{u}_{\boldsymbol{n}}(t) = \partial_t^2 \langle\varphi_{\boldsymbol{n}}|u(t)\rangle = \langle\varphi_{\boldsymbol{n}}|\,\partial_t^2\,|u(t)\rangle = -\langle\varphi_{\boldsymbol{n}}|\hat{L}|u(t)\rangle = -\lambda_{\boldsymbol{n}}\langle\varphi_{\boldsymbol{n}}|u(t)\rangle = -\omega_{\boldsymbol{n}}^2 u_{\boldsymbol{n}}(t)$
となる。
(4)(7.2.46) の一般解は $u_{\boldsymbol{n}}(t) = u_{\boldsymbol{n}}(0)\cos\omega_{\boldsymbol{n}}t + \frac{\dot{u}_{\boldsymbol{n}}(0)}{\omega_{\boldsymbol{n}}}\sin\omega_{\boldsymbol{n}}t$ である。また，完全性関係 $\hat{I} = \sum_{\boldsymbol{n}} |\varphi_{\boldsymbol{n}}\rangle\langle\varphi_{\boldsymbol{n}}|$ を用いると $u(\boldsymbol{r},t) = \langle\boldsymbol{r}|u(t)\rangle = \sum_{\boldsymbol{n}}\langle\boldsymbol{r}|\varphi_{\boldsymbol{n}}\rangle\langle\varphi_{\boldsymbol{n}}|u(t)\rangle = \sum_{\boldsymbol{n}} u_{\boldsymbol{n}}(t)\varphi_{\boldsymbol{n}}(\boldsymbol{r})$ と書ける。したがって，(7.2.44) の一般解

$$u(\boldsymbol{r},t) = \sum_{\boldsymbol{n}}\left(u_{\boldsymbol{n}}(0)\cos\omega_{\boldsymbol{n}}t + \frac{\dot{u}_{\boldsymbol{n}}(0)}{\omega_{\boldsymbol{n}}}\sin\omega_{\boldsymbol{n}}t\right)\varphi_{\boldsymbol{n}}(\boldsymbol{r}) \tag{7.2.52}$$

を得る。ここで，$\omega_{\boldsymbol{n}} = ck_{mn}$ である。初期条件 $u_{\boldsymbol{n}}(0)$，$\dot{u}_{\boldsymbol{n}}(0)$ は，$u(\boldsymbol{r},0)$，$\frac{\partial u}{\partial t}(\boldsymbol{r},0)$ を用いて，

$$\begin{aligned} u_{\boldsymbol{n}}(0) &= \int_0^a \rho d\rho \int_0^{2\pi} d\phi\, \varphi_{\boldsymbol{n}}(\boldsymbol{r})^* u(\boldsymbol{r},0) \\ \dot{u}_{\boldsymbol{n}}(0) &= \int_0^a \rho d\rho \int_0^{2\pi} d\phi\, \varphi_{\boldsymbol{n}}(\boldsymbol{r})^* \frac{\partial u}{\partial t}(\boldsymbol{r},0) \end{aligned} \tag{7.2.53}$$

によって与えられる。

7.2.7 気体の振動 (直方体容器)

例題 24. 3 次元空間の領域 $\Omega = \{\boldsymbol{r}\,|\,\boldsymbol{r} = x\,\boldsymbol{e}_x + y\,\boldsymbol{e}_y + z\,\boldsymbol{e}_z, 0 \le x \le a, 0 \le y \le b, 0 \le z \le d\}$ の直方体容器に入れた気体の圧力の振動をノイマン境界条件 (容器の内壁 $\partial\Omega$ で気体の圧力の壁面に垂直な方向の微分を零とする) の下で考える。時刻 t における位置 $\boldsymbol{r}$ での気体の圧力を $u(\boldsymbol{r},t)$ とすると，気体の振動は波動方程式

$$\begin{aligned} &\frac{\partial^2}{\partial t^2}u(\boldsymbol{r},t) = -\mathscr{L}u(\boldsymbol{r},t) \qquad \mathscr{L} = \mathscr{L}_x + \mathscr{L}_y + \mathscr{L}_z \\ &\mathscr{L}_x = -c^2\frac{\partial^2}{\partial x^2} \quad \mathscr{L}_y = -c^2\frac{\partial^2}{\partial y^2} \quad \mathscr{L}_z = -c^2\frac{\partial^2}{\partial z^2} \qquad \boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{\nabla}u(\boldsymbol{r},t) = 0\ (\boldsymbol{r}\in\partial\Omega) \end{aligned} \tag{7.2.54}$$

によって記述される。ここで，$\boldsymbol{n}$ は $\partial\Omega$ の外向き単位法線ベクトルである。あるいは，(7.2.54) は $u(\boldsymbol{r},t)=\langle\boldsymbol{r}|u(t)\rangle$ なる関数 $|u(t)\rangle$ とエルミート演算子 $\hat{L}$ を用いて

$$\begin{aligned}
&\frac{\partial^2}{\partial t^2}|u(t)\rangle=-\hat{L}\,|u(t)\rangle \qquad \hat{L}=\hat{L}_x\otimes\hat{I}_y\otimes\hat{I}_z+\hat{I}_x\otimes\hat{L}_y\otimes\hat{I}_z+\hat{I}_x\otimes\hat{I}_y\otimes\hat{L}_z\\
&\hat{L}_x=\int_0^a dx\;|x\rangle\,\mathscr{L}_x\,\langle x| \quad \hat{L}_y=\int_0^b dy\;|y\rangle\,\mathscr{L}_y\,\langle y| \quad \hat{L}_z=\int_0^d dz\;|z\rangle\,\mathscr{L}_z\,\langle z|\\
&\hat{I}_x=\int_0^a dx\;|x\rangle\langle x| \quad \hat{I}_y=\int_0^b dy\;|y\rangle\langle y| \quad \hat{I}_z=\int_0^d dz\;|z\rangle\langle z|
\end{aligned} \tag{7.2.55}$$

と表せる。ここで，$|x\rangle$，$|y\rangle$，$|z\rangle$ は x，y，z を変数とする関数の関数空間 V_x，V_y，V_z におけるデルタ関数 $\langle x|x'\rangle=\delta(x-x')$，$\langle y|y'\rangle=\delta(y-y')$，$\langle z|z'\rangle=\delta(z-z')$ である。以下の問いに答えよ。

(1) $\hat{L}$ の固有値 $\lambda_{\boldsymbol{n}}$ および正規化された固有関数 $\varphi_{\boldsymbol{n}}(\boldsymbol{r})=\langle\boldsymbol{r}|\varphi_{\boldsymbol{n}}\rangle$ を求めよ。ここで，$\boldsymbol{n}=(m,n,p)$ である。

(2) $\hat{L}$ のスペクトル分解を求めよ。

(3) $u_{\boldsymbol{n}}(t)=\langle\varphi_{\boldsymbol{n}}|u(t)\rangle$，$\omega_{\boldsymbol{n}}=\sqrt{\lambda_{\boldsymbol{n}}}$ とおくと，$u_{\boldsymbol{n}}(t)$ は

$$\ddot{u}_{\boldsymbol{n}}(t)=-\omega_{\boldsymbol{n}}^2u_{\boldsymbol{n}}(t) \tag{7.2.56}$$

を満たすことを示せ。

(4) (7.2.54) の一般解を求めよ。

[解答]
(1)$\hat{L}=\hat{L}_x\otimes\hat{I}_y\otimes\hat{I}_z+\hat{I}_x\otimes\hat{L}_y\otimes\hat{I}_z+\hat{I}_x\otimes\hat{I}_y\otimes\hat{L}_z$ と表されるから，$\hat{L}$ の固有値 $\lambda_{\boldsymbol{n}}$ は $\hat{L}_x$，$\hat{L}_y$，$\hat{L}_z$ の固有値 λ_m，λ_n，λ_p の和 $\lambda_{\boldsymbol{n}}=\lambda_m+\lambda_n+\lambda_p$ で与えられ，また，$\hat{L}$ の固有関数 $|\varphi_{\boldsymbol{n}}\rangle$ は $\hat{L}_x$，$\hat{L}_y$，$\hat{L}_z$ の固有関数 $|X_m\rangle$，$|Y_n\rangle$，$|Z_p\rangle$ のテンソル積 $|\varphi_{\boldsymbol{n}}\rangle=|X_m\rangle\otimes|Y_n\rangle\otimes|Z_p\rangle$ で与えられる。$\hat{L}_x$ の固有値・固有関数は以下のように求められる。$\mathscr{L}_xX(x)=-c^2\partial_x^2X(x)=\lambda X(x)$ の一般解は $k=\sqrt{\lambda}/c$ とおくと $X(x)=A\sin(kx)+B\cos(kx)$ である。$X'(0)=0$ より $A=0$ である。さらに，$X'(a)=0$ より $k=\frac{m\pi}{a}\,(m=0,1,2,\cdots)$ である。したがって，$\hat{L}_x$ の固有値は $\lambda_m=c^2k_m^2=\frac{m^2\pi^2c^2}{a^2}$ である。B は $X_m(x)$ が正規化されるように決める。$m=0$ のとき $\int_0^a dx\,|B|^2=a|B|^2=1$ より，$B=\sqrt{\frac{1}{a}}$ と選べばよい。$m=1,2,\cdots$ のとき

$\int_0^a dx\,|B\cos(k_m z)|^2 = \frac{a}{2}|B|^2 = 1$ より，$B = \sqrt{\frac{2}{a}}$ と選べばよい。$\hat{L}_y$，$\hat{L}_z$ の固有値・固有関数についても同様に求められる。以上より，

$$\text{固有値：}\lambda_{\boldsymbol{n}} = c^2k_m^2 + c^2k_n^2 + c^2k_p^2 \qquad \text{固有関数：}\varphi_{\boldsymbol{n}}(\boldsymbol{r}) = X_m(x)Y_n(y)Z_p(z) \tag{7.2.57}$$

$$k_m = \frac{m\pi}{a} \quad k_n = \frac{n\pi}{b} \quad k_p = \frac{p\pi}{d} \quad (m, n, p\text{: 零または正の整数}) \tag{7.2.58}$$

である。

(2)$\{\,|\varphi_{\boldsymbol{n}}\rangle \mid \boldsymbol{n} = (m, n, p),\ m = 0, 1, 2, \cdots,\ n = 0, 1, 2, \cdots,\ p = 0, 1, 2, \cdots\}$ は完全正規直交系であるから，$\hat{L}$ のスペクトル分解は

$$\hat{L} = \sum_{\boldsymbol{n}} \lambda_{\boldsymbol{n}}\,|\varphi_{\boldsymbol{n}}\rangle\langle\varphi_{\boldsymbol{n}}| \tag{7.2.59}$$

となる。

(3)$\hat{L}$ のスペクトル分解 (7.2.59) および $\langle\varphi_{\boldsymbol{n}}|\varphi_{\boldsymbol{n}'}\rangle = \delta_{\boldsymbol{n}\boldsymbol{n}'} = \delta_{mm'}\delta_{nn'}\delta_{pp'}$ を用いると $\ddot{u}_{\boldsymbol{n}}(t) = \partial_t^2\,\langle\varphi_{\boldsymbol{n}}|u(t)\rangle = \langle\varphi_{\boldsymbol{n}}|\,\partial_t^2\,|u(t)\rangle = -\langle\varphi_{\boldsymbol{n}}|\hat{L}|u(t)\rangle = -\lambda_{\boldsymbol{n}}\,\langle\varphi_{\boldsymbol{n}}|u(t)\rangle = -\omega_{\boldsymbol{n}}^2 u_{\boldsymbol{n}}(t)$ となる。

(4)(7.2.56) の一般解は，$\boldsymbol{n} = \boldsymbol{0}$ のとき $u_{\boldsymbol{0}}(t) = u_{\boldsymbol{0}}(0) + \dot{u}_{\boldsymbol{0}}(0)t$ であり，$\boldsymbol{n} \neq \boldsymbol{0}$ のとき $u_{\boldsymbol{n}}(t) = u_{\boldsymbol{n}}(0)\cos\omega_{\boldsymbol{n}}t + \frac{\dot{u}_{\boldsymbol{n}}(0)}{\omega_{\boldsymbol{n}}}\sin\omega_{\boldsymbol{n}}t$ である。ここで，$\boldsymbol{0}$ は $\boldsymbol{n} = (0, 0, 0)$ を意味するものとする。また，完全性関係 $\hat{I} = \sum_{\boldsymbol{n}}\,|\varphi_{\boldsymbol{n}}\rangle\langle\varphi_{\boldsymbol{n}}|$ を用いると $u(\boldsymbol{r}, t) = \langle\boldsymbol{r}|u(t)\rangle = \sum_{\boldsymbol{n}}\,\langle\boldsymbol{r}|\varphi_{\boldsymbol{n}}\rangle\langle\varphi_{\boldsymbol{n}}|u(t)\rangle = \sum_{\boldsymbol{n}} u_{\boldsymbol{n}}(t)\varphi_{\boldsymbol{n}}(\boldsymbol{r})$ と書ける。したがって，(7.2.54) の一般解

$$u(\boldsymbol{r}, t) = (u_{\boldsymbol{0}}(0) + \dot{u}_{\boldsymbol{0}}(0)t)\varphi_{\boldsymbol{0}}(\boldsymbol{r}) + \sum_{\boldsymbol{n}(\neq\boldsymbol{0})}\left(u_{\boldsymbol{n}}(0)\cos\omega_{\boldsymbol{n}}t + \frac{\dot{u}_{\boldsymbol{n}}(0)}{\omega_{\boldsymbol{n}}}\sin\omega_{\boldsymbol{n}}t\right)\varphi_{\boldsymbol{n}}(\boldsymbol{r}) \tag{7.2.60}$$

を得る。ここで，$\omega_{\boldsymbol{n}} = c\sqrt{k_m^2 + k_n^2 + k_p^2}$ である。初期条件 $u_{\boldsymbol{n}}(0)$，$\dot{u}_{\boldsymbol{n}}(0)$ は，$u(\boldsymbol{r}, 0)$，$\frac{\partial u}{\partial t}(\boldsymbol{r}, 0)$ を用いて，

$$\begin{aligned} u_{\boldsymbol{n}}(0) &= \int_0^a dx \int_0^b dy \int_0^d dz\,\varphi_{\boldsymbol{n}}(\boldsymbol{r})^* u(\boldsymbol{r}, 0) \\ \dot{u}_{\boldsymbol{n}}(0) &= \int_0^a dx \int_0^b dy \int_0^d dz\,\varphi_{\boldsymbol{n}}(\boldsymbol{r})^* \frac{\partial u}{\partial t}(\boldsymbol{r}, 0) \end{aligned} \tag{7.2.61}$$

によって与えられる。ただし，$u(\boldsymbol{r}, t)$ は気体の圧力であるから，$\dot{u}_{\boldsymbol{0}}(0) = 0$ でなければならない。

7.2.8 気体の振動 (円筒容器)

例題 25. 3 次元空間の領域 $\Omega = \{\boldsymbol{r} \mid \boldsymbol{r} = \rho\cos\phi\,\boldsymbol{e}_x + \rho\sin\phi\,\boldsymbol{e}_y + z\,\boldsymbol{e}_z, 0 \le \rho \le a, 0 \le \phi \le 2\pi, 0 \le z \le d\}$ の円筒容器に入れた気体の圧力の振動をノイマン境界条件 (容器の内壁 $\partial\Omega$ で気体の圧力の壁面に垂直な方向の微分を零とする) の下で考える。時刻 t における位置 $\boldsymbol{r}$ での気体の圧力を $u(\boldsymbol{r}, t)$ とすると，気体の振動は波動方程式

$$\begin{aligned}
&\frac{\partial^2}{\partial t^2}u(\boldsymbol{r},t) = -\mathscr{L}u(\boldsymbol{r},t) \qquad \mathscr{L} = c^2\left(-\frac{1}{\rho}\frac{\partial}{\partial\rho}\rho\frac{\partial}{\partial\rho} + \frac{1}{\rho^2}\ell_z^2\right) + \mathscr{L}_z \\
&\ell_z = -i\frac{\partial}{\partial\phi} \qquad \mathscr{L}_z = -c^2\frac{\partial^2}{\partial z^2} \qquad \boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{\nabla}u(\boldsymbol{r},t) = 0\ (\boldsymbol{r}\in\partial\Omega)
\end{aligned} \tag{7.2.62}$$

によって記述される。ここで，$\boldsymbol{n}$ は $\partial\Omega$ の外向き単位法線ベクトルである。あるいは，(7.2.62) は $u(\boldsymbol{r},t) = \langle\boldsymbol{r}|u(t)\rangle$ なる関数 $|u(t)\rangle$ とエルミート演算子 $\hat{L}$ を用いて

$$\begin{aligned}
&\frac{\partial^2}{\partial t^2}|u(t)\rangle = -\hat{L}\,|u(t)\rangle \qquad \hat{L} = \hat{L}_{\rho\phi}\otimes\hat{I}_z + \hat{I}_\rho\otimes\hat{I}_\phi\otimes\hat{L}_z \\
&\hat{L}_{\rho\phi} = c^2\left(\int_0^a \rho d\rho\,|\rho\rangle\left(-\frac{1}{\rho}\frac{\partial}{\partial\rho}\rho\frac{\partial}{\partial\rho}\right)\langle\rho|\otimes\hat{I}_\phi + \int_0^a \rho d\rho\,|\rho\rangle\,\frac{1}{\rho^2}\,\langle\rho|\otimes\hat{l}_z^2\right) \\
&\hat{l}_z = \int_0^{2\pi} d\phi\,|\phi\rangle\,\ell_z\,\langle\phi| \qquad \hat{L}_z = \int_0^d dz\,|z\rangle\,\mathscr{L}_z\,\langle z| \\
&\hat{I}_\rho = \int_0^a \rho d\rho\,|\rho\rangle\langle\rho| \qquad \hat{I}_\phi = \int_0^{2\pi} d\phi\,|\phi\rangle\langle\phi| \qquad \hat{I}_z = \int_0^d dz\,|z\rangle\langle z|
\end{aligned} \tag{7.2.63}$$

と表せる。ここで，$|\rho\rangle$ は ρ を変数とする関数の関数空間 V_ρ(重み関数：ρ) におけるデルタ関数 $\langle\rho|\rho'\rangle = \frac{1}{\rho}\delta(\rho-\rho')$，$|\phi\rangle$ は ϕ を変数とする関数の関数空間 V_ϕ におけるデルタ関数 $\langle\phi|\phi'\rangle = \delta(\phi-\phi')$，$|z\rangle$ は z を変数とする関数の関数空間 V_z におけるデルタ関数 $\langle z|z'\rangle = \delta(z-z')$ である[5]。以下の問いに答えよ。

(1) $\hat{L}$ の固有値 $\lambda_{\boldsymbol{n}}$ および正規化された固有関数 $\varphi_{\boldsymbol{n}}(\boldsymbol{r}) = \langle\boldsymbol{r}|\varphi_{\boldsymbol{n}}\rangle$ を求めよ。ここで，$\boldsymbol{n} = (m,n,p)$ である。

(2) $\hat{L}$ のスペクトル分解を求めよ。

(3) $u_{\boldsymbol{n}}(t) = \langle\varphi_{\boldsymbol{n}}|u(t)\rangle$，$\omega_{\boldsymbol{n}} = \sqrt{\lambda_{\boldsymbol{n}}}$ とおくと，$u_{\boldsymbol{n}}(t)$ は

$$\ddot{u}_{\boldsymbol{n}}(t) = -\omega_{\boldsymbol{n}}^2 u_{\boldsymbol{n}}(t) \tag{7.2.64}$$

を満たすことを示せ。

[5]重み付き内積の場合のデルタ関数については §5.2.5 の (5.2.74) および補章 C.1 を参照してください。

(4) (7.2.62) の一般解を求めよ。

[解答]
(1)$\hat{L}$ は $V_\rho \otimes V_\phi$ の演算子 $\hat{L}_{\rho\phi}$ と V_z の恒等演算子 $\hat{I}_z$ のテンソル積 $\hat{L}_{\rho\phi} \otimes \hat{I}_z$ と $V_{\rho\phi}$ の恒等演算子 $\hat{I}_\rho \otimes \hat{I}_\phi$ と V_z の演算子 $\hat{L}_z$ のテンソル積 $\hat{I}_\rho \otimes \hat{I}_\phi \otimes \hat{L}_z$ の和として表される。したがって，$\hat{L}$ の固有値 $\lambda_{\boldsymbol{n}}$ は $\hat{L}_{\rho\phi}$ の固有値 λ_{mn} と $\hat{L}_z$ の固有値 λ_p の和 $\lambda_{\boldsymbol{n}} = \lambda_{mn} + \lambda_p$ で与えられ，また，$\hat{L}$ の固有関数 $|\varphi_{\boldsymbol{n}}\rangle$ は $\hat{L}_{\rho\phi}$ の固有関数 $|\chi_{mn}\rangle$ と $\hat{L}_z$ の固有関数 $|Z_p\rangle$ のテンソル積 $|\varphi_{\boldsymbol{n}}\rangle = |\chi_{mn}\rangle \otimes |Z_p\rangle$ で与えられる。$\hat{L}_z$ の固有値・固有関数は以下のように求められる。$\mathscr{L}_z Z(z) = -c^2\partial_z^2 Z(z) = \lambda Z(z)$ の一般解は $k = \sqrt{\lambda}/c$ とおくと $Z(z) = A\sin(kz) + B\cos(kz)$ である。$Z'(0) = 0$ より $A = 0$ である。さらに，$Z'(d) = 0$ より $k = \frac{p\pi}{d}\,(p = 0, 1, 2, \cdots)$ である。したがって，$\hat{L}_z$ の固有値は $\lambda_p = c^2 k_p^2 = \frac{p^2\pi^2c^2}{d^2}$ である。B は $Z_p(z)$ が正規化されるように決める。$p = 0$ のとき $\int_0^d dz\,|B|^2 = d|B|^2 = 1$ より，$B = \sqrt{\frac{1}{d}}$ と選べばよい。$p = 1, 2, \cdots$ のとき $\int_0^d dz\,|B\cos(k_p z)|^2 = \frac{d}{2}|B|^2 = 1$ より，$B = \sqrt{\frac{2}{d}}$ と選べばよい。次に $\hat{L}_{\rho\phi}$ の固有値・固有関数を求める。$[\,\hat{l}_z, \hat{L}_{\rho\phi}\,] = 0$ であるから，$\hat{l}_z$ と $\hat{L}_{\rho\phi}$ は同時対角化可能である。$\hat{l}_z$ は角運動量演算子の z 成分であるから，固有値は $m\,(m$: 整数)，固有関数は $\Phi_m(\phi) = \langle\phi|\Phi_m\rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}e^{im\phi}$ である。$\hat{l}_z$ の固有値 m に対応する V_ϕ における $\hat{l}_z$ の固有空間を $W_m = \mathrm{span}(\,|\Phi_m\rangle)$ として，$V_\rho \otimes W_m$ における $\hat{L}_{\rho\phi}$ の固有値問題を考える。$\langle\boldsymbol{r}|\chi_{mn}\rangle = R(\rho)\Phi_m(\phi)$ とすると，$R(\rho)$ は

$$c^2\left(-\frac{1}{\rho}\frac{\partial}{\partial\rho}\rho\frac{\partial}{\partial\rho} + \frac{m^2}{\rho^2}\right)R(\rho) = \lambda R(\rho) \tag{7.2.65}$$

を満たす。$k = \sqrt{\lambda}/c$，$\zeta = k\rho$，$y(\zeta) = R(\rho)$ とおくと，(7.2.65) は

$$\frac{d^2}{d\zeta^2}y + \frac{1}{\zeta}\frac{d}{d\zeta}y + \left(1 - \frac{m^2}{\zeta^2}\right)y = 0 \tag{7.2.66}$$

と書ける。(7.2.66) はベッセルの微分方程式であり, 原点で正則な解はベッセル関数 $J_m(\zeta)$ で与えられる。境界条件 $R'(a) = 0$ より，k は $J'_m(\zeta)$ の零点 j'_{mn} から決まる。ここで，$J'_m(j'_{mn}) = 0\,(n = 1, 2, \cdots)$ の根として $j'_{01} = 0$ を含めるものとする。よって $R_{mn}(\rho) = A_{mn}J_m(k_{mn}\rho)$ である。正規化因子 A_{mn} は $\int_0^a \rho d\rho\,|R_{mn}(\rho)|^2 = 1$ より，$(m, n) = (0, 1)$ のとき $A_{01} = \sqrt{\frac{2}{a^2}}$, $(m, n) \neq (0, 1)$ のとき $A_{mn} = \sqrt{\frac{2}{(1-m^2/j'^2_{mn})J_m(j'_{mn})^2a^2}}$ と選ぶ。以上より，

$$\text{固有値：}\lambda_{\boldsymbol{n}} = c^2k_{mn}^2 + c^2k_p^2 \qquad \text{固有関数：}\varphi_{\boldsymbol{n}}(\boldsymbol{r}) = A_{mn}J_m(k_{mn}\rho)\Phi_m(\phi)Z_p(z) \tag{7.2.67}$$

$$k_{mn} = \frac{j'_{mn}}{a} \quad (m\text{: 整数}, n = 1, 2, \cdots) \qquad k_p = \frac{p\pi}{d} \quad (p = 0, 1, 2, \cdots) \tag{7.2.68}$$

である。ただし，整数次数のベッセル関数の性質 $J_{-m}(x) = (-1)^m J_m(x)$ より，k_{mn} の m として零または正の整数 $(m = 0, 1, 2, \cdots)$ を考えればよい。
(2)$\{\, |\varphi_{\boldsymbol{n}}\rangle \mid \boldsymbol{n} = (m, n, p),\ m\text{: 整数},\ n = 1, 2, \cdots,\ p = 0, 1, 2, \cdots \}$ は完全正規直交系であるから，$\hat{L}$ のスペクトル分解は

$$\hat{L} = \sum_{\boldsymbol{n}} \lambda_{\boldsymbol{n}} |\varphi_{\boldsymbol{n}}\rangle\langle\varphi_{\boldsymbol{n}}| \tag{7.2.69}$$

となる。
(3)$\hat{L}$ のスペクトル分解 (7.2.69) および $\langle\varphi_{\boldsymbol{n}}|\varphi_{\boldsymbol{n}'}\rangle = \delta_{\boldsymbol{n}\boldsymbol{n}'} = \delta_{mm'}\delta_{nn'}\delta_{pp'}$ を用いると $\ddot{u}_{\boldsymbol{n}}(t) = \partial_t^2 \langle\varphi_{\boldsymbol{n}}|u(t)\rangle = \langle\varphi_{\boldsymbol{n}}| \partial_t^2 |u(t)\rangle = -\langle\varphi_{\boldsymbol{n}}|\hat{L}|u(t)\rangle = -\lambda_{\boldsymbol{n}} \langle\varphi_{\boldsymbol{n}}|u(t)\rangle = -\omega_{\boldsymbol{n}}^2 u_{\boldsymbol{n}}(t)$ となる。
(4)(7.2.64) の一般解は，$\boldsymbol{n} = \boldsymbol{0}$ のとき $u_{\boldsymbol{0}}(t) = u_{\boldsymbol{0}}(0) + \dot{u}_{\boldsymbol{0}}(0)t$ であり，$\boldsymbol{n} \neq \boldsymbol{0}$ のとき $u_{\boldsymbol{n}}(t) = u_{\boldsymbol{n}}(0)\cos\omega_{\boldsymbol{n}}t + \frac{\dot{u}_{\boldsymbol{n}}(0)}{\omega_{\boldsymbol{n}}}\sin\omega_{\boldsymbol{n}}t$ である。ここで，$\boldsymbol{0}$ は $\boldsymbol{n} = (0, 1, 0)$ を意味するものとする。また，完全性関係 $\hat{I} = \sum_{\boldsymbol{n}} |\varphi_{\boldsymbol{n}}\rangle\langle\varphi_{\boldsymbol{n}}|$ を用いると $u(\boldsymbol{r}, t) = \langle\boldsymbol{r}|u(t)\rangle = \sum_{\boldsymbol{n}} \langle\boldsymbol{r}|\varphi_{\boldsymbol{n}}\rangle\langle\varphi_{\boldsymbol{n}}|u(t)\rangle = \sum_{\boldsymbol{n}} u_{\boldsymbol{n}}(t)\varphi_{\boldsymbol{n}}(\boldsymbol{r})$ と書ける。したがって，(7.2.62) の一般解

$$u(\boldsymbol{r}, t) = (u_{\boldsymbol{0}}(0) + \dot{u}_{\boldsymbol{0}}(0)t)\varphi_{\boldsymbol{0}}(\boldsymbol{r}) + \sum_{\boldsymbol{n}(\neq\boldsymbol{0})} \left(u_{\boldsymbol{n}}(0)\cos\omega_{\boldsymbol{n}}t + \frac{\dot{u}_{\boldsymbol{n}}(0)}{\omega_{\boldsymbol{n}}}\sin\omega_{\boldsymbol{n}}t \right)\varphi_{\boldsymbol{n}}(\boldsymbol{r}) \tag{7.2.70}$$

を得る。ここで，$\omega_{\boldsymbol{n}} = c\sqrt{k_{mn}^2 + k_p^2}$ である。初期条件 $u_{\boldsymbol{n}}(0)$，$\dot{u}_{\boldsymbol{n}}(0)$ は，$u(\boldsymbol{r}, 0)$，$\frac{\partial u}{\partial t}(\boldsymbol{r}, 0)$ を用いて，

$$\begin{aligned} u_{\boldsymbol{n}}(0) &= \int_0^a \rho d\rho \int_0^{2\pi} d\phi \int_0^d dz\, \varphi_{\boldsymbol{n}}(\boldsymbol{r})^* u(\boldsymbol{r}, 0) \\ \dot{u}_{\boldsymbol{n}}(0) &= \int_0^a \rho d\rho \int_0^{2\pi} d\phi \int_0^d dz\, \varphi_{\boldsymbol{n}}(\boldsymbol{r})^* \frac{\partial u}{\partial t}(\boldsymbol{r}, 0) \end{aligned} \tag{7.2.71}$$

によって与えられる。ただし，$u(\boldsymbol{r}, t)$ は気体の圧力であるから，$\dot{u}_{\boldsymbol{0}}(0) = 0$ でなければならない。

7.2.9 気体の振動 (球形容器)

例題 26. 3次元空間の領域 $\Omega = \{\boldsymbol{r} \mid \boldsymbol{r} = r\sin\theta\cos\phi\,\boldsymbol{e}_x + r\sin\theta\sin\phi\,\boldsymbol{e}_y + r\cos\theta\,\boldsymbol{e}_z, 0 \leq r \leq a, 0 \leq \theta \leq \pi, 0 \leq \phi \leq 2\pi\}$ の球形容器に入れた気体の圧力の振動をノイマン境

界条件 (容器の内壁 $\partial\Omega$ で気体の圧力の壁面に垂直な方向の微分を零とする) の下で考える。時刻 t における位置 $\boldsymbol{r}$ での気体の圧力を $u(\boldsymbol{r},t)$ とすると，気体の振動は波動方程式

$$\begin{aligned}
&\frac{\partial^2}{\partial t^2}u(\boldsymbol{r},t) = -\mathscr{L}u(\boldsymbol{r},t) \qquad \mathscr{L} = c^2\left(-\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}r^2\frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r^2}\boldsymbol{\ell}^2\right) \\
&\boldsymbol{\ell}^2 = -\left(\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta} + \frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\phi^2}\right) \qquad \frac{\partial u}{\partial r}(\boldsymbol{r},t) = 0\ (r=a)
\end{aligned} \tag{7.2.72}$$

によって記述される。あるいは，(7.2.72) は $u(\boldsymbol{r},t) = \langle\boldsymbol{r}|u(t)\rangle$ なる関数 $|u(t)\rangle$ とエルミート演算子 $\hat{L}$ を用いて

$$\begin{aligned}
&\frac{\partial^2}{\partial t^2}|u(t)\rangle = -\hat{L}\,|u(t)\rangle \\
&\hat{L} = c^2\left(\int_0^a r^2dr\ |r\rangle\left(-\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}r^2\frac{\partial}{\partial r}\right)\langle r|\otimes\hat{I}_{\theta\phi} + \int_0^a r^2dr\ |r\rangle\,\frac{1}{r^2}\,\langle r|\otimes\hat{\boldsymbol{l}}^2\right) \\
&\hat{I}_{\theta\phi} = \int_0^\pi \sin\theta d\theta\int_0^{2\pi}d\phi\ |\theta\phi\rangle\langle\theta\phi| \qquad \hat{\boldsymbol{l}}^2 = \int_0^\pi\sin\theta d\theta\int_0^{2\pi}d\phi\ |\theta\phi\rangle\,\boldsymbol{\ell}^2\,\langle\theta\phi|
\end{aligned} \tag{7.2.73}$$

と表せる。ここで，$|r\rangle$ は r を変数とする関数の関数空間 V_r(重み関数：r^2) におけるデルタ関数 $\langle r|r'\rangle = \frac{1}{r^2}\delta(r-r')$ であり，また，$|\theta\phi\rangle = |\theta\rangle\otimes|\phi\rangle$ は θ と ϕ を変数とする関数の関数空間 $V_{\theta\phi} = V_\theta\otimes V_\phi$($V_\theta$ の重み関数：$\sin\theta$) におけるデルタ関数 $\langle\theta\phi|\theta'\phi'\rangle = \langle\theta|\theta'\rangle\langle\phi|\phi'\rangle = \frac{1}{\sin\theta}\delta(\theta-\theta')\delta(\phi-\phi')$ である[6]。以下の問いに答えよ。

(1) $\hat{L}$ の固有値 $\lambda_{\boldsymbol{n}}$ および正規化された固有関数 $\varphi_{\boldsymbol{n}}(\boldsymbol{r}) = \langle\boldsymbol{r}|\varphi_{\boldsymbol{n}}\rangle$ を求めよ。ここで，$\boldsymbol{n} = (l,n,m)$ である。

(2) $\hat{L}$ のスペクトル分解を求めよ。

(3) $u_{\boldsymbol{n}}(t) = \langle\varphi_{\boldsymbol{n}}|u(t)\rangle$，$\omega_{\boldsymbol{n}} = \sqrt{\lambda_{\boldsymbol{n}}}$ とおくと，$u_{\boldsymbol{n}}(t)$ は

$$\ddot{u}_{\boldsymbol{n}}(t) = -\omega_{\boldsymbol{n}}^2u_{\boldsymbol{n}}(t) \tag{7.2.74}$$

を満たすことを示せ。

(4) (7.2.72) の一般解を求めよ。

[6]重み付き内積の場合のデルタ関数については §5.2.5 の (5.2.74) および補章 C.1 を参照してください。

[解答]
(1) 角運動量演算子 $\hat{\boldsymbol{l}}$ の z 成分を $\hat{l}_z$ とすると，$[\,\hat{\boldsymbol{l}}^2, \hat{l}_z\,] = 0$，$[\,\hat{\boldsymbol{l}}^2, \hat{L}\,] = 0$，$[\,\hat{l}_z, \hat{L}\,] = 0$ であるから，$\hat{\boldsymbol{l}}^2$，$\hat{l}_z$，$\hat{L}$ は同時対角化可能である。$\hat{\boldsymbol{l}}^2$ と $\hat{l}_z$ の共通の固有関数は球面調和関数 $Y_{lm}(\theta, \phi) = \langle \theta\phi | lm \rangle$ であり，$\hat{\boldsymbol{l}}^2$ の固有値は $l(l+1)\,(l = 0, 1, 2, \cdots)$，$\hat{l}_z$ の固有値は $m\,(m = -l, -l+1, \cdots, l-1, l)$ である。$\hat{\boldsymbol{l}}^2$，$\hat{l}_z$ の固有値 l，m に対応する $V_{\theta\phi}$ における $\hat{\boldsymbol{l}}^2$ と $\hat{l}_z$ の共通の固有空間を $W_{lm} = \mathrm{span}(\,|lm\rangle)$ として，$V_r \otimes W_{lm}$ における $\hat{L}$ の固有値問題を考える。$\langle \boldsymbol{r} | \varphi_{\boldsymbol{n}} \rangle = R(r) Y_{lm}(\theta, \phi)$ とすると，$R(r)$ は

$$c^2 \left(-\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} r^2 \frac{\partial}{\partial r} + \frac{l(l+1)}{r^2} \right) R(r) = \lambda R(r) \tag{7.2.75}$$

を満たす。$k = \sqrt{\lambda}/c$，$\zeta = kr$，$y(\zeta) = R(r)$ とおくと，(7.2.75) は

$$\frac{d^2}{d\zeta^2} y + \frac{2}{\zeta} \frac{d}{d\zeta} y + \left(1 - \frac{l(l+1)}{\zeta^2} \right) y = 0 \tag{7.2.76}$$

と書ける。(7.2.76) の原点で正則な解は球ベッセル関数 $j_l(\zeta)$ で与えられる。境界条件 $R'(a) = 0$ より，k は $j_l'(\zeta)$ の零点 α_{ln}' から決まる。ここで，$j_l'(\alpha_{ln}') = 0\,(n = 1, 2, \cdots)$ の根として $\alpha_{01}' = 0$ を含めるものとする。よって $R_{ln}(r) = A_{ln} j_l(k_{ln} r)$ である。正規化因子 A_{ln} は $\int_0^a r^2 dr\,|R_{ln}(r)|^2 = 1$ より，$(l, n) = (0, 1)$ のとき $A_{01} = \sqrt{\frac{3}{a^3}}$，$(l, n) \neq (0, 1)$ のとき $A_{ln} = \sqrt{\frac{2}{(1 - l(l+1)/\alpha_{ln}'^2)) j_l(\alpha_{ln}')^2 a^3}}$ と選ぶ。以上より，

$$\text{固有値：} \lambda_{\boldsymbol{n}} = c^2 k_{ln}^2 \qquad \text{固有関数：} \varphi_{\boldsymbol{n}}(\boldsymbol{r}) = A_{ln} j_l(k_{ln} r) Y_{lm}(\theta, \phi) \tag{7.2.77}$$

$$k_{ln} = \frac{\alpha_{ln}'}{a} \qquad (l = 0, 1, 2, \cdots,\ n = 1, 2, \cdots,\ m = -l, -l+1, \cdots, l-1, l) \tag{7.2.78}$$

である。
(2)$\{\,|\varphi_{\boldsymbol{n}}\rangle \mid \boldsymbol{n} = (l, n, m),\ l = 0, 1, 2, \cdots,\ n = 1, 2, \cdots,\ m = -l, -l+1, \cdots, l-1, l\}$ は完全正規直交系であるから，$\hat{L}$ のスペクトル分解は

$$\hat{L} = \sum_{\boldsymbol{n}} \lambda_{\boldsymbol{n}} \,|\varphi_{\boldsymbol{n}}\rangle\langle\varphi_{\boldsymbol{n}}| \tag{7.2.79}$$

となる。
(3)$\hat{L}$ のスペクトル分解 (7.2.79) および $\langle \varphi_{\boldsymbol{n}} | \varphi_{\boldsymbol{n}'} \rangle = \delta_{\boldsymbol{n}\boldsymbol{n}'} = \delta_{ll'} \delta_{nn'} \delta_{mm'}$ を用いると $\ddot{u}_{\boldsymbol{n}}(t) = \partial_t^2 \langle \varphi_{\boldsymbol{n}} | u(t) \rangle = \langle \varphi_{\boldsymbol{n}} | \partial_t^2 \,|u(t)\rangle = -\langle \varphi_{\boldsymbol{n}} | \hat{L} | u(t) \rangle = -\lambda_{\boldsymbol{n}} \langle \varphi_{\boldsymbol{n}} | u(t) \rangle =$

$-\omega_{\boldsymbol{n}}^2 u_{\boldsymbol{n}}(t)$ となる。
(4)(7.2.74) の一般解は，$\boldsymbol{n}=\boldsymbol{0}$ のとき $u_{\boldsymbol{0}}(t)=u_{\boldsymbol{0}}(0)+\dot{u}_{\boldsymbol{0}}(0)t$ であり，$\boldsymbol{n}\neq\boldsymbol{0}$ のとき $u_{\boldsymbol{n}}(t)=u_{\boldsymbol{n}}(0)\cos\omega_{\boldsymbol{n}}t+\frac{\dot{u}_{\boldsymbol{n}}(0)}{\omega_{\boldsymbol{n}}}\sin\omega_{\boldsymbol{n}}t$ である。ここで，$\boldsymbol{0}$ は $\boldsymbol{n}=(0,1,0)$ を意味するものとする。また，完全性関係 $\hat{I}=\sum_{\boldsymbol{n}}|\varphi_{\boldsymbol{n}}\rangle\langle\varphi_{\boldsymbol{n}}|$ を用いると $u(\boldsymbol{r},t)=\langle\boldsymbol{r}|u(t)\rangle=\sum_{\boldsymbol{n}}\langle\boldsymbol{r}|\varphi_{\boldsymbol{n}}\rangle\langle\varphi_{\boldsymbol{n}}|u(t)\rangle=\sum_{\boldsymbol{n}}u_{\boldsymbol{n}}(t)\varphi_{\boldsymbol{n}}(\boldsymbol{r})$ と書ける。したがって，(7.2.72) の一般解

$$u(\boldsymbol{r},t)=(u_{\boldsymbol{0}}(0)+\dot{u}_{\boldsymbol{0}}(0)t)\varphi_{\boldsymbol{0}}(\boldsymbol{r})+\sum_{\boldsymbol{n}(\neq\boldsymbol{0})}\left(u_{\boldsymbol{n}}(0)\cos\omega_{\boldsymbol{n}}t+\frac{\dot{u}_{\boldsymbol{n}}(0)}{\omega_{\boldsymbol{n}}}\sin\omega_{\boldsymbol{n}}t\right)\varphi_{\boldsymbol{n}}(\boldsymbol{r}) \tag{7.2.80}$$

を得る。ここで，$\omega_{\boldsymbol{n}}=ck_{ln}$ である。初期条件 $u_{\boldsymbol{n}}(0)$，$\dot{u}_{\boldsymbol{n}}(0)$ は，$u(\boldsymbol{r},0)$，$\frac{\partial u}{\partial t}(\boldsymbol{r},0)$ を用いて，

$$\begin{aligned}u_{\boldsymbol{n}}(0)&=\int_0^a r^2dr\int_0^\pi\sin\theta d\theta\int_0^{2\pi}d\phi\,\varphi_{\boldsymbol{n}}(\boldsymbol{r})^*u(\boldsymbol{r},0)\\ \dot{u}_{\boldsymbol{n}}(0)&=\int_0^a r^2dr\int_0^\pi\sin\theta d\theta\int_0^{2\pi}d\phi\,\varphi_{\boldsymbol{n}}(\boldsymbol{r})^*\frac{\partial u}{\partial t}(\boldsymbol{r},0)\end{aligned} \tag{7.2.81}$$

によって与えられる。ただし，$u(\boldsymbol{r},t)$ は気体の圧力であるから，$\dot{u}_{\boldsymbol{0}}(0)=0$ でなければならない。

7.3 電磁気学

7.3.1 サイクロトロン運動

例題 27. xy 平面上で運動する質量 m，電荷 q の粒子を考える。粒子は z 軸に平行にかけられた一様な磁場 $\boldsymbol{B}=B\,\boldsymbol{e}_z$ の下で運動する。このとき，粒子の運動は連立微分方程式

$$\begin{cases}m\dot{v}_x=qBv_y\\ m\dot{v}_y=-qBv_x\end{cases} \tag{7.3.1}$$

によって記述される。このような一様磁場の下で荷電粒子の行う運動をサイクロトロン運動という。(7.3.1) は歪エルミート行列 A を用いて

$$\dot{\boldsymbol{v}}=A\boldsymbol{v}\qquad \boldsymbol{v}=\begin{bmatrix}v_x\\ v_y\end{bmatrix}\qquad A=\begin{bmatrix}0&\omega_{\mathrm{c}}\\ -\omega_{\mathrm{c}}&0\end{bmatrix} \tag{7.3.2}$$

と表せる。ここで，$\boldsymbol{v}=\boldsymbol{v}(t)$ は時刻 t における粒子の速度ベクトルであり，$\omega_{\mathrm{c}}=qB/m$ はサイクロトロン振動数である。以下の問いに答えよ。

(1) A の固有値 λ_1，λ_2 および正規化された固有ベクトル $\boldsymbol{p}_1$，$\boldsymbol{p}_2$ を求めよ。

(2) A のスペクトル分解を求めよ。

(3) $u_1 = \boldsymbol{p}_1^\dagger \boldsymbol{v}$，$u_2 = \boldsymbol{p}_2^\dagger \boldsymbol{v}$ とおくと，u_1，u_2 は

$$\dot{u}_1 = \lambda_1 u_1 \qquad\qquad \dot{u}_2 = \lambda_2 u_2 \tag{7.3.3}$$

を満たすことを示せ。

(4) (7.3.1) の一般解を求めよ。

(5) 時刻 t における粒子の位置座標 $x(t)$，$y(t)$ を求めよ。

[解答]
(1)$|A - \lambda I_2| = \lambda^2 + \omega_\mathrm{c}^2 = (\lambda - i\omega_\mathrm{c})(\lambda + i\omega_\mathrm{c}) = 0$ より，

$$\lambda_1 = i\omega_\mathrm{c} \qquad\qquad \lambda_2 = -i\omega_\mathrm{c} \tag{7.3.4}$$

である。$\lambda = \lambda_1$ のとき，

$$\begin{bmatrix} -i\omega_\mathrm{c} & \omega_\mathrm{c} \\ -\omega_\mathrm{c} & -i\omega_\mathrm{c} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} c_1 \\ c_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \end{bmatrix} \quad \Rightarrow \quad \boldsymbol{p}_1 = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} 1 \\ i \end{bmatrix} \tag{7.3.5}$$

ととれる。$\lambda = \lambda_2$ のとき，

$$\begin{bmatrix} i\omega_\mathrm{c} & \omega_\mathrm{c} \\ -\omega_\mathrm{c} & i\omega_\mathrm{c} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} c_1 \\ c_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \end{bmatrix} \quad \Rightarrow \quad \boldsymbol{p}_2 = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} 1 \\ -i \end{bmatrix} \tag{7.3.6}$$

ととれる。
(2)$\{\boldsymbol{p}_1, \boldsymbol{p}_2\}$ は正規直交基底であるから，その双対基底は $\{\boldsymbol{p}_1^\dagger, \boldsymbol{p}_2^\dagger\}$ である。したがって，λ_1，λ_2，$\boldsymbol{p}_1$，$\boldsymbol{p}_2$ を用いると，A のスペクトル分解は

$$A = \lambda_1 \boldsymbol{p}_1 \boldsymbol{p}_1^\dagger + \lambda_2 \boldsymbol{p}_2 \boldsymbol{p}_2^\dagger \tag{7.3.7}$$

となる。
(3) 完全性関係 $I_2 = \boldsymbol{p}_1 \boldsymbol{p}_1^\dagger + \boldsymbol{p}_2 \boldsymbol{p}_2^\dagger$ および $u_1 = \boldsymbol{p}_1^\dagger \boldsymbol{v}$，$u_2 = \boldsymbol{p}_2^\dagger \boldsymbol{v}$ より $\boldsymbol{v} = I_2 \boldsymbol{v} = \boldsymbol{p}_1 \boldsymbol{p}_1^\dagger \boldsymbol{v} + \boldsymbol{p}_2 \boldsymbol{p}_2^\dagger \boldsymbol{v} = u_1 \boldsymbol{p}_1 + u_2 \boldsymbol{p}_2$ であるから，$\dot{\boldsymbol{v}} = \dot{u}_1 \boldsymbol{p}_1 + \dot{u}_2 \boldsymbol{p}_2$ と表せる。一方，A のスペクトル分解 (7.3.7) を用いると $A\boldsymbol{v} = \lambda_1 \boldsymbol{p}_1 \boldsymbol{p}_1^\dagger \boldsymbol{v} + \lambda_2 \boldsymbol{p}_2 \boldsymbol{p}_2^\dagger \boldsymbol{v} = \lambda_1 u_1 \boldsymbol{p}_1 + \lambda_2 u_2 \boldsymbol{p}_2$ と表せる。したがって，これらの $\boldsymbol{p}_1$, $\boldsymbol{p}_2$ の係数を比較することにより，$\dot{u}_1 = \lambda_1 u_1 = i\omega_\mathrm{c} u_1$，$\dot{u}_2 = \lambda_2 u_2 = -i\omega_\mathrm{c} u_2$ を得る。

(4)(7.3.3) の一般解は $u_1(t) = u_1(0)e^{i\omega_c t}$，$u_2(t) = u_2(0)e^{-i\omega_c t}$ であるから，(7.3.2) の一般解は

$$\boldsymbol{v}(t) = u_1(t)\boldsymbol{p}_1 + u_2(t)\boldsymbol{p}_2 \tag{7.3.8}$$

と書ける。したがって，(7.3.1) の一般解は

$$\begin{cases} v_x(t) = \frac{1}{\sqrt{2}}(u_1(t) + u_2(t)) \\ v_y(t) = \frac{i}{\sqrt{2}}(u_1(t) - u_2(t)) \end{cases} \tag{7.3.9}$$

である。初期条件 $u_1(0) = \boldsymbol{p}_1^\dagger \boldsymbol{v}(0)$，$u_2(0) = \boldsymbol{p}_2^\dagger \boldsymbol{v}(0)$ は $v_x(0)$，$v_y(0)$ を用いて，

$$u_1(0) = \frac{1}{\sqrt{2}}(v_x(0) - iv_y(0)) \qquad u_2(0) = \frac{1}{\sqrt{2}}(v_x(0) + iv_y(0)) \tag{7.3.10}$$

によって与えられるから，(7.3.9) は

$$\begin{cases} v_x(t) = v_x(0)\cos\omega_c t + v_y(0)\sin\omega_c t \\ v_y(t) = -v_x(0)\sin\omega_c t + v_y(0)\cos\omega_c t \end{cases} \tag{7.3.11}$$

と表せる。
(5)(7.3.11) を t について積分することにより，

$$\begin{cases} x(t) = x(0) + \frac{v_x(0)}{\omega_c}\sin\omega_c t - \frac{v_y(0)}{\omega_c}(\cos\omega_c t - 1) \\ y(t) = y(0) + \frac{v_x(0)}{\omega_c}(\cos\omega_c t - 1) + \frac{v_y(0)}{\omega_c}\sin\omega_c t \end{cases} \tag{7.3.12}$$

を得る。(7.3.12) より，

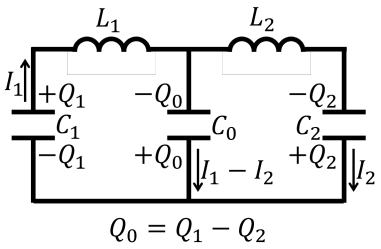
$$\left(x(t) - x(0) - \frac{v_y(0)}{\omega_c}\right)^2 + \left(y(t) - y(0) + \frac{v_x(0)}{\omega_c}\right)^2 = \frac{v_x(0)^2 + v_y(0)^2}{\omega_c^2} \tag{7.3.13}$$

となるから，粒子の軌道は半径 $r_c = v(0)/|\omega_c|$ の円である。r_c をサイクロトロン半径という。

7.3.2 LC 回路 (1)

例題 28. 図のようにコイルとコンデンサからなる LC 回路の電気振動を考える。電流 $I_1 = I_1(t)$，$I_2 = I_2(t)$ は連立微分方程式

$$\begin{cases} L_1\ddot{I}_1 = -\left(\frac{1}{C_0}+\frac{1}{C_1}\right)I_1 + \frac{1}{C_0}I_2 \\ L_2\ddot{I}_2 = \frac{1}{C_0}I_1 - \left(\frac{1}{C_0}+\frac{1}{C_2}\right)I_2 \end{cases} \tag{7.3.14}$$



を満たす。あるいは, (7.3.14) は $\boldsymbol{J} = \sqrt{L}\boldsymbol{I}$ とエルミート行列 A を用いて

$$\begin{aligned} &\ddot{\boldsymbol{J}} = A\boldsymbol{J} \qquad \boldsymbol{J} = \begin{bmatrix} J_1 \\ J_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \sqrt{L_1}I_1 \\ \sqrt{L_2}I_2 \end{bmatrix} \qquad \boldsymbol{I} = \begin{bmatrix} I_1 \\ I_2 \end{bmatrix} \\ &\sqrt{L} = \begin{bmatrix} \sqrt{L_1} & 0 \\ 0 & \sqrt{L_2} \end{bmatrix} \qquad \frac{1}{C} = \begin{bmatrix} \frac{1}{C_0}+\frac{1}{C_1} & -\frac{1}{C_0} \\ -\frac{1}{C_0} & \frac{1}{C_0}+\frac{1}{C_2} \end{bmatrix} \\ &A = -\frac{1}{\sqrt{L}}\frac{1}{C}\frac{1}{\sqrt{L}} = \begin{bmatrix} -\frac{1}{L_1}\left(\frac{1}{C_0}+\frac{1}{C_1}\right) & \frac{1}{\sqrt{L_1L_2}C_0} \\ \frac{1}{\sqrt{L_1L_2}C_0} & -\frac{1}{L_2}\left(\frac{1}{C_0}+\frac{1}{C_2}\right) \end{bmatrix} \end{aligned} \tag{7.3.15}$$

と表せる。以下の問いに答えよ。

(1) A の固有値 λ_1，λ_2 および正規化された固有ベクトル $\boldsymbol{p}_1$，$\boldsymbol{p}_2$ を求めよ。

(2) A のスペクトル分解を求めよ。

(3) $j_1 = \boldsymbol{p}_1^\dagger\boldsymbol{J}$，$j_2 = \boldsymbol{p}_2^\dagger\boldsymbol{J}$，$\omega_1 = \sqrt{-\lambda_1}$，$\omega_2 = \sqrt{-\lambda_2}$ とおくと，j_1，j_2 は

$$\ddot{j}_1 = -\omega_1^2 j_1 \qquad \ddot{j}_2 = -\omega_2^2 j_2 \tag{7.3.16}$$

を満たすことを示せ。

(4) (7.3.14) の一般解を求めよ。

[解答]

(1)2 行 2 列のエルミート行列の固有値・固有ベクトル (3.3.61) を用いると，$\delta = -(\frac{1}{2}(\frac{1}{L_1}(\frac{1}{C_0}+\frac{1}{C_1}) - \frac{1}{L_2}(\frac{1}{C_0}+\frac{1}{C_2}))$，$\Delta = \sqrt{\delta^2 + \frac{1}{L_1L_2C_0^2}}$ として，

$$\begin{aligned} \lambda_1 &= -\left(\frac{1}{2}\left(\frac{1}{L_1}\left(\frac{1}{C_0}+\frac{1}{C_1}\right)+\frac{1}{L_2}\left(\frac{1}{C_0}+\frac{1}{C_2}\right)\right)-\Delta\right) \\ \lambda_2 &= -\left(\frac{1}{2}\left(\frac{1}{L_1}\left(\frac{1}{C_0}+\frac{1}{C_1}\right)+\frac{1}{L_2}\left(\frac{1}{C_0}+\frac{1}{C_2}\right)\right)+\Delta\right) \end{aligned} \tag{7.3.17}$$

である。固有値 λ_1，λ_2 に属する固有ベクトル $\boldsymbol{p}_1$，$\boldsymbol{p}_2$ は

$$\boldsymbol{p}_1 = \begin{bmatrix} u \\ v \end{bmatrix} \qquad \boldsymbol{p}_2 = \begin{bmatrix} -v \\ u \end{bmatrix} \tag{7.3.18}$$

ととれる。ここで,

$$u = \sqrt{\frac{1}{2}\left(1 + \frac{\delta}{\Delta}\right)} \qquad v = \sqrt{\frac{1}{2}\left(1 - \frac{\delta}{\Delta}\right)} \tag{7.3.19}$$

である。
(2)$\{\boldsymbol{p}_1, \boldsymbol{p}_2\}$ は正規直交基底であるから，その双対基底は $\{\boldsymbol{p}_1^\dagger, \boldsymbol{p}_2^\dagger\}$ である。したがって，λ_1，λ_2，$\boldsymbol{p}_1$，$\boldsymbol{p}_2$ を用いると，A のスペクトル分解は

$$A = \lambda_1 \boldsymbol{p}_1 \boldsymbol{p}_1^\dagger + \lambda_2 \boldsymbol{p}_2 \boldsymbol{p}_2^\dagger \tag{7.3.20}$$

となる。
(3) 完全性関係 $I_2 = \boldsymbol{p}_1\boldsymbol{p}_1^\dagger + \boldsymbol{p}_2\boldsymbol{p}_2^\dagger$ および $j_1 = \boldsymbol{p}_1^\dagger \boldsymbol{J}$，$j_2 = \boldsymbol{p}_2^\dagger \boldsymbol{J}$ より $\boldsymbol{J} = I_2\boldsymbol{J} = \boldsymbol{p}_1\boldsymbol{p}_1^\dagger\boldsymbol{J} + \boldsymbol{p}_2\boldsymbol{p}_2^\dagger\boldsymbol{J} = j_1\boldsymbol{p}_1 + j_2\boldsymbol{p}_2$ であるから, $\ddot{\boldsymbol{J}} = \ddot{j}_1\boldsymbol{p}_1 + \ddot{j}_2\boldsymbol{p}_2$ と表せる。一方, A のスペクトル分解 (7.3.20) を用いると $A\boldsymbol{J} = \lambda_1\boldsymbol{p}_1\boldsymbol{p}_1^\dagger\boldsymbol{J} + \lambda_2\boldsymbol{p}_2\boldsymbol{p}_2^\dagger\boldsymbol{J} = \lambda_1 j_1\boldsymbol{p}_1 + \lambda_2 j_2\boldsymbol{p}_2$ と表せる。したがって, これらの $\boldsymbol{p}_1$, $\boldsymbol{p}_2$ の係数を比較することにより, $\ddot{j}_1 = \lambda_1 j_1 = -\omega_1^2 j_1$, $\ddot{j}_2 = \lambda_2 j_2 = -\omega_2^2 j_2$ を得る。
(4)(7.3.16) の一般解は $j_1(t) = j_1(0)\cos\omega_1 t + \frac{\dot{j}_1(0)}{\omega_1}\sin\omega_1 t$，$j_2(t) = j_2(0)\cos\omega_2 t + \frac{\dot{j}_2(0)}{\omega_2}\sin\omega_2 t$ であるから，(7.3.15) の一般解は

$$\boldsymbol{I}(t) = \frac{1}{\sqrt{L}}(j_1(t)\boldsymbol{p}_1 + j_2(t)\boldsymbol{p}_2) \tag{7.3.21}$$

と書ける。したがって，(7.3.14) の一般解は

$$\begin{cases} I_1(t) = \frac{1}{\sqrt{L_1}}(u j_1(t) - v j_2(t)) \\ I_2(t) = \frac{1}{\sqrt{L_2}}(v j_1(t) + u j_2(t)) \end{cases} \tag{7.3.22}$$

である。初期条件 $j_1(0) = \boldsymbol{p}_1^\dagger\boldsymbol{J}(0)$, $j_2(0) = \boldsymbol{p}_2^\dagger\boldsymbol{J}(0)$, $\dot{j}_1(0) = \boldsymbol{p}_1^\dagger\dot{\boldsymbol{J}}(0)$, $\dot{j}_2(0) = \boldsymbol{p}_2^\dagger\dot{\boldsymbol{J}}(0)$ は $I_1(0)$，$I_2(0)$，$\dot{I}_1(0)$，$\dot{I}_2(0)$ を用いて,

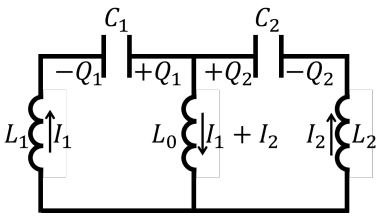
$$\begin{aligned} j_1(0) &= u\sqrt{L_1}I_1(0) + v\sqrt{L_2}I_2(0) & j_2(0) &= -v\sqrt{L_1}I_1(0) + u\sqrt{L_2}I_2(0) \\ \dot{j}_1(0) &= u\sqrt{L_1}\dot{I}_1(0) + v\sqrt{L_2}\dot{I}_2(0) & \dot{j}_2(0) &= -v\sqrt{L_1}\dot{I}_1(0) + u\sqrt{L_2}\dot{I}_2(0) \end{aligned} \tag{7.3.23}$$

によって与えられる。

7.3.3 LC 回路 (2)

例題 29. 図のようにコイルとコンデンサからなる LC 回路の電気振動を考える。電流 $I_1 = I_1(t)$，$I_2 = I_2(t)$ は連立微分方程式

$$\begin{cases}(L_0+L_1)\ddot{I}_1+L_0\ddot{I}_2=-\frac{1}{C_1}I_1\\ L_0\ddot{I}_1+(L_0+L_2)\ddot{I}_2=-\frac{1}{C_2}I_2\end{cases} \tag{7.3.24}$$



を満たす。あるいは, (7.3.24) は $\boldsymbol{J}=\frac{1}{\sqrt{C}}\boldsymbol{I}$ とエルミート行列 A を用いて

$$\begin{aligned}&\ddot{\boldsymbol{J}}=A\boldsymbol{J} \qquad \boldsymbol{J}=\begin{bmatrix}J_1\\J_2\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}\frac{1}{\sqrt{C_1}}I_1\\ \frac{1}{\sqrt{C_2}}I_2\end{bmatrix} \qquad \boldsymbol{I}=\begin{bmatrix}I_1\\I_2\end{bmatrix}\\ &\frac{1}{\sqrt{C}}=\begin{bmatrix}\frac{1}{\sqrt{C_1}} & 0\\ 0 & \frac{1}{\sqrt{C_2}}\end{bmatrix} \qquad L=\begin{bmatrix}L_0+L_1 & L_0\\ L_0 & L_0+L_2\end{bmatrix}\\ &A=-\frac{1}{\sqrt{C}}L^{-1}\frac{1}{\sqrt{C}}=\frac{1}{\det L}\begin{bmatrix}-\frac{L_0+L_2}{C_1} & \frac{L_0}{\sqrt{C_1C_2}}\\ \frac{L_0}{\sqrt{C_1C_2}} & -\frac{L_0+L_1}{C_2}\end{bmatrix}\end{aligned} \tag{7.3.25}$$

と表せる。ここで，$\det L=L_1L_2+(L_1+L_2)L_0$ である。以下の問いに答えよ。

(1) A の固有値 λ_1，λ_2 および正規化された固有ベクトル $\boldsymbol{p}_1$，$\boldsymbol{p}_2$ を求めよ。

(2) A のスペクトル分解を求めよ。

(3) $j_1=\boldsymbol{p}_1^\dagger\boldsymbol{J}$，$j_2=\boldsymbol{p}_2^\dagger\boldsymbol{J}$，$\omega_1=\sqrt{-\lambda_1}$，$\omega_2=\sqrt{-\lambda_2}$ とおくと，j_1，j_2 は

$$\ddot{j}_1=-\omega_1^2j_1 \qquad \ddot{j}_2=-\omega_2^2j_2 \tag{7.3.26}$$

を満たすことを示せ。

(4) (7.3.24) の一般解を求めよ。

[解答]

(1)2 行 2 列のエルミート行列の固有値・固有ベクトル (3.3.61) を用いると，$\delta=-\frac{1}{2\det L}(\frac{L_0+L_2}{C_1}-\frac{L_0+L_1}{C_2})$，$\Delta=\sqrt{\delta^2+\frac{L_0^2}{(\det L)^2C_1C_2}}$ として，

$$\begin{aligned}\lambda_1&=-\left(\frac{1}{2\det L}\left(\frac{L_0+L_2}{C_1}+\frac{L_0+L_1}{C_2}\right)-\Delta\right)\\ \lambda_2&=-\left(\frac{1}{2\det L}\left(\frac{L_0+L_2}{C_1}+\frac{L_0+L_1}{C_2}\right)+\Delta\right)\end{aligned} \tag{7.3.27}$$

である。固有値 λ_1，λ_2 に属する固有ベクトル $\boldsymbol{p}_1$，$\boldsymbol{p}_2$ は

$$\boldsymbol{p}_1=\begin{bmatrix}u\\v\end{bmatrix} \qquad \boldsymbol{p}_2=\begin{bmatrix}-v\\u\end{bmatrix} \tag{7.3.28}$$

ととれる。ここで,

$$u = \sqrt{\frac{1}{2}\left(1 + \frac{\delta}{\Delta}\right)} \qquad v = \sqrt{\frac{1}{2}\left(1 - \frac{\delta}{\Delta}\right)} \tag{7.3.29}$$

である。
(2)$\{\boldsymbol{p}_1, \boldsymbol{p}_2\}$ は正規直交基底であるから，その双対基底は $\{\boldsymbol{p}_1^\dagger, \boldsymbol{p}_2^\dagger\}$ である。したがって，λ_1，λ_2，$\boldsymbol{p}_1$，$\boldsymbol{p}_2$ を用いると，A のスペクトル分解は

$$A = \lambda_1 \boldsymbol{p}_1 \boldsymbol{p}_1^\dagger + \lambda_2 \boldsymbol{p}_2 \boldsymbol{p}_2^\dagger \tag{7.3.30}$$

となる。
(3) 完全性関係 $I_2 = \boldsymbol{p}_1\boldsymbol{p}_1^\dagger + \boldsymbol{p}_2\boldsymbol{p}_2^\dagger$ および $j_1 = \boldsymbol{p}_1^\dagger \boldsymbol{J}$，$j_2 = \boldsymbol{p}_2^\dagger \boldsymbol{J}$ より $\boldsymbol{J} = I_2\boldsymbol{J} = \boldsymbol{p}_1\boldsymbol{p}_1^\dagger\boldsymbol{J} + \boldsymbol{p}_2\boldsymbol{p}_2^\dagger\boldsymbol{J} = j_1\boldsymbol{p}_1 + j_2\boldsymbol{p}_2$ であるから, $\ddot{\boldsymbol{J}} = \ddot{j}_1\boldsymbol{p}_1 + \ddot{j}_2\boldsymbol{p}_2$ と表せる。一方, A のスペクトル分解 (7.3.30) を用いると $A\boldsymbol{J} = \lambda_1\boldsymbol{p}_1\boldsymbol{p}_1^\dagger\boldsymbol{J} + \lambda_2\boldsymbol{p}_2\boldsymbol{p}_2^\dagger\boldsymbol{J} = \lambda_1 j_1\boldsymbol{p}_1 + \lambda_2 j_2\boldsymbol{p}_2$ と表せる。したがって, これらの $\boldsymbol{p}_1$, $\boldsymbol{p}_2$ の係数を比較することにより, $\ddot{j}_1 = \lambda_1 j_1 = -\omega_1^2 j_1$, $\ddot{j}_2 = \lambda_2 j_2 = -\omega_2^2 j_2$ を得る。
(4)(7.3.26) の一般解は $j_1(t) = j_1(0)\cos\omega_1 t + \frac{\dot{j}_1(0)}{\omega_1}\sin\omega_1 t$，$j_2(t) = j_2(0)\cos\omega_2 t + \frac{\dot{j}_2(0)}{\omega_2}\sin\omega_2 t$ であるから，(7.3.25) の一般解は

$$\boldsymbol{I}(t) = \sqrt{C}(j_1(t)\boldsymbol{p}_1 + j_2(t)\boldsymbol{p}_2) \tag{7.3.31}$$

と書ける。したがって，(7.3.24) の一般解は

$$\begin{cases} I_1(t) = \sqrt{C_1}(u j_1(t) - v j_2(t)) \\ I_2(t) = \sqrt{C_2}(v j_1(t) + u j_2(t)) \end{cases} \tag{7.3.32}$$

である。初期条件 $j_1(0) = \boldsymbol{p}_1^\dagger\boldsymbol{J}(0)$, $j_2(0) = \boldsymbol{p}_2^\dagger\boldsymbol{J}(0)$, $\dot{j}_1(0) = \boldsymbol{p}_1^\dagger\dot{\boldsymbol{J}}(0)$, $\dot{j}_2(0) = \boldsymbol{p}_2^\dagger\dot{\boldsymbol{J}}(0)$ は $I_1(0)$，$I_2(0)$，$\dot{I}_1(0)$，$\dot{I}_2(0)$ を用いて,

$$\begin{aligned} j_1(0) &= \frac{u}{\sqrt{C_1}} I_1(0) + \frac{v}{\sqrt{C_2}} I_2(0) & j_2(0) &= -\frac{v}{\sqrt{C_1}} I_1(0) + \frac{u}{\sqrt{C_2}} I_2(0) \\ \dot{j}_1(0) &= \frac{u}{\sqrt{C_1}} \dot{I}_1(0) + \frac{v}{\sqrt{C_2}} \dot{I}_2(0) & \dot{j}_2(0) &= -\frac{v}{\sqrt{C_1}} \dot{I}_1(0) + \frac{u}{\sqrt{C_2}} \dot{I}_2(0) \end{aligned} \tag{7.3.33}$$

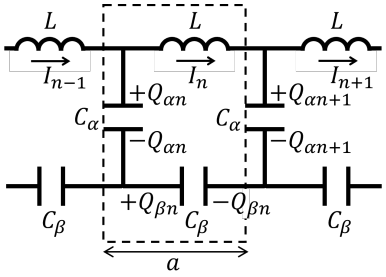
によって与えられる。

7.3.4 LC 伝送線路 (1)

例題 30. 図のようにコイルとコンデンサからなる LC 伝送線路の電気振動を周期的境界条件の下で考える。伝送線路は N 個のユニットからなり，1 つのユニット

の長さは a である。n 番目のユニットの電流を $I_n = I_n(t)$ とすると，I_n は連立微分方程式

$$L\ddot{I}_n = \frac{1}{C_\alpha} I_{n-1} - \left(\frac{2}{C_\alpha} + \frac{1}{C_\beta}\right) I_n + \frac{1}{C_\alpha} I_{n+1} \quad (7.3.34)$$



を満たす。あるいは，(7.3.34) は N 次元列ベクトル $\boldsymbol{I}$ と N 次エルミート行列 A を用いて

$$\ddot{\boldsymbol{I}} = A\boldsymbol{I} \qquad \boldsymbol{I} = \sum_n I_n \boldsymbol{e}_n \qquad I_n = \boldsymbol{e}_n^\dagger \boldsymbol{I} \tag{7.3.35}$$

と表せる。ここで，$\{\boldsymbol{e}_n \,|\, n = 1, \cdots, N\}$ は N 次元列ベクトル空間の標準基底である。以下の問いに答えよ。

(1) A は

$$A = \sum_n \left(\frac{1}{LC_\alpha} \boldsymbol{e}_n \boldsymbol{e}_{n-1}^\dagger - \left(\frac{2}{LC_\alpha} + \frac{1}{LC_\beta}\right) \boldsymbol{e}_n \boldsymbol{e}_n^\dagger + \frac{1}{LC_\alpha} \boldsymbol{e}_n \boldsymbol{e}_{n+1}^\dagger \right) \tag{7.3.36}$$

と表せることを示せ。

(2) 並進演算子 U を

$$U = \sum_n \boldsymbol{e}_n \boldsymbol{e}_{n+1}^\dagger \tag{7.3.37}$$

によって定義する。U はユニタリ行列であることを示せ。

(3) U の固有値・固有ベクトルは

$$\begin{gathered} \text{固有値：} e^{ika} \qquad \text{固有ベクトル：} \boldsymbol{l}_k = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_n e^{ikna} \boldsymbol{e}_n \\ \text{ここで，} k = \frac{2\pi}{Na} j \ (j = 0, \cdots, N-1) \text{ は波数ベクトル} \end{gathered} \tag{7.3.38}$$

で与えられることを示せ。

(4) U，A について

$$UAU^\dagger = A \qquad \text{つまり} \qquad [U, A] = O \tag{7.3.39}$$

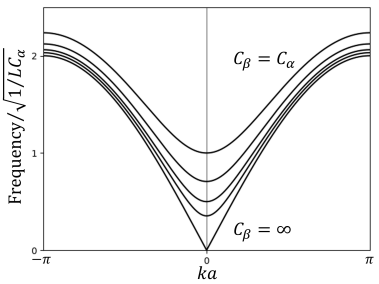
が成り立つことを示せ。

(5) A の固有値 λ_k および電気振動の振動数 $\omega_k = \sqrt{-\lambda_k}$ を求めよ。また，電気振動のスペクトルを図示せよ。ただし，波数ベクトル k は $-\pi/a \leq k \leq \pi/a$ にとるものとする。

[解答]
(1)(7.3.34) より，$\ddot{\boldsymbol{I}} = \sum_n \ddot{I}_n \boldsymbol{e}_n = \sum_n \boldsymbol{e}_n \ddot{I}_n = \sum_n \boldsymbol{e}_n(\frac{1}{LC_\alpha} I_{n-1} - (\frac{2}{LC_\alpha} + \frac{1}{LC_\beta}) I_n + \frac{1}{LC_\alpha} I_{n+1}) = \sum_n \boldsymbol{e}_n(\frac{1}{LC_\alpha}\boldsymbol{e}_{n-1}^\dagger \boldsymbol{I} - (\frac{2}{LC_\alpha} + \frac{1}{LC_\beta})\boldsymbol{e}_n^\dagger \boldsymbol{I} + \frac{1}{LC_\alpha}\boldsymbol{e}_{n+1}^\dagger \boldsymbol{I}) = \sum_n (\frac{1}{LC_\alpha}\boldsymbol{e}_n \boldsymbol{e}_{n-1}^\dagger - (\frac{2}{LC_\alpha} + \frac{1}{LC_\beta})\boldsymbol{e}_n \boldsymbol{e}_n^\dagger + \frac{1}{LC_\alpha}\boldsymbol{e}_n \boldsymbol{e}_{n+1}^\dagger)\boldsymbol{I}$ となる。したがって，(7.3.36) が示された。
(2)$U^\dagger = \sum_n \boldsymbol{e}_{n+1}\boldsymbol{e}_n^\dagger$ より，$UU^\dagger = \sum_n \sum_{n'} \boldsymbol{e}_n \boldsymbol{e}_{n+1}^\dagger \boldsymbol{e}_{n'+1}\boldsymbol{e}_{n'}^\dagger = \sum_n \sum_{n'} \boldsymbol{e}_n \delta_{nn'} \boldsymbol{e}_{n'}^\dagger = \sum_n \boldsymbol{e}_n \boldsymbol{e}_n^\dagger = I$ となる。同様に $U^\dagger U = I$ も示せる。したがって，$U^\dagger = U^{-1}$，つまり，U はユニタリ行列である。
(3)U は補足・計算例 32 で扱った巡回演算子 $\hat{C}^\dagger$ に対応するから，(3.3.79) の $\hat{C}^\dagger$ の固有値・固有ベクトルを適用することにより，(7.3.38) を得る。
(4)$A = \frac{1}{LC_\alpha}U^\dagger - (\frac{2}{LC_\alpha} + \frac{1}{LC_\beta})I + \frac{1}{LC_\alpha}U$ と書けるから，(7.3.39) は明らかに成り立つ。
(5)$[U, A] = O$ より，U と A は同時対角化可能である。U の固有値に重根はないから, U の固有ベクトル $\boldsymbol{l}_k$ は A の固有ベクトルにもなっている。実際, $A\boldsymbol{l}_k = (\frac{1}{LC_\alpha}U^\dagger - (\frac{2}{LC_\alpha} + \frac{1}{LC_\beta})I + \frac{1}{LC_\alpha}U)\boldsymbol{l}_k = \frac{1}{LC_\alpha}U^\dagger \boldsymbol{l}_k - (\frac{2}{LC_\alpha} + \frac{1}{LC_\beta})\boldsymbol{l}_k + \frac{1}{LC_\alpha}U\boldsymbol{l}_k = \frac{1}{LC_\alpha}e^{-ika}\boldsymbol{l}_k - (\frac{2}{LC_\alpha} + \frac{1}{LC_\beta})\boldsymbol{l}_k + \frac{1}{LC_\alpha}e^{ika}\boldsymbol{l}_k = (\frac{1}{LC_\alpha}e^{-ika} - (\frac{2}{LC_\alpha} + \frac{1}{LC_\beta}) + \frac{1}{LC_\alpha}e^{ika})\boldsymbol{l}_k = (-(\frac{2}{LC_\alpha} + \frac{1}{LC_\beta}) + \frac{2}{LC_\alpha}\cos ka)\boldsymbol{l}_k = -(\frac{4}{LC_\alpha}\sin^2\frac{ka}{2} + \frac{1}{LC_\beta})\boldsymbol{l}_k$ より，$\boldsymbol{l}_k$ は A の固有値 $\lambda_k = -(\frac{4}{LC_\alpha}\sin^2\frac{ka}{2} + \frac{1}{LC_\beta})$ に属する固有ベクトルである。したがって，電気振動の振動数 $\omega_k = \sqrt{-\lambda_k}$ は

$$\omega_k = \sqrt{\frac{4}{LC_\alpha}\sin^2\frac{ka}{2} + \frac{1}{LC_\beta}} \tag{7.3.40}$$

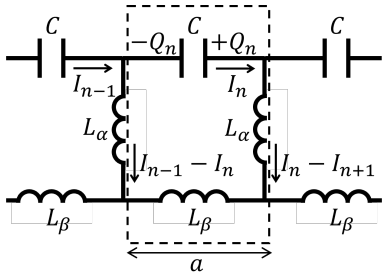
となる。$C_\beta/C_\alpha = 1, 2, 4, 8, \infty$ として電気振動のスペクトルを描くと図のようになる。



7.3.5 LC 伝送線路 (2)

例題 31. 図のようにコイルとコンデンサからなる LC 伝送線路の電気振動を周期的境界条件の下で考える。伝送線路は N 個のユニットからなり，1 つのユニットの長さは a である。n 番目のユニットの電流を $I_n = I_n(t)$ とすると，I_n は連立微分方程式

$$-L_\alpha \ddot{I}_{n-1} + (2L_\alpha + L_\beta)\ddot{I}_n - L_\alpha \ddot{I}_{n+1} = -\frac{1}{C} I_n \tag{7.3.41}$$



を満たす。あるいは，(7.3.41) は N 次元列ベクトル $\boldsymbol{I}$ と N 次エルミート行列 A の逆行列 A^{-1} を用いて

$$A^{-1}\ddot{\boldsymbol{I}} = \boldsymbol{I} \qquad \boldsymbol{I} = \sum_n I_n \boldsymbol{e}_n \qquad I_n = \boldsymbol{e}_n^\dagger \boldsymbol{I} \tag{7.3.42}$$

と表せる。ここで，$\{\boldsymbol{e}_n \,|\, n = 1, \cdots, N\}$ は N 次元列ベクトル空間の標準基底である。以下の問いに答えよ。

(1) A^{-1} は

$$A^{-1} = \sum_n \Big(L_\alpha C \boldsymbol{e}_n \boldsymbol{e}_{n-1}^\dagger - (2L_\alpha C + L_\beta C)\boldsymbol{e}_n \boldsymbol{e}_n^\dagger + L_\alpha C \boldsymbol{e}_n \boldsymbol{e}_{n+1}^\dagger \Big) \tag{7.3.43}$$

と表せることを示せ。

(2) 並進演算子 U を

$$U = \sum_n \boldsymbol{e}_n \boldsymbol{e}_{n+1}^\dagger \tag{7.3.44}$$

によって定義する。U はユニタリ行列であることを示せ。

(3) U の固有値・固有ベクトルは

$$\begin{aligned} &\text{固有値：} e^{ika} \qquad \text{固有ベクトル：} \boldsymbol{l}_k = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_n e^{ikna} \boldsymbol{e}_n \\ &\text{ここで，} k = \frac{2\pi}{Na} j \ (j = 0, \cdots, N-1) \text{ は波数ベクトル} \end{aligned} \tag{7.3.45}$$

で与えられることを示せ。

(4) U，A^{-1} について

$$UA^{-1}U^\dagger = A^{-1} \qquad \text{つまり} \qquad [U, A^{-1}] = O \tag{7.3.46}$$

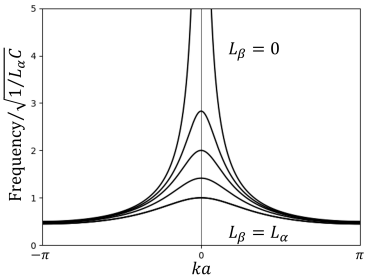
が成り立つことを示せ。

(5) A の固有値 λ_k および電気振動の振動数 $\omega_k = \sqrt{-\lambda_k}$ を求めよ。また，電気振動のスペクトルを図示せよ。ただし，波数ベクトル k は $-\pi/a \leq k \leq \pi/a$ にとるものとする。

[解答]
(1)(7.3.41) より，$\boldsymbol{I} = \sum_n I_n \boldsymbol{e}_n = \sum_n \boldsymbol{e}_n I_n = \sum_n \boldsymbol{e}_n (L_\alpha C \ddot{I}_{n-1} - (2L_\alpha C + L_\beta C)\ddot{I}_n + L_\alpha C \ddot{I}_{n+1}) = \sum_n \boldsymbol{e}_n (L_\alpha C \boldsymbol{e}_{n-1}^\dagger \ddot{\boldsymbol{I}} - (2L_\alpha C + L_\beta C)\boldsymbol{e}_n^\dagger \ddot{\boldsymbol{I}} + L_\alpha C \boldsymbol{e}_{n+1}^\dagger \ddot{\boldsymbol{I}}) = \sum_n (L_\alpha C \boldsymbol{e}_n \boldsymbol{e}_{n-1}^\dagger - (2L_\alpha C + L_\beta C)\boldsymbol{e}_n \boldsymbol{e}_n^\dagger + L_\alpha C \boldsymbol{e}_n \boldsymbol{e}_{n+1}^\dagger)\ddot{\boldsymbol{I}}$ となる。したがって，(7.3.43) が示された。
(2)$U^\dagger = \sum_n \boldsymbol{e}_{n+1}\boldsymbol{e}_n^\dagger$ より，$UU^\dagger = \sum_n \sum_{n'} \boldsymbol{e}_n \boldsymbol{e}_{n+1}^\dagger \boldsymbol{e}_{n'+1} \boldsymbol{e}_{n'}^\dagger = \sum_n \sum_{n'} \boldsymbol{e}_n \delta_{nn'} \boldsymbol{e}_{n'}^\dagger = \sum_n \boldsymbol{e}_n \boldsymbol{e}_n^\dagger = I$ となる。同様に $U^\dagger U = I$ も示せる。したがって，$U^\dagger = U^{-1}$，つまり，U はユニタリ行列である。
(3)U は補足・計算例 32 で扱った巡回演算子 $\hat{C}^\dagger$ に対応するから，(3.3.79) の $\hat{C}^\dagger$ の固有値・固有ベクトルを適用することにより，(7.3.45) を得る。
(4)$A^{-1} = L_\alpha C U^\dagger - (2L_\alpha C + L_\beta C)I + L_\alpha C U$ と書けるから，(7.3.46) は明らかに成り立つ。
(5)$[U, A^{-1}] = O$ より，U と A^{-1} は同時対角化可能である。U の固有値に重根はないから，U の固有ベクトル $\boldsymbol{l}_k$ は A^{-1} の固有ベクトルにもなっている。実際，$A^{-1}\boldsymbol{l}_k = (L_\alpha C U^\dagger - (2L_\alpha C + L_\beta C)I + L_\alpha C U)\boldsymbol{l}_k = L_\alpha C U^\dagger \boldsymbol{l}_k - (2L_\alpha C + L_\beta C)\boldsymbol{l}_k + L_\alpha C U \boldsymbol{l}_k = L_\alpha C e^{-ika}\boldsymbol{l}_k - (2L_\alpha C + L_\beta C)\boldsymbol{l}_k + L_\alpha C e^{ika}\boldsymbol{l}_k = (L_\alpha C e^{-ika} - (2L_\alpha C + L_\beta C) + L_\alpha C e^{ika})\boldsymbol{l}_k = -(2L_\alpha C + L_\beta C - 2L_\alpha C \cos ka)\boldsymbol{l}_k = -(4L_\alpha C \sin^2 \frac{ka}{2} + L_\beta C)\boldsymbol{l}_k$ より，$\boldsymbol{l}_k$ は A^{-1} の固有値 $1/\lambda_k = -(4L_\alpha C \sin^2 \frac{ka}{2} + L_\beta C)$ に属する固有ベクトルである。したがって，A の固有値 λ_k は $\lambda_k = -1/(4L_\alpha C \sin^2 \frac{ka}{2} + L_\beta C)$ であり，また，電気振動の振動数 $\omega_k = \sqrt{-\lambda_k}$ は

$$\omega_k = \frac{1}{\sqrt{4L_\alpha C \sin^2 \frac{ka}{2} + L_\beta C}} \tag{7.3.47}$$

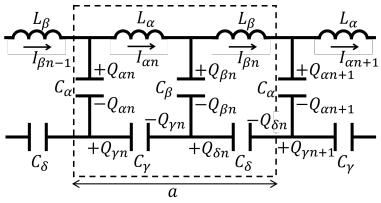
となる。$L_\beta/L_\alpha = 0, 1/8, 1/4, 1/2, 1$ として電気振動のスペクトルを描くと図のようになる。



7.3.6 LC 伝送線路 (3)

例題 32. 図のようにコイルとコンデンサからなる LC 伝送線路の電気振動を周期的境界条件の下で考える。伝送線路は N 個のユニットからなり，1 つのユニットの長さは a である。n 番目のユニットの状態を電流 $I_{\alpha n} = I_{\alpha n}(t)$，$I_{\beta n} = I_{\beta n}(t)$ によって表すと，$I_{\alpha n}$，$I_{\beta n}$ は連立微分方程式

$$
\begin{cases}
L_\alpha \ddot{I}_{\alpha n} = \frac{1}{C_\alpha} I_{\beta n-1} - \left(\frac{1}{C_\alpha} + \frac{1}{C_\beta} + \frac{1}{C_\gamma}\right) I_{\alpha n} + \frac{1}{C_\beta} I_{\beta n} \\
L_\beta \ddot{I}_{\beta n} = \frac{1}{C_\beta} I_{\alpha n} - \left(\frac{1}{C_\alpha} + \frac{1}{C_\beta} + \frac{1}{C_\delta}\right) I_{\beta n} + \frac{1}{C_\alpha} I_{\alpha n+1}
\end{cases}
\tag{7.3.48}
$$



を満たす。あるいは，(7.3.48) は $2N$ 次元列ベクトル
$\boldsymbol{J}$ と $2N$ 次エルミート行列 A を用いて

$$
\ddot{\boldsymbol{J}} = A\boldsymbol{J} \qquad \boldsymbol{J} = \sum_n \left(J_{\alpha n}\boldsymbol{e}_{\alpha n} + J_{\beta n}\boldsymbol{e}_{\beta n}\right) \qquad J_{\alpha n} = \boldsymbol{e}_{\alpha n}^\dagger \boldsymbol{J} \qquad J_{\beta n} = \boldsymbol{e}_{\beta n}^\dagger \boldsymbol{J}
\tag{7.3.49}
$$

と表せる。ここで，$J_{\alpha n} = \sqrt{L_\alpha} I_{\alpha n}$，$J_{\beta n} = \sqrt{L_\beta} I_{\beta n}$ であり，また，$\{\boldsymbol{e}_{\alpha n}, \boldsymbol{e}_{\beta n} \,|\, n = 1, \cdots, N\}$ は $2N$ 次元列ベクトル空間の標準基底である。以下の問いに答えよ。

(1) A は

$$
\begin{aligned}
A = \sum_n \Bigg(& \frac{1}{\sqrt{L_\alpha L_\beta} C_\alpha} \boldsymbol{e}_{\alpha n} \boldsymbol{e}_{\beta n-1}^\dagger - \frac{1}{L_\alpha}\left(\frac{1}{C_\alpha} + \frac{1}{C_\beta} + \frac{1}{C_\gamma}\right) \boldsymbol{e}_{\alpha n} \boldsymbol{e}_{\alpha n}^\dagger + \frac{1}{\sqrt{L_\alpha L_\beta} C_\beta} \boldsymbol{e}_{\alpha n} \boldsymbol{e}_{\beta n}^\dagger \\
& + \frac{1}{\sqrt{L_\alpha L_\beta} C_\beta} \boldsymbol{e}_{\beta n} \boldsymbol{e}_{\alpha n}^\dagger - \frac{1}{L_\beta}\left(\frac{1}{C_\alpha} + \frac{1}{C_\beta} + \frac{1}{C_\delta}\right) \boldsymbol{e}_{\beta n} \boldsymbol{e}_{\beta n}^\dagger + \frac{1}{\sqrt{L_\alpha L_\beta} C_\alpha} \boldsymbol{e}_{\beta n} \boldsymbol{e}_{\alpha n+1}^\dagger \Bigg)
\end{aligned}
\tag{7.3.50}
$$

と表せることを示せ。

(2) 並進演算子 U を

$$
U = \sum_n \left(\boldsymbol{e}_{\alpha n} \boldsymbol{e}_{\alpha n+1}^\dagger + \boldsymbol{e}_{\beta n} \boldsymbol{e}_{\beta n+1}^\dagger\right)
\tag{7.3.51}
$$

によって定義する。U はユニタリ行列であることを示せ。

(3) U の固有値・固有ベクトルは

$$
\text{固有値：} e^{ika} \text{ (重根)} \qquad \text{固有ベクトル：} \begin{cases} \boldsymbol{l}_{\alpha k} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_n e^{ikna} \boldsymbol{e}_{\alpha n} \\ \boldsymbol{l}_{\beta k} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_n e^{ikna} \boldsymbol{e}_{\beta n} \end{cases}
$$

ここで，$k = \dfrac{2\pi}{Na} j \ (j = 0, \cdots, N-1)$ は波数ベクトル

(7.3.52)

で与えられることを示せ。

(4) U，A について

$$UAU^\dagger = A \qquad \text{つまり} \qquad [\,U, A\,] = O \tag{7.3.53}$$

が成り立つことを示せ。

(5) A の固有値 $\lambda_{\pm k}$ および電気振動の振動数 $\omega_{\pm k} = \sqrt{-\lambda_{\pm k}}$ を求めよ。また，電気振動のスペクトルを図示せよ。ただし，波数ベクトル k は $-\pi/a \le k \le \pi/a$ にとるものとする。

[解答]

(1)(7.3.48) より，$\ddot{J}_{\alpha n} = \frac{1}{\sqrt{L_\alpha L_\beta}C_\alpha}J_{\beta n-1} - \frac{1}{L_\alpha}(\frac{1}{C_\alpha}+\frac{1}{C_\beta}+\frac{1}{C_\gamma})J_{\alpha n} + \frac{1}{\sqrt{L_\alpha L_\beta}C_\beta}J_{\beta n}$，$\ddot{J}_{\beta n} = \frac{1}{\sqrt{L_\alpha L_\beta}C_\beta}J_{\alpha n} - \frac{1}{L_\beta}(\frac{1}{C_\alpha}+\frac{1}{C_\beta}+\frac{1}{C_\delta})J_{\beta n} + \frac{1}{\sqrt{L_\alpha L_\beta}C_\alpha}J_{\alpha n+1}$ であるから，$\ddot{\boldsymbol{J}} = \sum_n(\ddot{J}_{\alpha n}\boldsymbol{e}_{\alpha n} + \ddot{J}_{\beta n}\boldsymbol{e}_{\beta n}) = \sum_n(\boldsymbol{e}_{\alpha n}\ddot{J}_{\alpha n} + \boldsymbol{e}_{\beta n}\ddot{J}_{\beta n}) = \sum_n(\boldsymbol{e}_{\alpha n}(\frac{1}{\sqrt{L_\alpha L_\beta}C_\alpha}J_{\beta n-1} - \frac{1}{L_\alpha}(\frac{1}{C_\alpha}+\frac{1}{C_\beta}+\frac{1}{C_\gamma})J_{\alpha n} + \frac{1}{\sqrt{L_\alpha L_\beta}C_\beta}J_{\beta n}) + \boldsymbol{e}_{\beta n}(\frac{1}{\sqrt{L_\alpha L_\beta}C_\beta}J_{\alpha n} - \frac{1}{L_\beta}(\frac{1}{C_\alpha}+\frac{1}{C_\beta}+\frac{1}{C_\delta})J_{\beta n} + \frac{1}{\sqrt{L_\alpha L_\beta}C_\alpha}J_{\alpha n+1})) = \sum_n(\boldsymbol{e}_{\alpha n}(\frac{1}{\sqrt{L_\alpha L_\beta}C_\alpha}\boldsymbol{e}^\dagger_{\beta n-1}\boldsymbol{J} - \frac{1}{L_\alpha}(\frac{1}{C_\alpha}+\frac{1}{C_\beta}+\frac{1}{C_\gamma})\boldsymbol{e}^\dagger_{\alpha n}\boldsymbol{J} + \frac{1}{\sqrt{L_\alpha L_\beta}C_\beta}\boldsymbol{e}^\dagger_{\beta n}\boldsymbol{J}) + \boldsymbol{e}_{\beta n}(\frac{1}{\sqrt{L_\alpha L_\beta}C_\beta}\boldsymbol{e}^\dagger_{\alpha n}\boldsymbol{J} - \frac{1}{L_\beta}(\frac{1}{C_\alpha}+\frac{1}{C_\beta}+\frac{1}{C_\delta})\boldsymbol{e}^\dagger_{\beta n}\boldsymbol{J} + \frac{1}{\sqrt{L_\alpha L_\beta}C_\alpha}\boldsymbol{e}^\dagger_{\alpha n+1}\boldsymbol{J})) = \sum_n(\frac{1}{\sqrt{L_\alpha L_\beta}C_\alpha}\boldsymbol{e}_{\alpha n}\boldsymbol{e}^\dagger_{\beta n-1} - \frac{1}{L_\alpha}(\frac{1}{C_\alpha}+\frac{1}{C_\beta}+\frac{1}{C_\gamma})\boldsymbol{e}_{\alpha n}\boldsymbol{e}^\dagger_{\alpha n} + \frac{1}{\sqrt{L_\alpha L_\beta}C_\beta}\boldsymbol{e}_{\alpha n}\boldsymbol{e}^\dagger_{\beta n} + \frac{1}{\sqrt{L_\alpha L_\beta}C_\beta}\boldsymbol{e}_{\beta n}\boldsymbol{e}^\dagger_{\alpha n} - \frac{1}{L_\beta}(\frac{1}{C_\alpha}+\frac{1}{C_\beta}+\frac{1}{C_\delta})\boldsymbol{e}_{\beta n}\boldsymbol{e}^\dagger_{\beta n} + \frac{1}{\sqrt{L_\alpha L_\beta}C_\alpha}\boldsymbol{e}_{\beta n}\boldsymbol{e}^\dagger_{\alpha n+1})\boldsymbol{J}$ となる。したがって，(7.3.50) が示された。

(2)$U^\dagger = \sum_n(\boldsymbol{e}_{\alpha n+1}\boldsymbol{e}^\dagger_{\alpha n} + \boldsymbol{e}_{\beta n+1}\boldsymbol{e}^\dagger_{\beta n})$ より，$UU^\dagger = \sum_n\sum_{n'}(\boldsymbol{e}_{\alpha n}\boldsymbol{e}^\dagger_{\alpha n+1} + \boldsymbol{e}_{\beta n}\boldsymbol{e}^\dagger_{\beta n+1})(\boldsymbol{e}_{\alpha n'+1}\boldsymbol{e}^\dagger_{\alpha n'} + \boldsymbol{e}_{\beta n'+1}\boldsymbol{e}^\dagger_{\beta n'}) = \sum_n(\boldsymbol{e}_{\alpha n}\boldsymbol{e}^\dagger_{\alpha n} + \boldsymbol{e}_{\beta n}\boldsymbol{e}^\dagger_{\beta n}) = I$ となる。同様に $U^\dagger U = I$ も示せる。したがって，$U^\dagger = U^{-1}$，つまり，U はユニタリ行列である。

(3)U は補足・計算例 32 で扱った巡回演算子 $\hat{C}^\dagger$ に対応するから，電流 α と電流 β のそれぞれについて (3.3.79) の $\hat{C}^\dagger$ の固有値・固有ベクトルを適用することにより，(7.3.52) を得る。

(4)$U\boldsymbol{e}_{\tau n}\boldsymbol{e}^\dagger_{\tau' n'}U^\dagger = \boldsymbol{e}_{\tau n-1}\boldsymbol{e}^\dagger_{\tau' n'-1}\,(\tau, \tau' = \alpha, \beta)$ となるから，(7.3.53) は明らかに成り立つ。

(5)$[\,U, A\,] = O$ より，U と A は同時対角化可能である。U の固有値 e^{ika} は重根であるか，ら j2 次元の部分空間 $W_k = \mathrm{span}(\boldsymbol{l}_{\alpha k}, \boldsymbol{l}_{\beta k})$ における A の固有値問題を解けばよい。(7.3.50) を $\boldsymbol{l}_{\alpha k}$，$\boldsymbol{l}_{\beta k}$ に作用させると

$$\begin{cases} A\boldsymbol{l}_{\alpha k} = -\frac{1}{L_\alpha}(\frac{1}{C_\alpha}+\frac{1}{C_\beta}+\frac{1}{C_\gamma})\boldsymbol{l}_{\alpha k} + \frac{1}{\sqrt{L_\alpha L_\beta}C_\beta}\boldsymbol{l}_{\beta k} + \frac{1}{\sqrt{L_\alpha L_\beta}C_\alpha}e^{ika}\boldsymbol{l}_{\beta k} = -a\,\boldsymbol{l}_{\alpha k} + \Delta^*_k\boldsymbol{l}_{\beta k} \\ A\boldsymbol{l}_{\beta k} = \frac{1}{\sqrt{L_\alpha L_\beta}C_\beta}\boldsymbol{l}_{\alpha k} + \frac{1}{\sqrt{L_\alpha L_\beta}C_\alpha}e^{-ika}\boldsymbol{l}_{\alpha k} - \frac{1}{L_\beta}(\frac{1}{C_\alpha}+\frac{1}{C_\beta}+\frac{1}{C_\delta})\boldsymbol{l}_{\beta k} = \Delta_k\boldsymbol{l}_{\alpha k} - b\,\boldsymbol{l}_{\beta k} \end{cases} \tag{7.3.54}$$

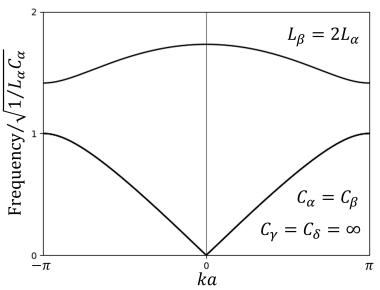
となる。ここで，$a = \frac{1}{L_\alpha}(\frac{1}{C_\alpha} + \frac{1}{C_\beta} + \frac{1}{C_\gamma})$，$b = \frac{1}{L_\beta}(\frac{1}{C_\alpha} + \frac{1}{C_\beta} + \frac{1}{C_\delta})$，$\Delta_k = \frac{1}{\sqrt{L_\alpha L_\beta}}(\frac{1}{C_\beta} + \frac{1}{C_\alpha}e^{-ika})$ とおいた。したがって，W_k における正規直交基底 $\{\boldsymbol{l}_{\alpha k}, \boldsymbol{l}_{\beta k}\}$ による A の行列表現 A_k は

$$A_k = \begin{bmatrix} -a & \Delta_k \\ \Delta_k^* & -b \end{bmatrix} \tag{7.3.55}$$

となる。A_k の固有値は $\lambda_{\pm k} = -(\frac{1}{2}(a+b) \pm \sqrt{(\frac{1}{2}(a-b))^2 + |\Delta_k|^2})$ である。ここで，$|\Delta_k|^2 = \frac{1}{L_\alpha L_\beta}((\frac{1}{C_\beta} + \frac{1}{C_\alpha}\cos ka)^2 + \frac{1}{C_\alpha^2}\sin^2 ka)$ である。したがって，電気振動の振動数 $\omega_{\pm k} = \sqrt{-\lambda_{\pm k}}$ は

$$\omega_{\pm k} = \sqrt{\frac{1}{2}(a+b) \pm \sqrt{\left(\frac{1}{2}(a-b)\right)^2 + \frac{1}{L_\alpha L_\beta}\left(\left(\frac{1}{C_\beta} + \frac{1}{C_\alpha}\cos ka\right)^2 + \frac{1}{C_\alpha^2}\sin^2 ka\right)}} \tag{7.3.56}$$

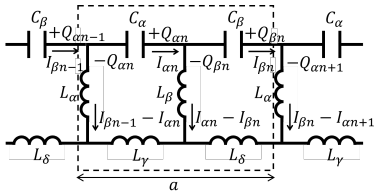
となる。$L_\beta/L_\alpha = 2$，$C_\beta/C_\alpha = 1$，$C_\gamma/C_\alpha = C_\delta/C_\alpha = \infty$ として電気振動のスペクトルを描くと図のようになる。



7.3.7 LC 伝送線路 (4)

例題 33. 図のようにコイルとコンデンサからなる LC 伝送線路の電気振動を周期的境界条件の下で考える。伝送線路は N 個のユニットからなり，1 つのユニットの長さは a である。n 番目のユニットの状態を電流 $I_{\alpha n} = I_{\alpha n}(t)$，$I_{\beta n} = I_{\beta n}(t)$ によって表すと，$I_{\alpha n}$，$I_{\beta n}$ は連立微分方程式

$$
\begin{cases}
L_\alpha \ddot{I}_{\beta n-1} - (L_\alpha + L_\beta + L_\gamma)\ddot{I}_{\alpha n} + L_\beta \ddot{I}_{\beta n} = \frac{1}{C_\alpha} I_{\alpha n} \\
L_\beta \ddot{I}_{\alpha n} - (L_\alpha + L_\beta + L_\delta)\ddot{I}_{\beta n} + L_\alpha \ddot{I}_{\alpha n+1} = \frac{1}{C_\beta} I_{\beta n}
\end{cases}
\tag{7.3.57}
$$



を満たす。あるいは，(7.3.57) は $2N$ 次元列ベクトル
$\boldsymbol{J}$ と $2N$ 次エルミート行列 A の逆行列 A^{-1} を用いて

$$
A^{-1}\ddot{\boldsymbol{J}} = \boldsymbol{J} \qquad \boldsymbol{J} = \sum_n (J_{\alpha n}\boldsymbol{e}_{\alpha n} + J_{\beta n}\boldsymbol{e}_{\beta n}) \qquad J_{\alpha n} = \boldsymbol{e}_{\alpha n}^\dagger \boldsymbol{J} \qquad J_{\beta n} = \boldsymbol{e}_{\beta n}^\dagger \boldsymbol{J}
\tag{7.3.58}
$$

と表せる。ここで，$J_{\alpha n} = \frac{1}{\sqrt{C_\alpha}} I_{\alpha n}$，$J_{\beta n} = \frac{1}{\sqrt{C_\beta}} I_{\beta n}$ であり，また，$\{\boldsymbol{e}_{\alpha n}, \boldsymbol{e}_{\beta n} \,|\, n = 1, \cdots, N\}$ は $2N$ 次元列ベクトル空間の標準基底である。以下の問いに答えよ。

(1) A^{-1} は

$$
\begin{aligned}
A^{-1} = \sum_n \Big(& L_\alpha \sqrt{C_\alpha C_\beta}\boldsymbol{e}_{\alpha n}\boldsymbol{e}_{\beta n-1}^\dagger - (L_\alpha + L_\beta + L_\gamma) C_\alpha \boldsymbol{e}_{\alpha n}\boldsymbol{e}_{\alpha n}^\dagger + L_\beta \sqrt{C_\alpha C_\beta}\boldsymbol{e}_{\alpha n}\boldsymbol{e}_{\beta n}^\dagger \\
& + L_\beta \sqrt{C_\alpha C_\beta}\boldsymbol{e}_{\beta n}\boldsymbol{e}_{\alpha n}^\dagger - (L_\alpha + L_\beta + L_\delta) C_\beta \boldsymbol{e}_{\beta n}\boldsymbol{e}_{\beta n}^\dagger + L_\alpha \sqrt{C_\alpha C_\beta}\boldsymbol{e}_{\beta n}\boldsymbol{e}_{\alpha n+1}^\dagger \Big)
\end{aligned}
\tag{7.3.59}
$$

と表せることを示せ。

(2) 並進演算子 U を

$$
U = \sum_n \left(\boldsymbol{e}_{\alpha n}\boldsymbol{e}_{\alpha n+1}^\dagger + \boldsymbol{e}_{\beta n}\boldsymbol{e}_{\beta n+1}^\dagger \right)
\tag{7.3.60}
$$

によって定義する。U はユニタリ行列であることを示せ。

(3) U の固有値・固有ベクトルは

$$
\text{固有値：} e^{ika} \text{ (重根)} \qquad \text{固有ベクトル：} \begin{cases} \boldsymbol{l}_{\alpha k} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_n e^{ikna}\boldsymbol{e}_{\alpha n} \\ \boldsymbol{l}_{\beta k} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_n e^{ikna}\boldsymbol{e}_{\beta n} \end{cases}
$$

ここで，$k = \dfrac{2\pi}{Na} j \ (j = 0, \cdots, N-1)$ は波数ベクトル

(7.3.61)

で与えられることを示せ。

(4) U，A^{-1} について

$$UA^{-1}U^{\dagger} = A^{-1} \qquad \text{つまり} \qquad [\,U, A^{-1}\,] = O \tag{7.3.62}$$

が成り立つことを示せ。

(5) A の固有値 $\lambda_{\pm k}$ および電気振動の振動数 $\omega_{\pm k} = \sqrt{-\lambda_{\pm k}}$ を求めよ。また，電気振動のスペクトルを図示せよ。ただし，波数ベクトル k は $-\pi/a \leq k \leq \pi/a$ にとるものとする。

[解答]
(1)(7.3.57) より，$J_{\alpha n} = L_\alpha\sqrt{C_\alpha C_\beta}\ddot{J}_{\beta n-1} - (L_\alpha + L_\beta + L_\gamma)C_\alpha\ddot{J}_{\alpha n} + L_\beta\sqrt{C_\alpha C_\beta}\ddot{J}_{\beta n}$，$J_{\beta n} = L_\beta\sqrt{C_\alpha C_\beta}\ddot{J}_{\alpha n} - (L_\alpha + L_\beta + L_\delta)C_\beta\ddot{J}_{\beta n} + L_\alpha\sqrt{C_\alpha C_\beta}\ddot{J}_{\alpha n+1}$ であるから，$\boldsymbol{J} = \sum_n(J_{\alpha n}\boldsymbol{e}_{\alpha n} + J_{\beta n}\boldsymbol{e}_{\beta n}) = \sum_n(\boldsymbol{e}_{\alpha n}J_{\alpha n} + \boldsymbol{e}_{\beta n}J_{\beta n}) = \sum_n(\boldsymbol{e}_{\alpha n}(L_\alpha\sqrt{C_\alpha C_\beta}\ddot{J}_{\beta n-1} - (L_\alpha+L_\beta+L_\gamma)C_\alpha\ddot{J}_{\alpha n}+L_\beta\sqrt{C_\alpha C_\beta}\ddot{J}_{\beta n})+\boldsymbol{e}_{\beta n}(L_\beta\sqrt{C_\alpha C_\beta}\ddot{J}_{\alpha n}-(L_\alpha+L_\beta+L_\delta)C_\beta\ddot{J}_{\beta n}+L_\alpha\sqrt{C_\alpha C_\beta}\ddot{J}_{\alpha n+1}) = \sum_n(\boldsymbol{e}_{\alpha n}(L_\alpha\sqrt{C_\alpha C_\beta}\boldsymbol{e}^{\dagger}_{\beta n-1}\ddot{\boldsymbol{J}}-(L_\alpha+L_\beta+L_\gamma)C_\alpha\boldsymbol{e}^{\dagger}_{\alpha n}\ddot{\boldsymbol{J}}+L_\beta\sqrt{C_\alpha C_\beta}\boldsymbol{e}^{\dagger}_{\beta n}\ddot{\boldsymbol{J}})+\boldsymbol{e}_{\beta n}(L_\beta\sqrt{C_\alpha C_\beta}\boldsymbol{e}^{\dagger}_{\alpha n}\ddot{\boldsymbol{J}}-(L_\alpha+L_\beta+L_\delta)C_\beta\boldsymbol{e}^{\dagger}_{\beta n}\ddot{\boldsymbol{J}}+L_\alpha\sqrt{C_\alpha C_\beta}\boldsymbol{e}^{\dagger}_{\alpha n+1}\ddot{\boldsymbol{J}})) = \sum_n(L_\alpha\sqrt{C_\alpha C_\beta}\boldsymbol{e}_{\alpha n}\boldsymbol{e}^{\dagger}_{\beta n-1} - (L_\alpha + L_\beta + L_\gamma)C_\alpha\boldsymbol{e}_{\alpha n}\boldsymbol{e}^{\dagger}_{\alpha n} + L_\beta\sqrt{C_\alpha C_\beta}\boldsymbol{e}_{\alpha n}\boldsymbol{e}^{\dagger}_{\beta n} + L_\beta\sqrt{C_\alpha C_\beta}\boldsymbol{e}_{\beta n}\boldsymbol{e}^{\dagger}_{\alpha n} - (L_\alpha + L_\beta + L_\delta)C_\beta\boldsymbol{e}_{\beta n}\boldsymbol{e}^{\dagger}_{\beta n} + L_\alpha\sqrt{C_\alpha C_\beta}\boldsymbol{e}_{\beta n}\boldsymbol{e}^{\dagger}_{\alpha n+1})\ddot{\boldsymbol{J}}$ となる。したがって，(7.3.59) が示された。
(2)$U^{\dagger} = \sum_n(\boldsymbol{e}_{\alpha n+1}\boldsymbol{e}^{\dagger}_{\alpha n}+\boldsymbol{e}_{\beta n+1}\boldsymbol{e}^{\dagger}_{\beta n})$ より，$UU^{\dagger} = \sum_n\sum_{n'}(\boldsymbol{e}_{\alpha n}\boldsymbol{e}^{\dagger}_{\alpha n+1}+\boldsymbol{e}_{\beta n}\boldsymbol{e}^{\dagger}_{\beta n+1})(\boldsymbol{e}_{\alpha n'+1}\boldsymbol{e}^{\dagger}_{\alpha n'}+\boldsymbol{e}_{\beta n'+1}\boldsymbol{e}^{\dagger}_{\beta n'}) = \sum_n(\boldsymbol{e}_{\alpha n}\boldsymbol{e}^{\dagger}_{\alpha n} + \boldsymbol{e}_{\beta n}\boldsymbol{e}^{\dagger}_{\beta n}) = I$ となる。同様に $U^{\dagger}U = I$ も示せる。したがって，$U^{\dagger} = U^{-1}$，つまり，U はユニタリ行列である。
(3)U は補足・計算例 32 で扱った巡回演算子 $\hat{C}^{\dagger}$ に対応するから，電流 α と電流 β のそれぞれについて (3.3.79) の $\hat{C}^{\dagger}$ の固有値・固有ベクトルを適用することにより，(7.3.61) を得る。
(4)$U\boldsymbol{e}_{\tau n}\boldsymbol{e}^{\dagger}_{\tau' n'}U^{\dagger} = \boldsymbol{e}_{\tau n-1}\boldsymbol{e}^{\dagger}_{\tau' n'-1}\,(\tau, \tau' = \alpha, \beta)$ となるから，(7.3.62) は明らかに成り立つ。
(5)$[\,U, A^{-1}\,] = O$ より，U と A^{-1} は同時対角化可能である。U の固有値 e^{ika} は重根であるから，2 次元の部分空間 $W_k = \mathrm{span}(\boldsymbol{l}_{\alpha k}, \boldsymbol{l}_{\beta k})$ における A^{-1} の固有値問題を解けばよい。(7.3.59) を $\boldsymbol{l}_{\alpha k}$，$\boldsymbol{l}_{\beta k}$ に作用させると

$$\begin{cases} A^{-1}\boldsymbol{l}_{\alpha k} = L_\beta\sqrt{C_\alpha C_\beta}\boldsymbol{l}_{\beta k} - (L_\alpha + L_\beta + L_\gamma)C_\alpha\boldsymbol{l}_{\alpha k} + L_\alpha\sqrt{C_\alpha C_\beta}e^{-ika}\boldsymbol{l}_{\beta k} = -a\,\boldsymbol{l}_{\alpha k} + \Delta^*_k\boldsymbol{l}_{\beta k} \\ A^{-1}\boldsymbol{l}_{\beta k} = L_\alpha\sqrt{C_\alpha C_\beta}e^{ika}\boldsymbol{l}_{\alpha k} - (L_\alpha + L_\beta + L_\delta)C_\beta\boldsymbol{l}_{\beta k} + L_\beta\sqrt{C_\alpha C_\beta}\boldsymbol{l}_{\alpha k} = \Delta_k\boldsymbol{l}_{\alpha k} - b\,\boldsymbol{l}_{\beta k} \end{cases} \tag{7.3.63}$$

となる。ここで，$a = (L_\alpha + L_\beta + L_\gamma)C_\alpha$，$b = (L_\alpha + L_\beta + L_\delta)C_\beta$，$\Delta_k = (L_\beta + L_\alpha e^{ika})\sqrt{C_\alpha C_\beta}$ とおいた。したがって，W_k における正規直交基底 $\{\boldsymbol{l}_{\alpha k}, \boldsymbol{l}_{\beta k}\}$ によ

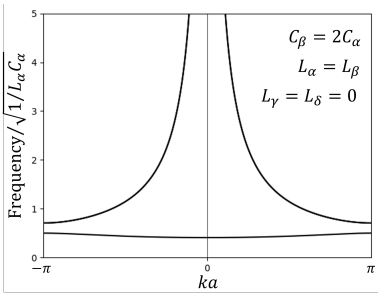
る A^{-1} の行列表現 A_k^{-1} は

$$A_k^{-1} = \begin{bmatrix} -a & \Delta_k \\ \Delta_k^* & -b \end{bmatrix} \tag{7.3.64}$$

となる。A_k^{-1} の固有値は $1/\lambda_{\pm k} = -(\frac{1}{2}(a+b) \pm \sqrt{(\frac{1}{2}(a-b))^2 + |\Delta_k|^2})$ である。ここで，$|\Delta_k|^2 = ((L_\beta + L_\alpha \cos ka)^2 + L_\alpha^2 \sin^2 ka)C_\alpha C_\beta$ である。したがって，電気振動の振動数 $\omega_{\pm k} = \sqrt{-\lambda_{\pm k}}$ は

$$\omega_{\pm k} = \left(\frac{1}{2}(a+b) \pm \sqrt{\left(\frac{1}{2}(a-b)\right)^2 + \left((L_\beta + L_\alpha \cos ka)^2 + L_\alpha^2 \sin^2 ka\right) C_\alpha C_\beta} \right)^{-\frac{1}{2}} \tag{7.3.65}$$

となる。$C_\beta/C_\alpha = 2$，$L_\beta/L_\alpha = 1$，$L_\gamma/L_\alpha = L_\delta/L_\alpha = 0$ として電気振動のスペクトルを描くと図のようになる。



7.3.8 静電ポテンシャル (矩形領域)

例題 34. 真空中において静電ポテンシャルを求める問題を考える。系は z 方向に一様であるとし，xy 平面上の矩形領域 $\Omega = \{(x,y)\,|\,0 \le x \le a, 0 \le y \le b\}$ における静電ポテンシャルを $u(x,y)$ とする。$y = 0$，$y = b$ における境界条件 $u(x,0)$, $u(x,b)$ $(0 \le x \le a)$ の下で，$u(x,y)$ はラプラス方程式

$$\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2}\right) u(x,y) = 0 \qquad u(0,y) = 0,\ u(a,y) = 0\ (0 \le y \le b) \tag{7.3.66}$$

を満たすとする。x を変数とする関数の関数空間 V_x において，(7.3.66) は $u(x,y) = \langle x|u(y)\rangle$ なる関数 $|u(y)\rangle$ とエルミート演算子 $\hat{L}_x$ を用いて

$$\left(-\hat{L}_x + \frac{\partial^2}{\partial y^2}\right)|u(y)\rangle = 0 \qquad \hat{L}_x = \int_0^a dx\ |x\rangle \left(-\frac{\partial^2}{\partial x^2}\right) \langle x| \tag{7.3.67}$$

と表せる。ここで，$|x\rangle$ は V_x のデルタ関数 $\langle x|x'\rangle = \delta(x-x')$ である。以下の問いに答えよ。

(1) $\hat{L}_x$ の固有値 λ_n および正規化された固有関数 $X_n(x) = \langle x|X_n\rangle$ を求めよ。

(2) $\hat{L}_x$ のスペクトル分解を求めよ。

(3) $u_n(y) = \langle X_n|u(y)\rangle$，$k_n = \sqrt{\lambda_n}$ とおくと，$u_n(y)$ は

$$\frac{\partial^2}{\partial y^2}u_n(y) = k_n^2 u_n(y) \tag{7.3.68}$$

を満たすことを示せ。

(4) (7.3.66) の一般解を求めよ。

(5) $y = 0, y = b$ における境界条件を $u(x,0) = V_1 \sin(\pi x/a), u(x,b) = V_2 \sin(\pi x/a)$ とするとき $u(x,y)$ を求めよ。

[解答]
(1) $\langle x|\hat{L}_x|X\rangle = -\partial_x^2 X(x) = \lambda X(x)$ の一般解は $k = \sqrt{\lambda}$ とおくと $X(x) = C\sin(kx) + D\cos(kx)$ である。$X(0) = 0$ より $D = 0$ である。さらに，$X(a) = 0$ より $k = \frac{n\pi}{a}\,(n = 1, 2, \cdots)$ である。したがって，$\hat{L}_x$ の固有値は $\lambda_n = k_n^2 = \frac{n^2\pi^2}{a^2}$ である。C は $X_n(x)$ が正規化されるように決める。$\int_0^a dx\,|C\sin(k_n x)|^2 = \frac{a}{2}|C|^2 = 1$ より，$C = \sqrt{\frac{2}{a}}$ と選べばよい。以上より，

$$\text{固有値：}\lambda_n = k_n^2 \qquad \text{固有関数：}X_n(x) = \sqrt{\frac{2}{a}}\sin(k_n x) \tag{7.3.69}$$

$$k_n = \frac{n\pi}{a} \qquad (n = 1, 2, \cdots) \tag{7.3.70}$$

である。
(2)$\{\,|X_n\rangle\,|\,n = 1, 2, \cdots\}$ は V_x の完全正規直交系であるから，$\hat{L}_x$ のスペクトル分解は

$$\hat{L}_x = \sum_{n=1}^{\infty} \lambda_n\,|X_n\rangle\langle X_n| \tag{7.3.71}$$

となる。
(3)$\hat{L}_x$ のスペクトル分解 (7.3.71) および $\langle X_n|X_n'\rangle = \delta_{nn'}$ を用いると $\partial_y^2 u_n(y) = \langle X_n|\,\partial_y^2\,|u(y)\rangle = \langle X_n|\hat{L}_x|u(y)\rangle = \lambda_n\,\langle X_n|u(y)\rangle = k_n^2 u_n(y)$ となる。
(4)(7.3.68) の一般解は $u_n(y) = A_n e^{k_n y} + D_n e^{-k_n y}$ である。また，完全性関係 $\hat{I}_x =$

$\sum_{n=1}^{\infty}|X_n\rangle\langle X_n|$ を用いると $u(x,y)=\langle x|u(y)\rangle=\sum_{n=1}^{\infty}\langle x|X_n\rangle\langle X_n|u(y)\rangle=\sum_{n=1}^{\infty}u_n(y)X_n(x)$ と書ける。したがって，(7.3.66) の一般解

$$u(x,y)=\sum_{n=1}^{\infty}\left(A_ne^{n\pi y/a}+B_ne^{-n\pi y/a}\right)X_n(x) \tag{7.3.72}$$

を得る。あるいは，正規化因子を任意定数に含めて，

$$u(x,y)=\sum_{n=1}^{\infty}\left(A_ne^{n\pi y/a}+B_ne^{-n\pi y/a}\right)\sin\left(\frac{n\pi}{a}x\right) \tag{7.3.73}$$

と書ける。任意定数は $y=0$，$y=b$ における境界条件 $u(x,0),\ u(x,b)\ (0\le x\le a)$ から決まる。
(5)$y=0$ において $u(x,0)=V_1\sin(\pi x/a)$ より，$A_1+B_1=V_1$，$A_n+B_n=0\,(n=2,3,4,\cdots)$ である。また，$y=b$ において $u(x,b)=V_2\sin(\pi x/a)$ より，$A_1e^{\pi b/a}+B_1e^{-\pi b/a}=V_2$，$A_ne^{n\pi b/a}+A_ne^{-n\pi b/a}=0\,(n=2,3,4,\cdots)$ である。したがって，$A_1=(V_1e^{-\pi b/a}-V_2)/(e^{-\pi b/a}-e^{\pi b/a})$，$B_1=(-V_1e^{\pi b/a}+V_2)/(e^{-\pi b/a}-e^{\pi b/a})$，$A_n=0,\ B_n=0\,(n=2,3,4,\cdots)$ である。以上より，

$$u(x,y)=\left(\frac{V_1e^{-\pi b/a}-V_2}{e^{-\pi b/a}-e^{\pi b/a}}e^{\pi y/a}+\frac{-V_1e^{\pi b/a}+V_2}{e^{-\pi b/a}-e^{\pi b/a}}e^{-\pi y/a}\right)\sin\left(\frac{\pi}{a}x\right) \tag{7.3.74}$$

を得る。

7.3.9 静電ポテンシャル (円環領域)

例題 35. 真空中において静電ポテンシャルを求める問題を考える。系は z 方向に一様であるとし，xy 平面上の円環領域 $\Omega=\{(\rho,\phi)\,|\,a\le\rho\le b, 0\le\phi\le 2\pi\}$ における静電ポテンシャルを $u(\rho,\phi)$ とする。$\rho=a$，$\rho=b$ における境界条件 $u(a,\phi),\ u(b,\phi)\ (0\le\phi\le 2\pi)$ の下で，$u(\rho,\phi)$ はラプラス方程式

$$\left(\frac{1}{\rho}\frac{\partial}{\partial\rho}\rho\frac{\partial}{\partial\rho}+\frac{1}{\rho^2}\frac{\partial^2}{\partial\phi^2}\right)u(\rho,\phi)=0 \tag{7.3.75}$$

を満たすとする。ϕ を変数とする関数の関数空間 V_ϕ において，(7.3.75) は $u(\rho,\phi)=\langle\phi|u(\rho)\rangle$ なる関数 $|u(\rho)\rangle$ とエルミート演算子 $\hat{l}_z$ を用いて

$$\left(\frac{1}{\rho}\frac{\partial}{\partial\rho}\rho\frac{\partial}{\partial\rho}-\frac{\hat{l}_z^2}{\rho^2}\right)|u(\rho)\rangle=0 \qquad \hat{l}_z=\int_0^{2\pi}d\phi\ |\phi\rangle\left(-i\frac{\partial}{\partial\phi}\right)\langle\phi| \tag{7.3.76}$$

と表せる。ここで，$|\phi\rangle$ は V_ϕ におけるデルタ関数 $\langle\phi|\phi'\rangle=\delta(\phi-\phi')$ である。以下の問いに答えよ。

(1) $\hat{l}_z$ の固有値 λ_m および正規化された固有関数 $\varphi_m(\phi) = \langle\phi|\varphi_m\rangle$ を求めよ。

(2) $\hat{l}_z$ のスペクトル分解を求めよ。

(3) $u_m(\rho) = \langle\varphi_m|u(\rho)\rangle$ とおくと，$u_m(\rho)$ は

$$\left(\frac{1}{\rho}\frac{\partial}{\partial\rho}\rho\frac{\partial}{\partial\rho} - \frac{m^2}{\rho^2}\right)u_m(\rho) = 0 \quad \text{あるいは} \quad \left(\frac{\partial^2}{\partial\rho^2} + \frac{1}{\rho}\frac{\partial}{\partial\rho} - \frac{m^2}{\rho^2}\right)u_m(\rho) = 0 \tag{7.3.77}$$

を満たすことを示せ。

(4) (7.3.75) の一般解を求めよ。

(5) 帯電していない導体円柱 (半径：a，中心軸：z 軸) を x 軸の正の向きの一様な電場 $\boldsymbol{E} = E_0\,\boldsymbol{e}_x$ の中に置く。$a \le \rho < \infty$ とし，境界条件 $u(a,\phi) = V_0$，$\rho \to \infty$ のとき $u(\rho,\phi) \to -E_0\rho\cos\phi$ の下で $u(\rho,\phi)$ を求めよ。

[解答]
(1) $\langle\phi|\hat{l}_z|\varphi\rangle = -i\partial_\phi\varphi(\phi) = \lambda\varphi(\phi)$ の解は，$\varphi(0) = \varphi(2\pi)$ より，$\varphi(\phi) = Ce^{im\phi}$ (m: 整数) である。C は $\varphi_m(\phi)$ が正規化されるように決める。$\int_0^{2\pi} d\phi\,|Ce^{im\phi}|^2 = 2\pi|C|^2 = 1$ より，$C = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}$ と選べばよい。以上より，

$$\text{固有値：}\lambda_m = m \qquad \text{固有関数：}\varphi_m(\phi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}e^{im\phi} \qquad (m\text{: 整数}) \tag{7.3.78}$$

である。
(2)$\{\,|\varphi_m\rangle \mid m$: 整数$\}$ は V_ϕ の完全正規直交系であるから，$\hat{l}_z$ のスペクトル分解は

$$\hat{l}_z = \sum_{m=-\infty}^{\infty} m\,|\varphi_m\rangle\langle\varphi_m| \tag{7.3.79}$$

となる。
(3)$\hat{l}_z$ のスペクトル分解 (7.3.79) および $\langle\varphi_m|\varphi_{m'}\rangle = \delta_{mm'}$ を用いると $\langle\varphi_m|\,(\frac{1}{\rho}\frac{\partial}{\partial\rho}\rho\frac{\partial}{\partial\rho} - \frac{\hat{l}_z^2}{\rho^2})\,|u(\rho)\rangle = (\frac{1}{\rho}\frac{\partial}{\partial\rho}\rho\frac{\partial}{\partial\rho} - \frac{m^2}{\rho^2})\,\langle\varphi_m|u(\rho)\rangle = (\frac{1}{\rho}\frac{\partial}{\partial\rho}\rho\frac{\partial}{\partial\rho} - \frac{m^2}{\rho^2})u_m(\rho) = 0$ となる。
(4)(7.3.77) の一般解は，$m = 0$ のとき $u_0(\rho) = A_0 + B_0\log\rho$ であり，$m \neq 0$ のとき $u_m(\rho) = A_m\rho^m + B_m\rho^{-m}$ である。また，完全性関係 $\hat{I}_\phi = \sum_{m=-\infty}^{\infty}|\varphi_m\rangle\langle\varphi_m|$ を用いると $u(\rho,\phi) = \langle\phi|u(\rho)\rangle = \sum_{m=-\infty}^{\infty}\langle\phi|\varphi_m\rangle\langle\varphi_m|u(\rho)\rangle = \sum_{m=-\infty}^{\infty}u_m(\rho)\varphi_m(\phi)$ と書ける。したがって，(7.3.75) の一般解

$$u(\rho,\phi) = (A_0 + B_0\log\rho)\varphi_0(\phi) + \sum_{m(m\neq 0)}\left(A_m\rho^m + B_m\rho^{-m}\right)\varphi_m(\phi) \tag{7.3.80}$$

を得る[7]。あるいは，指数関数 $\varphi_m(\phi)$ の代わりに三角関数を用い，正規化因子を任意定数に含めると，

$$u(\rho,\phi) = A_0 + B_0 \log\rho + \sum_{m=1}^{\infty}\Big((A_m\rho^m + B_m\rho^{-m})\cos(m\phi) + (A'_m\rho^m + B'_m\rho^{-m})\sin(m\phi)\Big) \tag{7.3.81}$$

と書ける。任意定数は $\rho = a$，$\rho = b$ における境界条件 $u(a,\phi)$，$u(b,\phi)$ $(0 \le \phi \le 2\pi)$ から決まる。
(5) 対称性より $u(\rho,\phi) = u(\rho,-\phi)$ であるから $A'_m = 0$，$B'_m = 0$ である。$\rho \to \infty$ のとき $u(\rho,\phi) \to -E_0\rho\cos\phi$ より $A_m = 0\,(m = 2,3,4,\cdots)$ でなければならない。また，導体円柱は帯電していないから $B_0 = 0$ である。さらに，$u(a,\phi) = V_0$ より $A_0 = V_0$，$A_1 = -E_0$，$B_1 = E_0a^2$，$B_m = 0\,(m = 2,3,4,\cdots)$ となる。以上より，

$$u(\rho,\phi) = V_0 + \left(-E_0\rho + E_0a^2\rho^{-1}\right)\cos\phi = V_0 - E_0\rho\cos\phi + E_0a^2\frac{\cos\phi}{\rho} \tag{7.3.82}$$

を得る。

7.3.10 静電ポテンシャル (直方体領域)

例題 36. 真空中において静電ポテンシャルを求める問題を考える。3 次元空間の直方体領域 $\Omega = \{(x,y,z)\,|\,0 \le x \le a, 0 \le y \le b, 0 \le z \le d\}$ における静電ポテンシャルを $u(x,y,z)$ とする。$z = 0$，$z = d$ における境界条件 $u(x,y,0)$，$u(x,y,d)$ $(0 \le x \le a, 0 \le y \le b)$ の下で，$u(x,y,z)$ はラプラス方程式

$$\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}\right)u(x,y,z) = 0$$
$$\begin{cases} u(0,y,z) = 0,\ u(a,y,z) = 0\ (0 \le y \le b, 0 \le z \le d) \\ u(x,0,z) = 0,\ u(x,b,z) = 0\ (0 \le x \le a, 0 \le z \le d) \end{cases} \tag{7.3.83}$$

を満たすとする。x，y を変数とする関数の関数空間を V_x，V_y とするとき，(7.3.83) は $V_x \otimes V_y$ における $u(x,y,z) = \langle xy|u(z)\rangle$ なる関数 $|u(z)\rangle$ とエルミート演算子 $\hat{L}$

[7] $\log\rho = \frac{1}{2}(\log(x+iy) + \log(x-iy))$，$\rho^m e^{im\phi} = (x+iy)^m$，$\rho^{-m}e^{im\phi} = (x-iy)^{-m}$ なので，$u(\rho,\phi) = f(x+iy) + g(x-iy)$ と表すことができます。実際，この形が 2 次元のラプラス方程式 $(\partial_x^2 + \partial_y^2)u = 0$ を満たすことは容易にわかります。なお，複素数 $z = x+iy$，$z^* = x-iy$ を用いると $u = f(z) + g(z^*)$ と書けますが，このことが 2 次元のラプラス方程式を解く際に複素関数論が威力を発揮する理由となっています。

を用いて

$$\left(-\hat{L}+\frac{\partial^2}{\partial z^2}\right)|u(z)\rangle=0 \qquad \hat{L}=\hat{L}_x\otimes\hat{I}_y+\hat{I}_x\otimes\hat{L}_y$$
$$\hat{L}_x=\int_0^a dx\ |x\rangle\left(-\frac{\partial^2}{\partial x^2}\right)\langle x| \qquad \hat{L}_y=\int_0^b dy\ |y\rangle\left(-\frac{\partial^2}{\partial y^2}\right)\langle y| \tag{7.3.84}$$
$$\hat{I}_x=\int_0^a dx\ |x\rangle\langle x| \qquad \hat{I}_y=\int_0^b dy\ |y\rangle\langle y|$$

と表せる。ここで，$|x\rangle$，$|y\rangle$ は V_x, V_y のデルタ関数 $\langle x|x'\rangle=\delta(x-x')$，$\langle y|y'\rangle=\delta(y-y')$ であり，$|xy\rangle=|x\rangle\otimes|y\rangle$ は $V_x\otimes V_y$ のデルタ関数 $\langle xy|x'y'\rangle=\delta(x-x')\delta(y-y')$ である。以下の問いに答えよ。

(1) $\hat{L}$ の固有値 λ_{mn} および正規化された固有関数 $\varphi_{mn}(x,y)=\langle xy|\varphi_{mn}\rangle$ を求めよ。

(2) $\hat{L}$ のスペクトル分解を求めよ。

(3) $u_{mn}(z)=\langle\varphi_{mn}|u(z)\rangle$，$k_{mn}=\sqrt{\lambda_{mn}}$ とおくと，$u_{mn}(z)$ は

$$\frac{\partial^2}{\partial z^2}u_{mn}(z)=k_{mn}^2u_{mn}(z) \tag{7.3.85}$$

を満たすことを示せ。

(4) (7.3.83) の一般解を求めよ。

(5) $z=0, z=d$ における境界条件を $u(x,y,0)=V_1\sin(\pi x/a)\sin(\pi y/b), u(x,y,d)=V_2\sin(\pi x/a)\sin(\pi y/b)$ とするとき $u(x,y,z)$ を求めよ。

[解答]
(1)$\hat{L}$ は V_x の演算子 $\hat{L}_x$ と V_y の恒等演算子 $\hat{I}_y$ のテンソル積 $\hat{L}_x\otimes\hat{I}_y$ と V_x の恒等演算子 $\hat{I}_x$ と V_y の演算子 $\hat{L}_y$ のテンソル積 $\hat{I}_x\otimes\hat{L}_y$ の和として表される。したがって，$\hat{L}$ の固有値 λ_{mn} は $\hat{L}_x$ の固有値 λ_m と $\hat{L}_y$ の固有値 λ_n の和 $\lambda_{mn}=\lambda_m+\lambda_n$ で与えられ，また，$\hat{L}$ の固有関数 $|\varphi_{mn}\rangle$ は $\hat{L}_x$ の固有関数 $|X_m\rangle$ と $\hat{L}_y$ の固有関数 $|Y_n\rangle$ のテンソル積 $|\varphi_{mn}\rangle=|X_m\rangle\otimes|Y_n\rangle$ で与えられる。$\hat{L}_x$ の固有値・固有関数は以下のように求められる。$-\partial_x^2X(x)=\lambda X(x)$ の一般解は $k=\sqrt{\lambda}$ とおくと $X(x)=C\sin(kx)+D\cos(kx)$ である。$X(0)=0$ より $D=0$ である。さらに，$X(a)=0$ より $k=\frac{m\pi}{a}\,(m=1,2,\cdots)$ である。したがって，$\hat{L}_x$ の固有値は $\lambda_m=k_m^2=\frac{m^2\pi^2}{a^2}$ である。C は $X_m(x)$ が正規化されるように決める。$\int_0^a dx\,|C\sin(k_mx)|^2=\frac{a}{2}|C|^2=1$

より，$C=\sqrt{\frac{2}{a}}$ と選べばよい。$\hat{L}_y$ の固有値・固有関数についても同様に求められる。以上より，

$$\text{固有値：}\lambda_{mn}=k_m^2+k_n^2 \qquad \text{固有関数：}\varphi_{mn}(x,y)=X_m(x)Y_n(y) \tag{7.3.86}$$

$$X_m(x)=\sqrt{\frac{2}{a}}\sin(k_m x) \qquad Y_n(y)=\sqrt{\frac{2}{b}}\sin(k_n y) \tag{7.3.87}$$

$$k_m=\frac{m\pi}{a}\quad(m=1,2,\cdots) \qquad k_n=\frac{n\pi}{b}\quad(n=1,2,\cdots) \tag{7.3.88}$$

である。
(2)$\{\,|\varphi_{mn}\rangle\mid m=1,2,\cdots,n=1,2,\cdots\}$ は完全正規直交系であるから，$\hat{L}$ のスペクトル分解は

$$\hat{L}=\sum_{mn}\lambda_{mn}\,|\varphi_{mn}\rangle\langle\varphi_{mn}| \tag{7.3.89}$$

となる。
(3)$\hat{L}$ のスペクトル分解 (7.3.89) および $\langle\varphi_{mn}|\varphi_{m'n'}\rangle=\delta_{mm'}\delta_{nn'}$ を用いると $\partial_z^2 u_{mn}(z)=\langle\varphi_{mn}|\,\partial_z^2\,|u(z)\rangle=\langle\varphi_{mn}|\hat{L}|u(z)\rangle=\lambda_{mn}\langle\varphi_{mn}|u(z)\rangle=k_{mn}^2u_{mn}(z)$ となる。
(4)(7.3.85) の一般解は $u_{mn}(z)=A_{mn}e^{k_{mn}z}+B_{mn}e^{-k_{mn}z}$ である。また，完全性関係 $\hat{I}=\sum_{mn}|\varphi_{mn}\rangle\langle\varphi_{mn}|$ を用いると $u(x,y,z)=\langle xy|u(z)\rangle=\sum_{mn}\langle xy|\varphi_{mn}\rangle\langle\varphi_{mn}|u(z)\rangle=\sum_{mn}u_{mn}(z)\varphi_{mn}(x,y)$ と書ける。したがって，(7.3.83) の一般解

$$u(x,y,z)=\sum_{mn}\left(A_{mn}e^{k_{mn}z}+B_{mn}e^{-k_{mn}z}\right)\varphi_{mn}(x,y) \tag{7.3.90}$$

を得る。あるいは，正規化因子を任意定数に含めて，

$$u(x,y,z)=\sum_{mn}\left(A_{mn}e^{k_{mn}z}+B_{mn}e^{-k_{mn}z}\right)\sin\left(\frac{m\pi}{a}x\right)\sin\left(\frac{n\pi}{b}y\right) \tag{7.3.91}$$

と書ける。任意定数は $z=0$，$z=d$ における境界条件 $u(x,y,0)$，$u(x,y,d)$ $(0\le x\le a, 0\le y\le b)$ から決まる。
(5)$z=0$ において $u(x,y,0)=V_1\sin(\pi x/a)\sin(\pi y/b)$ より，$A_{11}+B_{11}=V_1$，$A_{mn}+B_{mn}=0\,((m,n)\neq(1,1))$ である。また，$z=d$ において $u(x,y,d)=V_2\sin(\pi x/a)\sin(\pi y/b)$ より，$A_{11}e^{k_{11}d}+B_{11}e^{-k_{11}d}=V_2$，$A_{mn}e^{k_{mn}d}+A_{mn}e^{-k_{mn}d}=0\,((m,n)\neq(1,1))$ である。したがって，$A_{11}=(V_1e^{-k_{11}d}-V_2)/(e^{-k_{11}d}-e^{k_{11}d})$，

$B_{11} = (-V_1 e^{k_{11}d} + V_2)/(e^{-k_{11}d} - e^{k_{11}d})$，$A_{mn} = 0$, $B_{mn} = 0\,((m,n) \neq (1,1))$ である。以上より，

$$u(x,y,z) = \left(\frac{V_1 e^{-k_{11}d} - V_2}{e^{-k_{11}d} - e^{k_{11}d}} e^{k_{11}z} + \frac{-V_1 e^{k_{11}d} + V_2}{e^{-k_{11}d} - e^{k_{11}d}} e^{-k_{11}z}\right) \sin\left(\frac{\pi}{a}x\right) \sin\left(\frac{\pi}{b}y\right) \tag{7.3.92}$$

を得る。

7.3.11 静電ポテンシャル (円筒領域 1)

例題 37. 真空中において静電ポテンシャルを求める問題を考える。3 次元空間の円筒領域 $\Omega = \{(\rho,\phi,z)\,|\,0 \le \rho \le a, 0 \le \phi \le 2\pi, 0 \le z \le d\}$ における静電ポテンシャルを $u(\rho,\phi,z)$ とする。$z = 0$，$z = d$ における境界条件 $u(\rho,\phi,0)$，$u(\rho,\phi,d)$ $(0 \le \rho \le a, 0 \le \phi \le 2\pi)$ の下で，$u(\rho,\phi,z)$ はラプラス方程式

$$\begin{aligned} &\left(-\mathscr{L} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}\right) u(\rho,\phi,z) = 0 \qquad \mathscr{L} = -\frac{1}{\rho}\frac{\partial}{\partial\rho}\rho\frac{\partial}{\partial\rho} + \frac{1}{\rho^2}\ell_z^2 \\ &\ell_z = -i\frac{\partial}{\partial\phi} \qquad u(a,\phi,z) = 0\ (0 \le \phi \le 2\pi, 0 \le z \le d) \end{aligned} \tag{7.3.93}$$

を満たすとする。ρ，ϕ を変数とする関数の関数空間を V_ρ(重み関数：ρ)，V_ϕ とするとき，(7.3.93) は $V_\rho \otimes V_\phi$ における $u(\rho,\phi,z) = \langle\rho\phi|u(z)\rangle$ なる関数 $|u(z)\rangle$ とエルミート演算子 $\hat{L}$ を用いて

$$\begin{aligned} &\left(-\hat{L} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}\right)|u(z)\rangle = 0 \\ &\hat{L} = \int_0^a \rho d\rho\ |\rho\rangle \left(-\frac{1}{\rho}\frac{\partial}{\partial\rho}\rho\frac{\partial}{\partial\rho}\right)\langle\rho| \otimes \hat{I}_\phi + \int_0^a \rho d\rho\ |\rho\rangle \frac{1}{\rho^2}\langle\rho| \otimes \hat{l}_z^2 \\ &\hat{l}_z = \int_0^{2\pi} d\phi\ |\phi\rangle\,\ell_z\,\langle\phi| \qquad \hat{I}_\phi = \int_0^{2\pi} d\phi\ |\phi\rangle\langle\phi| \end{aligned} \tag{7.3.94}$$

と表せる。ここで, $|\rho\rangle$, $|\phi\rangle$ は V_ρ, V_ϕ のデルタ関数 $\langle\rho|\rho'\rangle = \frac{1}{\rho}\delta(\rho-\rho')$, $\langle\phi|\phi'\rangle = \delta(\phi-\phi')$ であり，$|\rho\phi\rangle = |\rho\rangle \otimes |\phi\rangle$ は $V_\rho \otimes V_\phi$ のデルタ関数 $\langle\rho\phi|\rho'\phi'\rangle = \frac{1}{\rho}\delta(\rho-\rho')\delta(\phi-\phi')$ である[8]。以下の問いに答えよ。

(1) $\hat{L}$ の固有値 λ_{mn} および正規化された固有関数 $\varphi_{mn}(\rho,\phi) = \langle\rho\phi|\varphi_{mn}\rangle$ を求めよ。

(2) $\hat{L}$ のスペクトル分解を求めよ。

[8] 重み付き内積の場合のデルタ関数については §5.2.5 の (5.2.74) および補章 C.1 を参照してください。

(3) $u_{mn}(z) = \langle\varphi_{mn}|u(z)\rangle$，$k_{mn} = \sqrt{\lambda_{mn}}$ とおくと，$u_{mn}(z)$ は

$$\frac{\partial^2}{\partial z^2}u_{mn}(z) = k_{mn}^2 u_{mn}(z) \tag{7.3.95}$$

を満たすことを示せ。

(4) (7.3.93) の一般解を求めよ。

(5) $z = 0$，$z = d$ における境界条件を $u(\rho,\phi,0) = V_1 J_0(k_{01}\rho)$，$u(\rho,\phi,d) = V_2 J_0(k_{01}\rho)$ とするとき $u(\rho,\phi,z)$ を求めよ。ここで，$J_0(\zeta)$ は 0 次のベッセル関数であり，k_{01} は $J_0(k_{01}a) = 0$ となる最小の正の数である。

[解答]
(1)$[\hat{l}_z, \hat{L}] = 0$ であるから，$\hat{l}_z$ と $\hat{L}$ は同時対角化可能である。$\hat{l}_z$ は角運動量演算子の z 成分であるから，固有値は m (m: 整数)，固有関数は $\Phi_m(\phi) = \langle\phi|\Phi_m\rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}e^{im\phi}$ である。次に，$\hat{l}_z$ の固有値 m に対応する V_ϕ における $\hat{l}_z$ の固有空間を $W_m = \mathrm{span}(\,|\Phi_m\rangle)$ として，$V_\rho \otimes W_m$ における $\hat{L}$ の固有値問題を考える。$\langle\rho\phi|\varphi_{mn}\rangle = R(\rho)\Phi_m(\phi)$ とすると，$R(\rho)$ は

$$\left(-\frac{1}{\rho}\frac{\partial}{\partial\rho}\rho\frac{\partial}{\partial\rho} + \frac{m^2}{\rho^2}\right)R(\rho) = \lambda R(\rho) \tag{7.3.96}$$

を満たす。$k = \sqrt{\lambda}$，$\zeta = k\rho$，$y(z) = R(\rho)$ とおくと，(7.3.96) は

$$\frac{d^2}{d\zeta^2}y + \frac{1}{\zeta}\frac{d}{d\zeta}y + \left(1 - \frac{m^2}{\zeta^2}\right)y = 0 \tag{7.3.97}$$

と書ける。(7.3.97) はベッセルの微分方程式であり，原点で正則な解はベッセル関数 $J_m(\zeta)$ で与えられる。境界条件 $R(a) = 0$ より，k は $J_m(\zeta)$ の零点 j_{mn} から決まる。ここで，$J_m(j_{mn}) = 0\,(n = 1, 2, \cdots)$ である。よって $R_{mn}(\rho) = C_{mn}J_m(k_{mn}\rho)$ である。正規化因子 C_{mn} は $\int_0^a \rho d\rho\,|R_{mn}(\rho)|^2 = 1$ より，$C_{mn} = \sqrt{\frac{2}{J_{m+1}(j_{mn})^2 a^2}}$ と選ぶ。以上より，

$$\text{固有値：}\lambda_{mn} = k_{mn}^2 \qquad \text{固有関数：}\varphi_{mn}(\rho,\phi) = C_{mn}J_m(k_{mn}\rho)\Phi_m(\phi) \tag{7.3.98}$$

$$k_{mn} = \frac{j_{mn}}{a} \qquad (m\text{: 整数}, n = 1, 2, \cdots) \tag{7.3.99}$$

である。ただし，整数次数のベッセル関数の性質 $J_{-m}(x) = (-1)^m J_m(x)$ より，k_{mn} の m として零または正の整数 $(m = 0, 1, 2, \cdots)$ を考えればよい。

(2)$\{\,|\varphi_{mn}\rangle\,|\,m$: 整数, $n=1,2,\cdots\}$ は完全正規直交系であるから，$\hat{L}$ のスペクトル分解は

$$\hat{L}=\sum_{mn}\lambda_{mn}\,|\varphi_{mn}\rangle\langle\varphi_{mn}| \tag{7.3.100}$$

となる。
(3)$\hat{L}$ のスペクトル分解 (7.3.100) および $\langle\varphi_{mn}|\varphi_{m'n'}\rangle=\delta_{mm'}\delta_{nn'}$ を用いると $\partial_z^2 u_{mn}(z)=\langle\varphi_{mn}|\,\partial_z^2\,|u(z)\rangle=\langle\varphi_{mn}|\hat{L}|u(z)\rangle=\lambda_{mn}\,\langle\varphi_{mn}|u(z)\rangle=k_{mn}^2u_{mn}(z)$ となる。
(4)(7.3.95) の一般解は $u_{mn}(z)=A_{mn}e^{k_{mn}z}+B_{mn}e^{-k_{mn}z}$ である。また，完全性関係 $\hat{I}=\sum_{mn}\,|\varphi_{mn}\rangle\langle\varphi_{mn}|$ を用いると $u(\rho,\phi,z)=\langle\rho\phi|u(z)\rangle=\sum_{mn}\,\langle\rho\phi|\varphi_{mn}\rangle\langle\varphi_{mn}|u(z)\rangle=\sum_{mn}u_{mn}(z)\varphi_{mn}(\rho,\phi)$ と書ける。したがって，(7.3.93) の一般解

$$u(\rho,\phi,z)=\sum_{mn}\left(A_{mn}e^{k_{mn}z}+B_{mn}e^{-k_{mn}z}\right)\varphi_{mn}(\rho,\phi) \tag{7.3.101}$$

を得る。あるいは，正規化因子を任意定数に含めて，

$$u(\rho,\phi,z)=\sum_{mn}\left(A_{mn}e^{k_{mn}z}+B_{mn}e^{-k_{mn}z}\right)J_m(k_{mn}\rho)e^{im\phi} \tag{7.3.102}$$

と書ける。任意定数は $z=0$，$z=d$ における境界条件 $u(\rho,\phi,0)$，$u(\rho,\phi,d)$ $(0\le\rho\le a, 0\le\phi\le 2\pi)$ から決まる。
(5)$z=0$ において $u(\rho,\phi,0)=V_1J_0(k_{01}\rho)$ より，$A_{01}+B_{01}=V_1$，$A_{mn}+B_{mn}=0\,((m,n)\neq(0,1))$ である。また，$z=d$ において $u(\rho,\phi,d)=V_2J_0(k_{01}\rho)$ より，$A_{01}e^{k_{01}d}+B_{01}e^{-k_{01}d}=V_2$, $A_{mn}e^{k_{mn}d}+B_{mn}e^{-k_{mn}d}=0\,((m,n)\neq(0,1))$ である。したがって, $A_{01}=(V_1e^{-k_{01}d}-V_2)/(e^{-k_{01}d}-e^{k_{01}d})$, $B_{01}=(-V_1e^{k_{01}d}+V_2)/(e^{-k_{01}d}-e^{k_{01}d})$, $A_{mn}=0$, $B_{mn}=0\,((m,n)\neq(0,1))$ である。以上より，

$$u(\rho,\phi,z)=\left(\frac{V_1e^{-k_{01}d}-V_2}{e^{-k_{01}d}-e^{k_{01}d}}e^{k_{01}z}+\frac{-V_1e^{k_{01}d}+V_2}{e^{-k_{01}d}-e^{k_{01}d}}e^{-k_{01}z}\right)J_0(k_{01}\rho) \tag{7.3.103}$$

を得る。

7.3.12 静電ポテンシャル (円筒領域 2)

例題 38. 真空中において静電ポテンシャルを求める問題を考える。3 次元空間の円筒領域 $\Omega=\{(\rho,\phi,z)\,|\,0\le\rho\le a, 0\le\phi\le 2\pi, 0\le z\le d\}$ における静電ポテンシャルを $u(\rho,\phi,z)$ とする。$\rho=a$ における境界条件 $u(a,\phi,z)$ $(0\le\phi\le 2\pi, 0\le z\le d)$

の下で，$u(\rho,\phi,z)$ はラプラス方程式

$$\left(\frac{1}{\rho}\frac{\partial}{\partial\rho}\rho\frac{\partial}{\partial\rho}-\mathscr{L}(\rho)\right)u(\rho,\phi,z)=0 \qquad \mathscr{L}(\rho)=\frac{1}{\rho^2}\ell_z^2+\mathscr{L}_z \qquad \mathscr{L}_z=-\frac{\partial^2}{\partial z^2}$$
$$\ell_z=-i\frac{\partial}{\partial\phi} \qquad u(\rho,\phi,0)=0,\ u(\rho,\phi,d)=0\ (0\le\rho\le a, 0\le\phi\le 2\pi) \tag{7.3.104}$$

を満たすとする。ϕ, z を変数とする関数の関数空間を V_ϕ, V_z とするとき，(7.3.104) は $V_\phi\otimes V_z$ における $u(\rho,\phi,z)=\langle\phi z|u(\rho)\rangle$ なる関数 $|u(\rho)\rangle$ とエルミート演算子 $\hat{L}(\rho)$ を用いて

$$\left(\frac{1}{\rho}\frac{\partial}{\partial\rho}\rho\frac{\partial}{\partial\rho}-\hat{L}(\rho)\right)|u(\rho)\rangle=0 \qquad \hat{L}(\rho)=\frac{1}{\rho^2}\hat{l}_z^2\otimes\hat{I}_z+\hat{I}_\phi\otimes\hat{L}_z$$
$$\hat{l}_z=\int_0^{2\pi}d\phi\ |\phi\rangle\,\ell_z\,\langle\phi| \qquad \hat{L}_z=\int_0^d dz\ |z\rangle\,\mathscr{L}_z\,\langle z| \tag{7.3.105}$$
$$\hat{I}_\phi=\int_0^{2\pi}d\phi\ |\phi\rangle\langle\phi| \qquad \hat{I}_z=\int_0^d dz\ |z\rangle\langle z|$$

と表せる。ここで，$|\phi\rangle$, $|z\rangle$ は V_ϕ, V_z のデルタ関数 $\langle\phi|\phi'\rangle=\delta(\phi-\phi')$, $\langle z|z'\rangle=\delta(z-z')$ であり，$|\phi z\rangle=|\phi\rangle\otimes|z\rangle$ は $V_\phi\otimes V_z$ のデルタ関数 $\langle\phi z|\phi' z'\rangle=\delta(\phi-\phi')\delta(z-z')$ である[9]。以下の問いに答えよ。

(1) $\hat{L}(\rho)$ の固有値 $\lambda_{mp}(\rho)=\frac{m^2}{\rho^2}+k_p^2$ および正規化された固有関数 $\varphi_{mp}(\phi,z)=\langle\phi z|\varphi_{mp}\rangle$ を求めよ。

(2) $\hat{L}(\rho)$ のスペクトル分解を求めよ。

(3) $u_{mp}(\rho)=\langle\varphi_{mp}|u(\rho)\rangle$ とおくと，$u_{mp}(\rho)$ は

$$\left(\frac{1}{\rho}\frac{\partial}{\partial\rho}\rho\frac{\partial}{\partial\rho}-\left(k_p^2+\frac{m^2}{\rho^2}\right)\right)u_{mp}(\rho)=0 \tag{7.3.106}$$

を満たすことを示せ。

(4) (7.3.104) の一般解を求めよ。

(5) $\rho=a$ における境界条件を $u(a,\phi,z)=V_0\sin(\pi z/d)$ とするとき $u(\rho,\phi,z)$ を求めよ。

[9]重み付き内積の場合のデルタ関数については §5.2.5 の (5.2.74) および補章 C.1 を参照してください。

[解答]
(1)$[\hat{l}_z, \hat{L}(\rho)] = 0$ であるから，$\hat{l}_z$ と $\hat{L}(\rho)$ は同時対角化可能である。$\hat{l}_z$ は角運動量演算子の z 成分であるから，固有値は m (m: 整数)，固有関数は $\Phi_m(\phi) = \langle\phi|\Phi_m\rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}e^{im\phi}$ である。$\hat{L}_z$ の固有値・固有関数は以下のように求められる。$\mathscr{L}_z Z(z) = -\partial_z^2 Z(z) = \lambda Z(z)$ の一般解は $k = \sqrt{\lambda}$ とおくと $Z(z) = C\sin(kz) + D\cos(kz)$ である。$Z(0) = 0$ より $D = 0$ である。さらに，$Z(d) = 0$ より $k = \frac{p\pi}{d}$ $(p = 1, 2, \cdots)$ である。したがって，$\hat{L}_z$ の固有値は $\lambda_p = k_p^2 = \frac{p^2\pi^2}{d^2}$ である。C は $Z_p(z)$ が正規化されるように決める。$\int_0^d dz\,|C\sin(k_p z)|^2 = \frac{d}{2}|C|^2 = 1$ より，$C = \sqrt{\frac{2}{d}}$ と選べばよい。以上より，

$$\text{固有値：}\lambda_{mp}(\rho) = \frac{m^2}{\rho^2} + k_p^2 \qquad \text{固有関数：}\varphi_{mp}(\phi, z) = \Phi_m(\phi)Z_p(z) \tag{7.3.107}$$

$$m\text{: 整数} \qquad k_p = \frac{p\pi}{d} \qquad (p = 1, 2, \cdots) \tag{7.3.108}$$

である。
(2)$\{\,|\varphi_{mp}\rangle \mid m$: 整数, $p = 1, 2, \cdots\}$ は完全正規直交系であるから，$\hat{L}(\rho)$ のスペクトル分解は

$$\hat{L}(\rho) = \sum_{mp} \lambda_{mp}(\rho)\,|\varphi_{mp}\rangle\langle\varphi_{mp}| \tag{7.3.109}$$

となる。
(3)$\hat{L}(\rho)$ のスペクトル分解 (7.3.109) および $\langle\varphi_{mp}|\varphi_{m'p'}\rangle = \delta_{mm'}\delta_{pp'}$ を用いると $\frac{1}{\rho}\frac{\partial}{\partial\rho}\rho\frac{\partial}{\partial\rho}u_{mp}(\rho) = \langle\varphi_{mp}|\,\frac{1}{\rho}\frac{\partial}{\partial\rho}\rho\frac{\partial}{\partial\rho}\,|u(\rho)\rangle = \langle\varphi_{mp}|\hat{L}(\rho)|u(\rho)\rangle\ \ \lambda_{mp}(\rho)\,\langle\varphi_{mp}|u(\rho)\rangle = (\frac{m^2}{\rho^2} + k_p^2)u_{mp}(\rho)$ となる。
(4)(7.3.106) は，$\zeta = k_p\rho$，$y(\zeta) = u_{mp}(\rho)$ とおくと，

$$\frac{d^2}{d\zeta^2}y + \frac{1}{\zeta}\frac{d}{d\zeta}y - \left(1 + \frac{m^2}{\zeta^2}\right)y = 0 \tag{7.3.110}$$

と書ける。(7.3.110) の一般解は $y = AI_m(\zeta) + BK_m(\zeta)$ で与えられる。ここで，$I_m(\zeta)$，$K_m(\zeta)$ は第 1 種，第 2 種の**変形ベッセル関数**である。したがって，(7.3.106) の $\rho = 0$ で正則な解は $u_{mp}(\rho) = A_{mp}I_m(k_p\rho)$ で与えられる。完全性関係 $\hat{I} = \sum_{mp}|\varphi_{mp}\rangle\langle\varphi_{mp}|$ を用いると $u(\rho, \phi, z) = \langle\phi z|u(\rho)\rangle = \sum_{mp}\langle\phi z|\varphi_{mp}\rangle\langle\varphi_{mp}|u(\rho)\rangle = \sum_{mp}u_{mp}(\rho)\varphi_{mp}(\phi z)$ と書ける。したがって，(7.3.104) の一般解

$$u(\rho, \phi, z) = \sum_{mp} A_{mp}I_m(k_p\rho)\varphi_{mp}(\phi, z) \tag{7.3.111}$$

を得る。あるいは，正規化因子を任意定数に含めて，

$$u(\rho,\phi,z)=\sum_{mp}A_{mp}I_m(k_p\rho)e^{im\phi}\sin\left(\frac{p\pi}{d}z\right) \tag{7.3.112}$$

と書ける。任意定数は $\rho=a$ における境界条件 $u(a,\phi,z)$ $(0\le\phi\le 2\pi, 0\le z\le d)$ から決まる。
(5)$\rho=a$ において $u(a,\phi,z)=V_0\sin(\pi z/d)$ より，$A_{01}I_0(\pi a/d)=V_0$，$A_{mp}=0\,((m,p)\neq(0,1))$ である。したがって，

$$u(\rho,\phi,z)=\frac{V_0}{I_0\left(\frac{\pi}{d}a\right)}I_0\left(\frac{\pi}{d}\rho\right)\sin\left(\frac{\pi}{d}z\right) \tag{7.3.113}$$

を得る。

7.3.13 静電ポテンシャル (球殻領域)

例題 39. 真空中において静電ポテンシャルを求める問題を考える。3 次元空間の球殻領域 $\Omega=\{(r,\theta,\phi)\,|\,a\le r\le b, 0\le\theta\le\pi, 0\le\phi\le 2\pi\}$ における静電ポテンシャルを $u(r,\theta,\phi)$ とする。$r=a$，$r=b$ における境界条件 $u(a,\theta,\phi)$，$u(b,\theta,\phi)$ $(0\le\theta\le\pi, 0\le\phi\le 2\pi)$ の下で，$u(r,\theta,\phi)$ はラプラス方程式

$$\left(\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}r^2\frac{\partial}{\partial r}-\frac{1}{r^2}\boldsymbol{\ell}^2\right)u(r,\theta,\phi)=0 \qquad \boldsymbol{\ell}^2=-\left(\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}+\frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\phi^2}\right) \tag{7.3.114}$$

を満たすとする。θ と ϕ を変数とする関数の関数空間 $V_{\theta\phi}$(重み関数：$\sin\theta$) において，(7.3.114) は $u(r,\theta,\phi)=\langle\theta\phi|u(r)\rangle$ なる関数 $|u(r)\rangle$ とエルミート演算子 $\hat{\boldsymbol{l}}^2$ を用いて

$$\left(\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}r^2\frac{\partial}{\partial r}-\frac{1}{r^2}\hat{\boldsymbol{l}}^2\right)|u(r)\rangle=0 \qquad \hat{\boldsymbol{l}}^2=\int_0^\pi\sin\theta d\theta\int_0^{2\pi}d\phi\,|\theta\phi\rangle\,\boldsymbol{\ell}^2\,\langle\theta\phi| \tag{7.3.115}$$

と表せる。ここで，$|\theta\phi\rangle$ は $V_{\theta\phi}$ におけるデルタ関数 $\langle\theta\phi|\theta'\phi'\rangle=\langle\theta|\theta'\rangle\langle\phi|\phi'\rangle=\frac{1}{\sin\theta}\delta(\theta-\theta')\delta(\phi-\phi')$ である[10]。以下の問いに答えよ。

(1) $\hat{\boldsymbol{l}}^2$ の固有値 λ_l および正規化された固有関数 $\varphi_{lm}(\theta,\phi)=\langle\theta\phi|lm\rangle$ を求めよ。

[10]重み付き内積の場合のデルタ関数については §5.2.5 の (5.2.74) および補章 C.1 を参照してください。

(2) $\hat{\boldsymbol{l}}^2$ のスペクトル分解を求めよ。

(3) $u_{lm}(r) = \langle lm|u(r)\rangle$ とおくと，$u_{lm}(r)$ は

$$\left(\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}r^2\frac{\partial}{\partial r} - \frac{l(l+1)}{r^2}\right)u_{lm}(r) = 0 \quad \text{あるいは} \quad \left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r}\frac{\partial}{\partial r} - \frac{l(l+1)}{r^2}\right)u_{lm}(r) = 0 \tag{7.3.116}$$

を満たすことを示せ。

(4) (7.3.114) の一般解を求めよ。

(5) 帯電していない導体球 (半径：a，中心：原点) を z 軸の正の向きの一様な電場 $\boldsymbol{E} = E_0\,\boldsymbol{e}_z$ の中に置く。$a \leq r < \infty$ とし，境界条件 $u(a,\theta,\phi) = V_0$，$r \to \infty$ のとき $u(r,\theta,\phi) \to -E_0 r\cos\theta$ の下で $u(r,\theta,\phi)$ を求めよ。

[解答]
(1)$\hat{\boldsymbol{l}}$ は軌道角運動量演算子であるから，$\hat{\boldsymbol{l}}$ の z 成分を $\hat{l}_z$ とすると，$\hat{\boldsymbol{l}}^2$ と $\hat{l}_z$ の共通の固有関数 $\varphi_{lm}(\theta,\phi)$ は球面調和関数 $Y_{lm}(\theta,\phi) = \langle\theta\phi|lm\rangle$ であり，$\hat{\boldsymbol{l}}^2$ の固有値は $l(l+1)\,(l = 0,1,2,\cdots)$，$\hat{l}_z$ の固有値は $m\,(m = -l,-l+1,\cdots,l-1,l)$ である。つまり，

$$\text{固有値：}\lambda_l = l(l+1) \qquad \text{固有関数：}\varphi_{lm}(\theta,\phi) = Y_{lm}(\theta,\phi) \tag{7.3.117}$$

である。
(2)$\{\,|lm\rangle\ |\,l = 0,1,2,\cdots,\ m = -l,-l+1,\cdots,l-1,l)\}$ は $V_{\theta\phi}$ の完全正規直交系であるから，$\hat{\boldsymbol{l}}^2$ のスペクトル分解は

$$\hat{\boldsymbol{l}}^2 = \sum_{l=0}^{\infty}\sum_{m=-l}^{l} l(l+1)\,|lm\rangle\langle lm| \tag{7.3.118}$$

となる。
(3)$\hat{\boldsymbol{l}}^2$ のスペクトル分解 (7.3.118) および $\langle lm|l'm'\rangle = \delta_{ll'}\delta_{mm'}$ を用いると $\langle lm|\,(\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}r^2\frac{\partial}{\partial r} - \frac{\hat{\boldsymbol{l}}^2}{r^2})\,|u(r)\rangle = (\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}r^2\frac{\partial}{\partial r} - \frac{l(l+1)}{r^2})\,\langle lm|u(r)\rangle = (\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}r^2\frac{\partial}{\partial r} - \frac{l(l+1)}{r^2})u_{lm}(r) = 0$ となる。
(4)(7.3.116) の一般解は $u_{lm}(r) = A_{lm}r^l + B_{lm}r^{-(l+1)}$ である。また，完全性関係 $\hat{I}_{\theta\phi} = \sum_{lm}|lm\rangle\langle lm|$ を用いると $u(r,\theta,\phi) = \langle\theta\phi|u(r)\rangle = \sum_{lm}\langle\theta\phi|lm\rangle\langle lm|u(r)\rangle = \sum_{lm}u_{lm}(r)Y_{lm}(\theta,\phi)$ と書ける。したがって，(7.3.114) の一般解

$$u(r,\theta,\phi) = \sum_{l=0}^{\infty}\sum_{m=-l}^{l}\left(A_{lm}r^l + B_{lm}r^{-(l+1)}\right)Y_{lm}(\theta,\phi) \tag{7.3.119}$$

を得る。任意定数 A_{lm}, B_{lm} は $r=a, r=b$ における境界条件 $u(a,\theta,\phi),\ u(b,\theta,\phi)$ $(0 \leq \theta \leq \pi, 0 \leq \phi \leq 2\pi)$ から決まる。
(5) 対称性より解は ϕ に依存しないから $u = u(r,\theta)$ である。したがって，$A_{lm} = 0,\ B_{lm} = 0,\ (m \neq 0)$ である。$r \to \infty$ のとき $u(r,\theta) \to -E_0 r\cos\theta$ より $A_{l0} = 0\,(l = 2,3,4,\cdots)$ でなければならない。また，導体球は帯電していないから $B_{00} = 0$ である。さらに，$u(a,\theta) = V_0$ より $A_{00} = V_0$，$A_{10} = -E_0$，$B_{10} = E_0 a^3$，$B_{l0} = 0\,(l = 2,3,4,\cdots)$ となる。以上より，

$$u(r,\theta) = V_0 + \left(-E_0 r + E_0 a^3 r^{-2}\right)\cos\theta = V_0 - E_0 r\cos\theta + E_0 a^3 \frac{\cos\theta}{r^2} \tag{7.3.120}$$

を得る。

7.3.14 矩形導波管 (TM モード)

例題 40. 長方形 (長辺 a，短辺 b) の断面をもつ中空の導波管を伝搬する電磁波について考える。導波管内部の領域を $\Omega = \{(x,y,z)\,|\,0 \leq x \leq a, 0 \leq y \leq b, -\infty < z < \infty\}$ とする。電磁波は TM モードであるとし，電場ベクトルの z 成分は $E_z(x,y,z,t) = u(x,y)e^{ik_z z}e^{-i\omega t}$ と表されるとする。このとき，$u(x,y)$ はヘルムホルツ方程式

$$\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + k^2\right)u(x,y) = 0 \qquad \begin{cases} u(0,y) = 0,\ u(a,y) = 0\ (0 \leq y \leq b) \\ u(x,0) = 0,\ u(x,b) = 0\ (0 \leq x \leq a) \end{cases} \tag{7.3.121}$$

を満たす。ここで，c を光速として $k^2 = \omega^2/c^2 - k_z^2$ である。x，y を変数とする関数の関数空間を V_x，V_y とするとき，(7.3.121) は $V_x \otimes V_y$ における $u(x,y) = \langle xy|u\rangle$ なる関数 $|u\rangle$ とエルミート演算子 $\hat{L}$ を用いて

$$\begin{aligned} &\left(-\hat{L} + k^2\hat{I}\right)|u\rangle = 0 \qquad \hat{L} = \hat{L}_x \otimes \hat{I}_y + \hat{I}_x \otimes \hat{L}_y \qquad \hat{I} = \hat{I}_x \otimes \hat{I}_y \\ &\hat{L}_x = \int_0^a dx\ |x\rangle\left(-\frac{\partial^2}{\partial x^2}\right)\langle x| \qquad \hat{L}_y = \int_0^b dy\ |y\rangle\left(-\frac{\partial^2}{\partial y^2}\right)\langle y| \\ &\hat{I}_x = \int_0^a dx\ |x\rangle\langle x| \qquad \hat{I}_y = \int_0^b dy\ |y\rangle\langle y| \end{aligned} \tag{7.3.122}$$

と表せる。ここで，$|x\rangle$，$|y\rangle$ は V_x, V_y のデルタ関数 $\langle x|x'\rangle = \delta(x-x')$，$\langle y|y'\rangle = \delta(y-y')$ であり，$|xy\rangle = |x\rangle \otimes |y\rangle$ は $V_x \otimes V_y$ のデルタ関数 $\langle xy|x'y'\rangle = \delta(x-x')\delta(y-y')$ である。以下の問いに答えよ。

(1) $\hat{L}$ の固有値 k_{mn}^2 および正規化された固有関数 $\varphi_{mn}(x,y) = \langle xy|\varphi_{mn}\rangle$ を求めよ。

(2) $\hat{L}$ のスペクトル分解を求めよ。

(3) 電磁波が伝搬するためには k_z は実数でなければならない。このことから TM_{mn} モードの遮断周波数 ω_c を求めよ。

[解答]

(1)$\hat{L}$ は V_x の演算子 $\hat{L}_x$ と V_y の恒等演算子 $\hat{I}_y$ のテンソル積 $\hat{L}_x \otimes \hat{I}_y$ と V_x の恒等演算子 $\hat{I}_x$ と V_y の演算子 $\hat{L}_y$ のテンソル積 $\hat{I}_x \otimes \hat{L}_y$ の和として表される。したがって，$\hat{L}$ の固有値 k_{mn}^2 は $\hat{L}_x$ の固有値 λ_m と $\hat{L}_y$ の固有値 λ_n の和 $k_{mn}^2 = \lambda_m + \lambda_n$ で与えられ，また，$\hat{L}$ の固有関数 $|\varphi_{mn}\rangle$ は $\hat{L}_x$ の固有関数 $|X_m\rangle$ と $\hat{L}_y$ の固有関数 $|Y_n\rangle$ のテンソル積 $|\varphi_{mn}\rangle = |X_m\rangle \otimes |Y_n\rangle$ で与えられる。$\hat{L}_x$ の固有値・固有関数は以下のように求められる。$-\partial_x^2 X(x) = \lambda X(x)$ の一般解は $k = \sqrt{\lambda}$ とおくと $X(x) = A\sin(kx) + B\cos(kx)$ である。$X(0) = 0$ より $B = 0$ である。さらに，$X(a) = 0$ より $k = \frac{m\pi}{a}\,(m = 1, 2, \cdots)$ である。したがって，$\hat{L}_x$ の固有値は $\lambda_m = k_m^2 = \frac{m^2\pi^2}{a^2}$ である。A は $X_m(x)$ が正規化されるように決める。$\int_0^a dx\,|A\sin(k_m x)|^2 = \frac{a}{2}|A|^2 = 1$ より，$A = \sqrt{\frac{2}{a}}$ と選べばよい。$\hat{L}_y$ の固有値・固有関数についても同様に求められる。以上より，

$$\text{固有値：} k_{mn}^2 = k_m^2 + k_n^2 \qquad \text{固有関数：} \varphi_{mn}(x,y) = X_m(x)Y_n(y) \tag{7.3.123}$$

$$X_m(x) = \sqrt{\frac{2}{a}}\sin(k_m x) \qquad Y_n(y) = \sqrt{\frac{2}{b}}\sin(k_n y) \tag{7.3.124}$$

$$k_m = \frac{m\pi}{a} \quad (m = 1, 2, \cdots) \qquad k_n = \frac{n\pi}{b} \quad (n = 1, 2, \cdots) \tag{7.3.125}$$

である。

(2)$\{\,|\varphi_{mn}\rangle \mid m = 1, 2, \cdots, n = 1, 2, \cdots\}$ は完全正規直交系であるから，$\hat{L}$ のスペクトル分解は

$$\hat{L} = \sum_{mn} k_{mn}^2\,|\varphi_{mn}\rangle\langle\varphi_{mn}| \tag{7.3.126}$$

となる。

(3)TM_{mn} モードを考え (7.3.121) において $u(x,y) = \varphi_{mn}(x,y)$ とすると，$k^2 = k_{mn}^2$，つまり，$k_z = \sqrt{\omega^2/c^2 - k_{mn}^2}$ と書ける。k_z が実数となるためには，$\omega \geq ck_{mn}$ でなければならない。したがって，TM_{mn} モードの遮断周波数は $\omega_\mathrm{c} = ck_{mn} = c\sqrt{m^2\pi^2/a^2 + n^2\pi^2/b^2}$ である[11]。

[11]矩形導波管の場合，最小の遮断周波数をもつ TM モードは TM_{11} モードとなります。

7.3.15　矩形導波管 (TE モード)

例題 41. 長方形 (長辺 a，短辺 b) の断面をもつ中空の導波管を伝搬する電磁波について考える。導波管内部の領域を $\Omega = \{(x,y,z)\,|\,0 \le x \le a, 0 \le y \le b, -\infty < z < \infty\}$ とする。電磁波は TE モードであるとし，磁場ベクトルの z 成分は $H_z(x,y,z,t) = u(x,y)e^{ik_z z}e^{-i\omega t}$ と表されるとする。このとき，$u(x,y)$ はヘルムホルツ方程式

$$\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + k^2\right)u(x,y) = 0 \qquad \begin{cases} \frac{\partial u}{\partial x}(0,y) = 0,\ \frac{\partial u}{\partial x}(a,y) = 0\ (0 \le y \le b) \\ \frac{\partial u}{\partial y}(x,0) = 0,\ \frac{\partial u}{\partial y}(x,b) = 0\ (0 \le x \le a) \end{cases} \tag{7.3.127}$$

を満たす。ここで，c を光速として $k^2 = \omega^2/c^2 - k_z^2$ である。x，y を変数とする関数の関数空間を V_x，V_y とするとき，(7.3.127) は $V_x \otimes V_y$ における $u(x,y) = \langle xy|u\rangle$ なる関数 $|u\rangle$ とエルミート演算子 $\hat{L}$ を用いて

$$\begin{aligned} &\left(-\hat{L} + k^2\hat{I}\right)|u\rangle = 0 \qquad \hat{L} = \hat{L}_x \otimes \hat{I}_y + \hat{I}_x \otimes \hat{L}_y \qquad \hat{I} = \hat{I}_x \otimes \hat{I}_y \\ &\hat{L}_x = \int_0^a dx\ |x\rangle\left(-\frac{\partial^2}{\partial x^2}\right)\langle x| \qquad \hat{L}_y = \int_0^b dy\ |y\rangle\left(-\frac{\partial^2}{\partial y^2}\right)\langle y| \\ &\hat{I}_x = \int_0^a dx\ |x\rangle\langle x| \qquad \hat{I}_y = \int_0^b dy\ |y\rangle\langle y| \end{aligned} \tag{7.3.128}$$

と表せる。ここで，$|x\rangle$，$|y\rangle$ は V_x, V_y のデルタ関数 $\langle x|x'\rangle = \delta(x-x')$，$\langle y|y'\rangle = \delta(y-y')$ であり，$|xy\rangle = |x\rangle \otimes |y\rangle$ は $V_x \otimes V_y$ のデルタ関数 $\langle xy|x'y'\rangle = \delta(x-x')\delta(y-y')$ である。以下の問いに答えよ。

(1) $\hat{L}$ の固有値 k_{mn}^2 および正規化された固有関数 $\varphi_{mn}(x,y) = \langle xy|\varphi_{mn}\rangle$ を求めよ。

(2) $\hat{L}$ のスペクトル分解を求めよ。

(3) 電磁波が伝搬するためには k_z は実数でなければならない。このことから TE_{mn} モードの遮断周波数 ω_c を求めよ。

[解答]
(1)$\hat{L}$ は V_x の演算子 $\hat{L}_x$ と V_y の恒等演算子 $\hat{I}_y$ のテンソル積 $\hat{L}_x \otimes \hat{I}_y$ と V_x の恒等演算子 $\hat{I}_x$ と V_y の演算子 $\hat{L}_y$ のテンソル積 $\hat{I}_x \otimes \hat{L}_y$ の和として表される。したがって，$\hat{L}$ の固有値 k_{mn}^2 は $\hat{L}_x$ の固有値 λ_m と $\hat{L}_y$ の固有値 λ_n の和 $k_{mn}^2 = \lambda_m + \lambda_n$ で与えられ，また，$\hat{L}$ の固有関数 $|\varphi_{mn}\rangle$ は $\hat{L}_x$ の固有関数 $|X_m\rangle$ と $\hat{L}_y$ の固有関数 $|Y_n\rangle$ のテンソル積 $|\varphi_{mn}\rangle = |X_m\rangle \otimes |Y_n\rangle$ で与えられる。$\hat{L}_x$ の固有値・固有関数

は以下のように求められる。$-\partial_x^2 X(x) = \lambda X(x)$ の一般解は $k = \sqrt{\lambda}$ とおくと $X(x) = A\sin(kx) + B\cos(kx)$ である。$X'(0) = 0$ より $A = 0$ である。さらに，$X'(a) = 0$ より $k = \frac{m\pi}{a}\,(m = 0, 1, 2, \cdots)$ である。したがって，$\hat{L}_x$ の固有値は $\lambda_m = k_m^2 = \frac{m^2\pi^2}{a^2}$ である。B は $X_m(x)$ が正規化されるように決める。$m = 0$ のとき $\int_0^a dx\,|B|^2 = a|B|^2 = 1$ より，$B = \sqrt{\frac{1}{a}}$ と選べばよい。$m = 1, 2, \cdots$ のとき $\int_0^a dx\,|B\cos(k_m z)|^2 = \frac{a}{2}|B|^2 = 1$ より，$B = \sqrt{\frac{2}{a}}$ と選べばよい。$\hat{L}_y$ の固有値・固有関数についても同様に求められる。以上より，

$$\text{固有値：} k_{mn}^2 = k_m^2 + k_n^2 \qquad \text{固有関数：} \varphi_{mn}(x, y) = X_m(x)Y_n(y) \tag{7.3.129}$$

$$X_m(x) = \begin{cases} \sqrt{\frac{1}{a}} & (m = 0) \\ \sqrt{\frac{2}{a}}\cos(k_m x) & (m = 1, 2, \cdots) \end{cases} \qquad Y_n(y) = \begin{cases} \sqrt{\frac{1}{b}} & (n = 0) \\ \sqrt{\frac{2}{b}}\cos(k_n y) & (n = 1, 2, \cdots) \end{cases} \tag{7.3.130}$$

$$k_m = \frac{m\pi}{a} \quad (m = 0, 1, 2, \cdots) \qquad k_n = \frac{n\pi}{b} \quad (n = 0, 1, 2, \cdots) \tag{7.3.131}$$

である。
(2)$\{\,|\varphi_{mn}\rangle \mid m = 0, 1, 2, \cdots, n = 0, 1, 2, \cdots\}$ は完全正規直交系であるから，$\hat{L}$ のスペクトル分解は

$$\hat{L} = \sum_{mn} k_{mn}^2\,|\varphi_{mn}\rangle\langle\varphi_{mn}| \tag{7.3.132}$$

となる。
(3)TE_{mn} モードを考え (7.3.127) において $u(x, y) = \varphi_{mn}(x, y)$ とすると，$k^2 = k_{mn}^2$，つまり，$k_z = \sqrt{\omega^2/c^2 - k_{mn}^2}$ と書ける。k_z が実数となるためには，$\omega \geq ck_{mn}$ でなければならない。したがって，TE_{mn} モードの遮断周波数は $\omega_{\mathrm{c}} = ck_{mn} = c\sqrt{(m\pi/a)^2 + (n\pi/b)^2}$ である[12]。

7.3.16 円形導波管 (TM モード)

例題 42. 円形 (半径 a) の断面をもつ中空の導波管を伝搬する電磁波について考える。導波管内部の領域を $\Omega = \{(\rho, \phi, z) \mid 0 \leq \rho \leq a, 0 \leq \phi \leq 2\pi, -\infty < z < \infty\}$

[12] $(m, n) = (0, 0)$ の解は静磁場となるため，TE_{00} モードは考えません。したがって，矩形導波管 $(a > b)$ の場合，最小の遮断周波数をもつ TE モードは TE_{10} モードとなります。

とする。電磁波はTMモードであるとし，電場ベクトルの z 成分は $E_z(\rho,\phi,z,t)=u(\rho,\phi)e^{ik_z z}e^{-i\omega t}$ と表されるとする。このとき，$u(\rho,\phi)$ はヘルムホルツ方程式

$$\begin{aligned}&\left(-\mathscr{L}+k^2\right)u(\rho,\phi)=0 \qquad \mathscr{L}=-\frac{1}{\rho}\frac{\partial}{\partial\rho}\rho\frac{\partial}{\partial\rho}+\frac{1}{\rho^2}\ell_z^2\\&\ell_z=-i\frac{\partial}{\partial\phi} \qquad u(a,\phi)=0\ (0\le\phi\le 2\pi)\end{aligned} \tag{7.3.133}$$

を満たす。ここで，c を光速として $k^2=\omega^2/c^2-k_z^2$ である。ρ，ϕ を変数とする関数の関数空間を V_ρ(重み関数：ρ)，V_ϕ とするとき，(7.3.133) は $V_\rho\otimes V_\phi$ における $u(\rho,\phi)=\langle\rho\phi|u\rangle$ なる関数 $|u\rangle$ とエルミート演算子 $\hat{L}$ を用いて

$$\begin{aligned}&\left(-\hat{L}+k^2\hat{I}\right)|u\rangle=0 \qquad \hat{I}=\hat{I}_\rho\otimes\hat{I}_\phi\\&\hat{L}=\int_0^a\rho d\rho\,|\rho\rangle\left(-\frac{1}{\rho}\frac{\partial}{\partial\rho}\rho\frac{\partial}{\partial\rho}\right)\langle\rho|\otimes\hat{I}_\phi+\int_0^a\rho d\rho\,|\rho\rangle\,\frac{1}{\rho^2}\,\langle\rho|\otimes\hat{l}_z^2\\&\hat{l}_z=\int_0^{2\pi}d\phi\,|\phi\rangle\,\ell_z\,\langle\phi| \qquad \hat{I}_\rho=\int_0^a\rho d\rho\,|\rho\rangle\langle\rho| \qquad \hat{I}_\phi=\int_0^{2\pi}d\phi\,|\phi\rangle\langle\phi|\end{aligned} \tag{7.3.134}$$

と表せる。ここで，$|\rho\rangle$，$|\phi\rangle$ は V_ρ, V_ϕ のデルタ関数 $\langle\rho|\rho'\rangle=\frac{1}{\rho}\delta(\rho-\rho')$，$\langle\phi|\phi'\rangle=\delta(\phi-\phi')$ であり，$|\rho\phi\rangle=|\rho\rangle\otimes|\phi\rangle$ は $V_\rho\otimes V_\phi$ のデルタ関数 $\langle\rho\phi|\rho'\phi'\rangle=\frac{1}{\rho}\delta(\rho-\rho')\delta(\phi-\phi')$ である[13]。以下の問いに答えよ。

(1) $\hat{L}$ の固有値 k_{mn}^2 および正規化された固有関数 $\varphi_{mn}(\rho,\phi)=\langle\rho\phi|\varphi_{mn}\rangle$ を求めよ。

(2) $\hat{L}$ のスペクトル分解を求めよ。

(3) 電磁波が伝搬するためには k_z は実数でなければならない。このことから TM_{mn} モードの遮断周波数 ω_c を求めよ。

[解答]
(1)$[\hat{l}_z,\hat{L}]=0$ であるから，$\hat{l}_z$ と $\hat{L}$ は同時対角化可能である。$\hat{l}_z$ は角運動量演算子の z 成分であるから，固有値は m (m: 整数)，固有関数は $\Phi_m(\phi)=\langle\phi|\Phi_m\rangle=\frac{1}{\sqrt{2\pi}}e^{im\phi}$ である。次に，$\hat{l}_z$ の固有値 m に対応する V_ϕ における $\hat{l}_z$ の固有空間を $W_m=\mathrm{span}(|\Phi_m\rangle)$ として，$V_\rho\otimes W_m$ における $\hat{L}$ の固有値問題を考える。$\langle\rho\phi|\varphi_{mn}\rangle=R(\rho)\Phi_m(\phi)$ とすると，$R(\rho)$ は

$$\left(-\frac{1}{\rho}\frac{\partial}{\partial\rho}\rho\frac{\partial}{\partial\rho}+\frac{m^2}{\rho^2}\right)R(\rho)=\lambda R(\rho) \tag{7.3.135}$$

[13]重み付き内積の場合のデルタ関数については §5.2.5 の (5.2.74) および補章 C.1 を参照してください。

を満たす。$k=\sqrt{\lambda}$，$\zeta=k\rho$，$y(\zeta)=R(\rho)$ とおくと，(7.3.135) は

$$\frac{d^2}{d\zeta^2}y+\frac{1}{\zeta}\frac{d}{d\zeta}y+\left(1-\frac{m^2}{\zeta^2}\right)y=0 \tag{7.3.136}$$

と書ける。(7.3.136) はベッセルの微分方程式であり，原点で正則な解はベッセル関数 $J_m(\zeta)$ で与えられる。境界条件 $R(a)=0$ より，k は $J_m(\zeta)$ の零点 j_{mn} から決まる。ここで，$J_m(j_{mn})=0\,(n=1,2,\cdots)$ である。よって $R_{mn}(\rho)=A_{mn}J_m(k_{mn}\rho)$ である。正規化因子 A_{mn} は $\int_0^a \rho d\rho\,|R_{mn}(\rho)|^2=1$ より，$A_{mn}=\sqrt{\frac{2}{J_{m+1}(j_{mn})^2a^2}}$ と選ぶ。以上より，

$$\text{固有値：}k_{mn}^2 \qquad \text{固有関数：}\varphi_{mn}(\rho,\phi)=A_{mn}J_m(k_{mn}\rho)\Phi_m(\phi) \tag{7.3.137}$$

$$k_{mn}=\frac{j_{mn}}{a} \qquad (m\text{: 整数},\ n=1,2,\cdots) \tag{7.3.138}$$

である。ただし，整数次数のベッセル関数の性質 $J_{-m}(x)=(-1)^mJ_m(x)$ より，k_{mn} の m として零または正の整数 $(m=0,1,2,\cdots)$ を考えればよい。
(2)$\{\,|\varphi_{mn}\rangle\,|\,m$: 整数, $n=1,2,\cdots\}$ は完全正規直交系であるから，$\hat{L}$ のスペクトル分解は

$$\hat{L}=\sum_{mn}k_{mn}^2\,|\varphi_{mn}\rangle\langle\varphi_{mn}| \tag{7.3.139}$$

となる。
(3)TM_{mn} モードを考え (7.3.133) において $u(\rho,\phi)=\varphi_{mn}(\rho,\phi)$ とすると，$k^2=k_{mn}^2$，つまり，$k_z=\sqrt{\omega^2/c^2-k_{mn}^2}$ と書ける。k_z が実数となるためには，$\omega\geq ck_{mn}$ でなければならない。したがって，TM_{mn} モードの遮断周波数は $\omega_\mathrm{c}=ck_{mn}=cj_{mn}/a$ である[14]。

7.3.17 円形導波管 (TE モード)

例題 43. 円形 (半径 a) の断面をもつ中空の導波管を伝搬する電磁波について考える。導波管内部の領域を $\Omega=\{(\rho,\phi,z)\,|\,0\leq\rho\leq a, 0\leq\phi\leq 2\pi, -\infty<z<\infty\}$ とする。電磁波は TE モードであるとし，磁場ベクトルの z 成分は $H_z(\rho,\phi,z,t)=$

[14]円形導波管の場合，最小の遮断周波数をもつ TM モードは TM_{01} モードとなります。

$u(\rho,\phi)e^{ik_z z}e^{-i\omega t}$ と表されるとする。このとき，$u(\rho,\phi)$ はヘルムホルツ方程式

$$\begin{aligned}
&\left(-\mathscr{L}+k^2\hat{I}\right)u(\rho,\phi)=0 \qquad \mathscr{L}=-\frac{1}{\rho}\frac{\partial}{\partial\rho}\rho\frac{\partial}{\partial\rho}+\frac{1}{\rho^2}\ell_z^2 \\
&\ell_z=-i\frac{\partial}{\partial\phi} \qquad \frac{\partial u}{\partial\rho}(a,\phi)=0\ (0\le\phi\le 2\pi)
\end{aligned} \tag{7.3.140}$$

を満たす。ここで，c を光速として $k^2=\omega^2/c^2-k_z^2$ である。ρ，ϕ を変数とする関数の関数空間を V_ρ(重み関数：ρ)，V_ϕ とするとき，(7.3.140) は $V_\rho\otimes V_\phi$ における $u(\rho,\phi)=\langle\rho\phi|u\rangle$ なる関数 $|u\rangle$ とエルミート演算子 $\hat{L}$ を用いて

$$\begin{aligned}
&\left(-\hat{L}+k^2\hat{I}\right)|u\rangle=0 \qquad \hat{I}=\hat{I}_\rho\otimes\hat{I}_\phi \\
&\hat{L}=\int_0^a\rho d\rho\,|\rho\rangle\left(-\frac{1}{\rho}\frac{\partial}{\partial\rho}\rho\frac{\partial}{\partial\rho}\right)\langle\rho|\otimes\hat{I}_\phi+\int_0^a\rho d\rho\,|\rho\rangle\,\frac{1}{\rho^2}\,\langle\rho|\otimes\hat{l}_z^2 \\
&\hat{l}_z=\int_0^{2\pi}d\phi\,|\phi\rangle\,\ell_z\,\langle\phi| \qquad \hat{I}_\rho=\int_0^a\rho d\rho\,|\rho\rangle\langle\rho| \qquad \hat{I}_\phi=\int_0^{2\pi}d\phi\,|\phi\rangle\langle\phi|
\end{aligned} \tag{7.3.141}$$

と表せる。ここで，$|\rho\rangle$，$|\phi\rangle$ は V_ρ, V_ϕ のデルタ関数 $\langle\rho|\rho'\rangle=\frac{1}{\rho}\delta(\rho-\rho')$，$\langle\phi|\phi'\rangle=\delta(\phi-\phi')$ であり，$|\rho\phi\rangle=|\rho\rangle\otimes|\phi\rangle$ は $V_\rho\otimes V_\phi$ のデルタ関数 $\langle\rho\phi|\rho'\phi'\rangle=\frac{1}{\rho}\delta(\rho-\rho')\delta(\phi-\phi')$ である[15]。以下の問いに答えよ。

(1) $\hat{L}$ の固有値 k_{mn}^2 および正規化された固有関数 $\varphi_{mn}(\rho,\phi)=\langle\rho\phi|\varphi_{mn}\rangle$ を求めよ。

(2) $\hat{L}$ のスペクトル分解を求めよ。

(3) 電磁波が伝搬するためには k_z は実数でなければならない。このことから TE_{mn} モードの遮断周波数 ω_c を求めよ。

[解答]
(1)$[\hat{l}_z,\hat{L}]=0$ であるから，$\hat{l}_z$ と $\hat{L}$ は同時対角化可能である。$\hat{l}_z$ は角運動量演算子の z 成分であるから，固有値は m (m: 整数)，固有関数は $\Phi_m(\phi)=\langle\phi|\Phi_m\rangle=\frac{1}{\sqrt{2\pi}}e^{im\phi}$ である。次に，$\hat{l}_z$ の固有値 m に対応する V_ϕ における $\hat{l}_z$ の固有空間を $W_m=\mathrm{span}(|\Phi_m\rangle)$ として，$V_\rho\otimes W_m$ における $\hat{L}$ の固有値問題を考える。$\langle\rho\phi|\varphi_{mn}\rangle=R(\rho)\Phi_m(\phi)$ とすると，$R(\rho)$ は

$$\left(-\frac{1}{\rho}\frac{\partial}{\partial\rho}\rho\frac{\partial}{\partial\rho}+\frac{m^2}{\rho^2}\right)R(\rho)=\lambda R(\rho) \tag{7.3.142}$$

[15]重み付き内積の場合のデルタ関数については §5.2.5 の (5.2.74) および補章 C.1 を参照してください。

を満たす。$k=\sqrt{\lambda}$，$\zeta=k\rho$，$y(\zeta)=R(\rho)$ とおくと，(7.3.142) は

$$\frac{d^2}{d\zeta^2}y+\frac{1}{\zeta}\frac{d}{d\zeta}y+\left(1-\frac{m^2}{\zeta^2}\right)y=0 \tag{7.3.143}$$

と書ける。(7.3.143) はベッセルの微分方程式であり，原点で正則な解はベッセル関数 $J_m(\zeta)$ で与えられる。境界条件 $R'(a)=0$ より，k は $J'_m(\zeta)$ の零点 j'_{mn} から決まる。ここで，$J'_m(j'_{mn})=0\,(n=1,2,\cdots)$ である。ただし，根 j'_{mn} として零は含めないものとする。よって $R_{mn}(\rho)=A_{mn}J_m(k_{mn}\rho)$ である。正規化因子 A_{mn} は $\int_0^a \rho d\rho\,|R_{mn}(\rho)|^2=1$ より，$A_{mn}=\sqrt{\frac{2}{(1-m^2/j'^2_{mn})J_m(j'_{mn})^2a^2}}$ と選ぶ。以上より，

$$\text{固有値：}k_{mn}^2 \qquad \text{固有関数：}\varphi_{mn}(\rho,\phi)=A_{mn}J_m(k_{mn}\rho)\Phi_m(\phi) \tag{7.3.144}$$

$$k_{mn}=\frac{j'_{mn}}{a} \qquad (m\text{: 整数},\ n=1,2,\cdots) \tag{7.3.145}$$

である。ただし，整数次数のベッセル関数の性質 $J_{-m}(x)=(-1)^mJ_m(x)$ より，k_{mn} の m として零または正の整数 $(m=0,1,2,\cdots)$ を考えればよい。
(2)$\{\,|\varphi_{mn}\rangle\,|\,m$: 整数, $n=1,2,\cdots\}$ は完全正規直交系であるから，$\hat{L}$ のスペクトル分解は

$$\hat{L}=\sum_{mn}k_{mn}^2\,|\varphi_{mn}\rangle\langle\varphi_{mn}| \tag{7.3.146}$$

となる。
(3)TE_{mn} モードを考え (7.3.140) において $u(\rho,\phi)=\varphi_{mn}(\rho,\phi)$ とすると，$k^2=k_{mn}^2$，つまり，$k_z=\sqrt{\omega^2/c^2-k_{mn}^2}$ と書ける。k_z が実数となるためには，$\omega\geq ck_{mn}$ でなければならない。したがって，TE_{mn} モードの遮断周波数は $\omega_\mathrm{c}=ck_{mn}=cj'_{mn}/a$ である[16]。

7.3.18 直方体空洞共振器 (TM モード)

例題 44. 直方体 (底面の長辺 a，底面の短辺 b，高さ d) の空洞共振器における電磁波について考える。空洞共振器内部の領域を $\Omega=\{(x,y,z)\,|\,0\leq x\leq a, 0\leq y\leq b, 0\leq z\leq d\}$ とする。電磁波は TM モードであるとし，電場ベクトルの z 成分は

[16] j'_{mn} として零は含めない $(j'_{01}>0)$ としているため，円形導波管の場合に最小の遮断周波数をもつ TE モードは TE_{11} モードとなります (TE_{01} モードではありません)。

$E_z(x,y,z,t) = u(x,y,z)e^{-i\omega t}$ と表されるとする。このとき，$u(x,y,z)$ はヘルムホルツ方程式

$$\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} + k^2\right)u(x,y,z) = 0$$
$$\begin{cases} u(0,y,z) = 0,\ u(a,y,z) = 0\ (0 \le y \le b,\ 0 \le z \le d) \\ u(x,0,z) = 0,\ u(x,b,z) = 0\ (0 \le x \le a,\ 0 \le z \le d) \\ \frac{\partial u}{\partial z}(x,y,0) = 0,\ \frac{\partial u}{\partial z}(x,y,d) = 0\ (0 \le x \le a,\ 0 \le y \le b) \end{cases} \tag{7.3.147}$$

を満たす。ここで，c を光速として $k^2 = \omega^2/c^2$ である。x，y，z を変数とする関数の関数空間を V_x，V_y，V_z とするとき，(7.3.147) は $V_x \otimes V_y \otimes V_z$ における $u(x,y,z) = \langle xyz|u\rangle$ なる関数 $|u\rangle$ とエルミート演算子 $\hat{L}$ を用いて

$$\left(-\hat{L} + k^2\hat{I}\right)|u\rangle = 0 \qquad \hat{L} = \hat{L}_x \otimes \hat{I}_y \otimes \hat{I}_z + \hat{I}_x \otimes \hat{L}_y \otimes \hat{I}_z + \otimes \hat{I}_x \otimes \hat{I}_y \otimes \hat{L}_z$$
$$\hat{L}_x = \int_0^a dx\ |x\rangle\left(-\frac{\partial^2}{\partial x^2}\right)\langle x| \quad \hat{L}_y = \int_0^b dy\ |y\rangle\left(-\frac{\partial^2}{\partial y^2}\right)\langle y| \quad \hat{L}_z = \int_0^d dz\ |z\rangle\left(-\frac{\partial^2}{\partial z^2}\right)\langle z|$$
$$\hat{I} = \hat{I}_x \otimes \hat{I}_y \otimes \hat{I}_z \quad \hat{I}_x = \int_0^a dx\ |x\rangle\langle x| \quad \hat{I}_y = \int_0^b dy\ |y\rangle\langle y| \quad \hat{I}_z = \int_0^d dz\ |z\rangle\langle z| \tag{7.3.148}$$

と表せる。ここで，$|x\rangle$，$|y\rangle$，$|z\rangle$ は V_x，V_y，V_z のデルタ関数 $\langle x|x'\rangle = \delta(x-x')$，$\langle y|y'\rangle = \delta(y-y')$，$\langle z|z'\rangle = \delta(z-z')$ であり，$|xyz\rangle = |x\rangle \otimes |y\rangle \otimes |z\rangle$ は $V_x \otimes V_y \otimes V_z$ のデルタ関数 $\langle xyz|x'y'z'\rangle = \delta(x-x')\delta(y-y')\delta(z-z')$ である。以下の問いに答えよ。

(1) $\hat{L}$ の固有値 k_{mnp}^2 および正規化された固有関数 $\varphi_{mnp}(x,y,z) = \langle xyz|\varphi_{mnp}\rangle$ を求めよ。

(2) $\hat{L}$ のスペクトル分解を求めよ。

[解答]

(1)$\hat{L}$ は V_x，V_y，V_z の演算子のテンソル積の和として表されているから，$\hat{L}$ の固有値 k_{mnp}^2 は $\hat{L}_x$，$\hat{L}_y$，$\hat{L}_z$ の固有値 λ_m，λ_n，λ_p の和 $k_{mn}^2 = \lambda_m + \lambda_n + \lambda_p$ で与えられ，また，$\hat{L}$ の固有関数 $|\varphi_{mnp}\rangle$ は $\hat{L}_x$，$\hat{L}_y$，$\hat{L}_z$ の固有関数 $|X_m\rangle$，$|Y_n\rangle$，$|Z_p\rangle$ のテンソル積 $|\varphi_{mnp}\rangle = |X_m\rangle \otimes |Y_n\rangle \otimes |Z_p\rangle$ で与えられる。$\hat{L}_x$ の固有値・固有関数は境界条件がディリクレ境界条件であることに注意して以下のように求められる。$-\partial_x^2 X(x) = \lambda X(x)$ の一般解は $k = \sqrt{\lambda}$ とおくと $X(x) = A\sin(kx) + B\cos(kx)$ である。$X(0) = 0$ より $B = 0$ である。さらに，$X(a) = 0$ より $k = \frac{m\pi}{a}$ $(m = 1, 2, \cdots)$ で

ある。したがって，$\hat{L}_x$ の固有値は $\lambda_m = k_m^2 = \frac{m^2\pi^2}{a^2}$ である。A は $X_m(x)$ が正規化されるように決める。$\int_0^a dx\,|A\sin(k_m x)|^2 = \frac{a}{2}|A|^2 = 1$ より，$A = \sqrt{\frac{2}{a}}$ と選べばよい。$\hat{L}_y$ の固有値・固有関数についても同様に求められる。一方，$\hat{L}_z$ の固有値・固有関数は境界条件がノイマン境界条件であることに注意して以下のように求められる。$-\partial_z^2 Z(z) = \lambda Z(z)$ の一般解は $k = \sqrt{\lambda}$ とおくと $Z(z) = A\sin(kz) + B\cos(kz)$ である。$\frac{\partial Z}{\partial z}(0) = 0$ より $A = 0$ である。さらに，$\frac{\partial Z}{\partial z}(d) = 0$ より $k = \frac{p\pi}{d}\ (p = 0, 1, 2, \cdots)$ である。したがって，$\hat{L}_z$ の固有値は $\lambda_p = k_p^2 = \frac{p^2\pi^2}{d^2}$ である。B は $Z_p(z)$ が正規化されるように決める。$p = 0$ のとき $\int_0^d dz\,|B|^2 = d|B|^2 = 1$ より $B = \sqrt{\frac{1}{d}}$ と選べばよい。$p = 1, 2, \cdots$ のとき $\int_0^d dz\,|B\cos(k_p z)|^2 = \frac{d}{2}|B|^2 = 1$ より，$B = \sqrt{\frac{2}{d}}$ と選べばよい。以上より，TM_{mnp} モードについて，

$$\text{固有値：} k_{mnp}^2 = k_m^2 + k_n^2 + k_p^2 \qquad \text{固有関数：} \varphi_{mnp}(x, y, z) = X_m(x)Y_n(y)Z_p(z) \tag{7.3.149}$$

$$X_m(x) = \sqrt{\frac{2}{a}}\sin(k_m x) \quad Y_n(y) = \sqrt{\frac{2}{b}}\sin(k_n y) \quad Z_p(z) = \begin{cases} \sqrt{\frac{1}{d}} & (p = 0) \\ \sqrt{\frac{2}{d}}\cos(k_p z) & (p = 1, 2, \cdots) \end{cases} \tag{7.3.150}$$

$$k_m = \frac{m\pi}{a}\ (m = 1, 2, \cdots) \quad k_n = \frac{n\pi}{b}\ (n = 1, 2, \cdots) \quad k_p = \frac{p\pi}{d}\ (p = 0, 1, 2, \cdots) \tag{7.3.151}$$

である。
(2)$\{\,|\varphi_{mnp}\rangle \mid m = 1, 2, \cdots, n = 1, 2, \cdots, p = 0, 1, 2, \cdots\}$ は完全正規直交系であるから，$\hat{L}$ のスペクトル分解は

$$\hat{L} = \sum_{mnp} k_{mnp}^2\,|\varphi_{mnp}\rangle\langle\varphi_{mnp}| \tag{7.3.152}$$

となる。

7.3.19 直方体空洞共振器 (TE モード)

例題 45. 直方体 (底面の長辺 a，底面の短辺 b，高さ d) の空洞共振器における電磁波について考える。空洞共振器内部の領域を $\Omega = \{(x, y, z) \mid 0 \le x \le a, 0 \le y \le$

$b, 0 \leq z \leq d\}$ とする。電磁波は TE モードであるとし，磁場ベクトルの z 成分は $H_z(x,y,z,t) = u(x,y,z)e^{-i\omega t}$ と表されるとする。このとき，$u(x,y,z)$ はヘルムホルツ方程式

$$\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} + k^2\right)u(x,y,z) = 0$$
$$\begin{cases} \frac{\partial u}{\partial x}(0,y,z) = 0,\ \frac{\partial u}{\partial x}(a,y,z) = 0\ (0 \leq y \leq b,\ 0 \leq z \leq d) \\ \frac{\partial u}{\partial y}(x,0,z) = 0,\ \frac{\partial u}{\partial y}(x,b,z) = 0\ (0 \leq x \leq a,\ 0 \leq z \leq d) \\ u(x,y,0) = 0,\ u(x,y,d) = 0\ (0 \leq x \leq a,\ 0 \leq y \leq b) \end{cases} \tag{7.3.153}$$

を満たす。ここで，c を光速として $k^2 = \omega^2/c^2$ である。x，y，z を変数とする関数の関数空間を V_x，V_y，V_z とするとき，(7.3.153) は $V_x \otimes V_y \otimes V_z$ における $u(x,y,z) = \langle xyz|u\rangle$ なる関数 $|u\rangle$ とエルミート演算子 $\hat{L}$ を用いて

$$\left(-\hat{L} + k^2\hat{I}\right)|u\rangle = 0 \qquad \hat{L} = \hat{L}_x \otimes \hat{I}_y \otimes \hat{I}_z + \hat{I}_x \otimes \hat{L}_y \otimes \hat{I}_z + \otimes\hat{I}_x \otimes \hat{I}_y \otimes \hat{L}_z$$
$$\hat{L}_x = \int_0^a dx\ |x\rangle\left(-\frac{\partial^2}{\partial x^2}\right)\langle x| \quad \hat{L}_y = \int_0^b dy\ |y\rangle\left(-\frac{\partial^2}{\partial y^2}\right)\langle y| \quad \hat{L}_z = \int_0^d dz\ |z\rangle\left(-\frac{\partial^2}{\partial z^2}\right)\langle z|$$
$$\hat{I} = \hat{I}_x \otimes \hat{I}_y \otimes \hat{I}_z \quad \hat{I}_x = \int_0^a dx\ |x\rangle\langle x| \quad \hat{I}_y = \int_0^b dy\ |y\rangle\langle y| \quad \hat{I}_z = \int_0^d dz\ |z\rangle\langle z| \tag{7.3.154}$$

と表せる。ここで，$|x\rangle$，$|y\rangle$，$|z\rangle$ は V_x，V_y，V_z のデルタ関数 $\langle x|x'\rangle = \delta(x-x')$，$\langle y|y'\rangle = \delta(y-y')$，$\langle z|z'\rangle = \delta(z-z')$ であり，$|xyz\rangle = |x\rangle \otimes |y\rangle \otimes |z\rangle$ は $V_x \otimes V_y \otimes V_z$ のデルタ関数 $\langle xyz|x'y'z'\rangle = \delta(x-x')\delta(y-y')\delta(z-z')$ である。以下の問いに答えよ。

(1) $\hat{L}$ の固有値 k_{mnp}^2 および正規化された固有関数 $\varphi_{mnp}(x,y,z) = \langle xyz|\varphi_{mnp}\rangle$ を求めよ。

(2) $\hat{L}$ のスペクトル分解を求めよ。

[解答]

(1)$\hat{L}$ は V_x，V_y，V_z の演算子のテンソル積の和として表されているから，$\hat{L}$ の固有値 k_{mnp}^2 は $\hat{L}_x$，$\hat{L}_y$，$\hat{L}_z$ の固有値 λ_m，λ_n，λ_p の和 $k_{mn}^2 = \lambda_m + \lambda_n + \lambda_p$ で与えられ，また，$\hat{L}$ の固有関数 $|\varphi_{mnp}\rangle$ は $\hat{L}_x$，$\hat{L}_y$，$\hat{L}_z$ の固有関数 $|X_m\rangle$，$|Y_n\rangle$，$|Z_p\rangle$ のテンソル積 $|\varphi_{mnp}\rangle = |X_m\rangle \otimes |Y_n\rangle \otimes |Z_p\rangle$ で与えられる。$\hat{L}_x$ の固有値・固有関数は境界条件がノイマン境界条件であることに注意して以下のように求められる。$-\partial_x^2 X(x) = \lambda X(x)$ の一般解は $k = \sqrt{\lambda}$ とおくと $X(x) = A\sin(kx) + B\cos(kx)$ である。$\frac{\partial X}{\partial x}(0) = 0$ よ

り $A=0$ である。さらに，$\frac{\partial X}{\partial x}(d)=0$ より $k=\frac{m\pi}{a}\,(m=0,1,2,\cdots)$ である。したがって，$\hat{L}_x$ の固有値は $\lambda_m=k_m^2=\frac{m^2\pi^2}{a^2}$ である。B は $X_m(x)$ が正規化されるように決める。$m=0$ のとき $\int_0^a dx\,|B|^2=a|B|^2=1$ より $B=\sqrt{\frac{1}{a}}$ と選べばよい。$m=1,2,\cdots$ のとき $\int_0^a dx\,|B\cos(k_m x)|^2=\frac{a}{2}|B|^2=1$ より，$B=\sqrt{\frac{2}{a}}$ と選べばよい。$\hat{L}_y$ の固有値・固有関数についても同様に求められる。一方，$\hat{L}_z$ の固有値・固有関数は境界条件がディリクレ境界条件であることに注意して以下のように求められる。$-\partial_z^2 Z(z)=\lambda Z(z)$ の一般解は $k=\sqrt{\lambda}$ とおくと $Z(z)=A\sin(kz)+B\cos(kz)$ である。$Z(0)=0$ より $B=0$ である。さらに，$Z(d)=0$ より $k=\frac{p\pi}{d}\,(p=1,2,\cdots)$ である。したがって，$\hat{L}_z$ の固有値は $\lambda_p=k_p^2=\frac{p^2\pi^2}{d^2}$ である。A は $Z_p(z)$ が正規化されるように決める。$\int_0^d dz\,|A\sin(k_p z)|^2=\frac{d}{2}|A|^2=1$ より，$A=\sqrt{\frac{2}{d}}$ と選べばよい。以上より，TE_{mnp} モードについて，

$$\text{固有値：}k_{mnp}^2=k_m^2+k_n^2+k_p^2 \qquad \text{固有関数：}\varphi_{mnp}(x,y,z)=X_m(x)Y_n(y)Z_p(z) \tag{7.3.155}$$

$$X_m(x)=\begin{cases}\sqrt{\frac{1}{a}} & (m=0)\\ \sqrt{\frac{2}{a}}\cos(k_m x) & (m=1,2,\cdots)\end{cases} \qquad Y_n(y)=\begin{cases}\sqrt{\frac{1}{b}} & (n=0)\\ \sqrt{\frac{2}{b}}\cos(k_n y) & (n=1,2,\cdots)\end{cases}$$
$$Z_p(z)=\sqrt{\frac{2}{d}}\sin(k_p z) \tag{7.3.156}$$

$$k_m=\frac{m\pi}{a}\,(m=0,1,2,\cdots) \quad k_n=\frac{n\pi}{b}\,(n=0,1,2,\cdots) \quad k_p=\frac{p\pi}{d}\,(p=1,2,\cdots) \tag{7.3.157}$$

である。
(2)$\{\,|\varphi_{mnp}\rangle \mid m=1,2,\cdots,n=1,2,\cdots,p=0,1,2,\cdots\}$ は完全正規直交系であるから，$\hat{L}$ のスペクトル分解は

$$\hat{L}=\sum_{mnp}k_{mnp}^2\,|\varphi_{mnp}\rangle\langle\varphi_{mnp}| \tag{7.3.158}$$

となる。

7.3.20　円筒空洞共振器 (TM モード)

例題 46. 円筒 (底面の半径 a，高さ d) の空洞共振器における電磁波について考える。空洞共振器内部の領域を $\Omega = \{(\rho,\phi,z)\,|\,0 \le \rho \le a, 0 \le \phi \le 2\pi, 0 \le z \le d\}$ とする。電磁波は TM モードであるとし，電場ベクトルの z 成分は $E_z(\rho,\phi,z,t) = u(\rho,\phi,z)e^{-i\omega t}$ と表されるとする。このとき，$u(\rho,\phi,z)$ はヘルムホルツ方程式

$$
\begin{gathered}
\left(-\mathscr{L} + k^2\right)u(\rho,\phi,z) = 0 \qquad \mathscr{L} = -\frac{1}{\rho}\frac{\partial}{\partial\rho}\rho\frac{\partial}{\partial\rho} + \frac{1}{\rho^2}\ell_z^2 - \frac{\partial^2}{\partial z^2} \qquad \ell_z = -i\frac{\partial}{\partial\phi} \\
\begin{cases} u(a,\phi,z) = 0 \ (0 \le \phi \le 2\pi,\ 0 \le z \le d) \\ \frac{\partial u}{\partial z}(\rho,\phi,0) = 0,\ \frac{\partial u}{\partial z}(\rho,\phi,d) = 0 \ (0 \le \rho \le a,\ 0 \le \phi \le 2\pi) \end{cases}
\end{gathered}
\tag{7.3.159}
$$

を満たす。ここで，c を光速として $k^2 = \omega^2/c^2$ である。ρ，ϕ，z を変数とする関数の関数空間を V_ρ(重み関数：ρ)，V_ϕ，V_z とするとき，(7.3.159) は $V_\rho \otimes V_\phi \otimes V_z$ における $u(\rho,\phi,z) = \langle\rho\phi z|u\rangle$ なる関数 $|u\rangle$ とエルミート演算子 $\hat{L}$ を用いて

$$
\begin{aligned}
&\left(-\hat{L} + k^2\hat{I}\right)|u\rangle = 0 \quad \hat{L} = \hat{L}_{\rho\phi} \otimes \hat{I}_z + \hat{I}_\rho \otimes \hat{I}_\phi \otimes \hat{L}_z \quad \hat{I} = \hat{I}_\rho \otimes \hat{I}_\phi \otimes \hat{I}_z \\
&\hat{L}_{\rho\phi} = \int_0^a \rho d\rho\ |\rho\rangle\left(-\frac{1}{\rho}\frac{\partial}{\partial\rho}\rho\frac{\partial}{\partial\rho}\right)\langle\rho| \otimes \hat{I}_\phi + \int_0^a \rho d\rho\ |\rho\rangle\,\frac{1}{\rho^2}\,\langle\rho| \otimes \hat{l}_z^2 \\
&\hat{L}_z = \int_0^d dz\ |z\rangle\left(-\frac{\partial^2}{\partial z^2}\right)\langle z| \qquad \hat{l}_z = \int_0^{2\pi} d\phi\ |\phi\rangle\,\ell_z\,\langle\phi| \\
&\hat{I}_\rho = \int_0^a \rho d\rho\ |\rho\rangle\langle\rho| \quad \hat{I}_\phi = \int_0^{2\pi} d\phi\ |\phi\rangle\langle\phi| \quad \hat{I}_z = \int_0^d dz\ |z\rangle\langle z|
\end{aligned}
\tag{7.3.160}
$$

と表せる。ここで，$|\rho\rangle$，$|\phi\rangle$，$|z\rangle$ は V_ρ，V_ϕ，V_z のデルタ関数 $\langle\rho|\rho'\rangle = \frac{1}{\rho}\delta(\rho-\rho')$，$\langle\phi|\phi'\rangle = \delta(\phi-\phi')$，$\langle z|z'\rangle = \delta(z-z')$ であり，$|\rho\phi z\rangle = |\rho\rangle \otimes |\phi\rangle \otimes |z\rangle$ は $V_\rho \otimes V_\phi \otimes V_z$ のデルタ関数 $\langle\rho\phi z|\rho'\phi' z'\rangle = \frac{1}{\rho}\delta(\rho-\rho')\delta(\phi-\phi')\delta(z-z')$ である[17]。以下の問いに答えよ。

(1) $\hat{L}$ の固有値 k_{mnp}^2 および正規化された固有関数 $\varphi_{mnp}(\rho,\phi,z) = \langle\rho\phi z|\varphi_{mnp}\rangle$ を求めよ。

(2) $\hat{L}$ のスペクトル分解を求めよ。

[解答]
(1)$\hat{L}$ は $V_\rho \otimes V_\phi$ の演算子と V_z の演算子のテンソル積の和として表されているから, $\hat{L}$

[17]重み付き内積の場合のデルタ関数については §5.2.5 の (5.2.74) および補章 C.1 を参照してください。

の固有値 k_{mnp}^2 は $\hat{L}_{\rho\phi}$ の固有値 λ_{mn} と $\hat{L}_z$ の固有値 λ_p の和 $k_{mnp}^2 = \lambda_{mn} + \lambda_p$ で与えられ, また, $\hat{L}$ の固有関数 $|\varphi_{mnp}\rangle$ は $\hat{L}_{\rho\phi}$ の固有関数 $|\chi_{mn}\rangle$ と $\hat{L}_z$ の固有関数 $|Z_p\rangle$ のテンソル積 $|\varphi_{mnp}\rangle = |\chi_{mn}\rangle \otimes |Z_p\rangle$ で与えられる。$\hat{L}_{\rho\phi}$ の固有値・固有関数は境界条件がディリクレ境界条件であることに注意して以下のように求められる。$[\hat{l}_z, \hat{L}_{\rho\phi}] = 0$ であるから，$\hat{l}_z$ と $\hat{L}_{\rho\phi}$ は同時対角化可能である。$\hat{l}_z$ は角運動量演算子の z 成分であるから，固有値は m (m: 整数)，固有関数は $\Phi_m(\phi) = \langle\phi|\Phi_m\rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}e^{im\phi}$ である。次に，$\hat{l}_z$ の固有値 m に対応する V_ϕ における $\hat{l}_z$ の固有空間を $W_m = \mathrm{span}(|\Phi_m\rangle)$ として，$V_\rho \otimes W_m$ における $\hat{L}_{\rho\phi}$ の固有値問題を考える。$\langle\rho\phi|\chi_{mn}\rangle = R(\rho)\Phi_m(\phi)$ とすると，$R(\rho)$ は

$$\left(-\frac{1}{\rho}\frac{\partial}{\partial\rho}\rho\frac{\partial}{\partial\rho} + \frac{m^2}{\rho^2}\right)R(\rho) = \lambda R(\rho) \tag{7.3.161}$$

を満たす。$k = \sqrt{\lambda}$，$\zeta = k\rho$，$y(\zeta) = R(\rho)$ とおくと，(7.3.161) は

$$\frac{d^2}{d\zeta^2}y + \frac{1}{\zeta}\frac{d}{d\zeta}y + \left(1 - \frac{m^2}{\zeta^2}\right)y = 0 \tag{7.3.162}$$

と書ける。(7.3.162) はベッセルの微分方程式であり，原点で正則な解はベッセル関数 $J_m(\zeta)$ で与えられる。境界条件 $R(a) = 0$ より，k は $J_m(\zeta)$ の零点 j_{mn} から決まる。ここで，$J_m(j_{mn}) = 0\,(n = 1, 2, \cdots)$ である。よって $R_{mn}(\rho) = A_{mn}J_m(k_{mn}\rho)$ である。正規化因子 A_{mn} は $\int_0^a \rho d\rho\,|R_{mn}(\rho)|^2 = 1$ より，$A_{mn} = \sqrt{\frac{2}{J_{m+1}(j_{mn})^2a^2}}$ と選ぶ。一方，$\hat{L}_z$ の固有値・固有関数は境界条件がノイマン境界条件であることに注意して以下のように求められる。$-\partial_z^2 Z(z) = \lambda Z(z)$ の一般解は $k = \sqrt{\lambda}$ とおくと $Z(z) = A\sin(kz) + B\cos(kz)$ である。$\frac{\partial Z}{\partial z}(0) = 0$ より $A = 0$ である。さらに，$\frac{\partial Z}{\partial z}(d) = 0$ より $k = \frac{p\pi}{d}\,(p = 0, 1, 2, \cdots)$ である。したがって，$\hat{L}_z$ の固有値は $\lambda_p = k_p^2 = \frac{p^2\pi^2}{d^2}$ である。B は $Z_p(z)$ が正規化されるように決める。$p = 0$ のとき $\int_0^d dz\,|B|^2 = d|B|^2 = 1$ より $B = \sqrt{\frac{1}{d}}$ と選べばよい。$p = 1, 2, \cdots$ のとき $\int_0^d dz\,|B\cos(k_pz)|^2 = \frac{d}{2}|B|^2 = 1$ より，$B = \sqrt{\frac{2}{d}}$ と選べばよい。以上より，TM_{mnp} モードについて，

$$\text{固有値：}k_{mnp}^2 = k_{mn}^2 + k_p^2 \qquad \text{固有関数：}\varphi_{mnp}(\rho, \phi, z) = A_{mn}J_m(k_{mn}\rho)\Phi_m(\phi)Z_p(z) \tag{7.3.163}$$

$$k_{mn} = \frac{j_{mn}}{a} \quad (m\text{: 整数}, n = 1, 2, \cdots) \qquad k_p = \frac{p\pi}{d} \quad (p = 0, 1, 2, \cdots) \tag{7.3.164}$$

である。ただし，整数次数のベッセル関数の性質 $J_{-m}(x) = (-1)^m J_m(x)$ より，k_{mn} の m として零または正の整数 $(m = 0, 1, 2, \cdots)$ を考えればよい。

(2)$\{\,|\varphi_{mnp}\rangle\,|\,m$: 整数, $n=1,2,\cdots,\,p=0,1,2,\cdots\}$ は完全正規直交系であるから，$\hat{L}$ のスペクトル分解は

$$\hat{L}=\sum_{mnp}k_{mnp}^2\,|\varphi_{mnp}\rangle\langle\varphi_{mnp}| \tag{7.3.165}$$

となる。

7.3.21 円筒空洞共振器 (TE モード)

例題 47. 円筒 (底面の半径 a，高さ d) の空洞共振器における電磁波について考える。空洞共振器内部の領域を $\Omega=\{(\rho,\phi,z)\,|\,0\le\rho\le a, 0\le\phi\le 2\pi, 0\le z\le d\}$ とする。電磁波は TE モードであるとし，磁場ベクトルの z 成分は $H_z(\rho,\phi,z,t)=u(\rho,\phi,z)e^{-i\omega t}$ と表されるとする。このとき，$u(\rho,\phi,z)$ はヘルムホルツ方程式

$$\begin{gathered}\left(-\mathscr{L}+k^2\right)u(\rho,\phi,z)=0 \qquad \mathscr{L}=-\frac{1}{\rho}\frac{\partial}{\partial\rho}\rho\frac{\partial}{\partial\rho}+\frac{1}{\rho^2}\ell_z^2-\frac{\partial^2}{\partial z^2} \qquad \ell_z=-i\frac{\partial}{\partial\phi}\\ \begin{cases}\frac{\partial u}{\partial\rho}(a,\phi,z)=0\ (0\le\phi\le 2\pi,\ 0\le z\le d)\\ u(\rho,\phi,0)=0,\ u(\rho,\phi,d)=0\ (0\le\rho\le a,\ 0\le\phi\le 2\pi)\end{cases}\end{gathered} \tag{7.3.166}$$

を満たす。ここで，c を光速として $k^2=\omega^2/c^2$ である。ρ，ϕ，z を変数とする関数の関数空間を V_ρ(重み関数：ρ)，V_ϕ，V_z とするとき，(7.3.166) は $V_\rho\otimes V_\phi\otimes V_z$ における $u(\rho,\phi,z)=\langle\rho\phi z|u\rangle$ なる関数 $|u\rangle$ とエルミート演算子 $\hat{L}$ を用いて

$$\begin{gathered}\left(-\hat{L}+k^2\hat{I}\right)|u\rangle=0 \quad \hat{L}=\hat{L}_{\rho\phi}\otimes\hat{I}_z+\hat{I}_\rho\otimes\hat{I}_\phi\otimes\hat{L}_z \quad \hat{I}=\hat{I}_\rho\otimes\hat{I}_\phi\otimes\hat{I}_z\\ \hat{L}_{\rho\phi}=\int_0^a\rho d\rho\,|\rho\rangle\left(-\frac{1}{\rho}\frac{\partial}{\partial\rho}\rho\frac{\partial}{\partial\rho}\right)\langle\rho|\otimes\hat{I}_\phi+\int_0^a\rho d\rho\,|\rho\rangle\,\frac{1}{\rho^2}\,\langle\rho|\otimes\hat{l}_z^2\\ \hat{L}_z=\int_0^d dz\,|z\rangle\left(-\frac{\partial^2}{\partial z^2}\right)\langle z| \qquad \hat{l}_z=\int_0^{2\pi}d\phi\,|\phi\rangle\,\ell_z\,\langle\phi|\\ \hat{I}_\rho=\int_0^a\rho d\rho\,|\rho\rangle\langle\rho| \quad \hat{I}_\phi=\int_0^{2\pi}d\phi\,|\phi\rangle\langle\phi| \quad \hat{I}_z=\int_0^d dz\,|z\rangle\langle z|\end{gathered} \tag{7.3.167}$$

と表せる。ここで，$|\rho\rangle$，$|\phi\rangle$，$|z\rangle$ は V_ρ，V_ϕ，V_z のデルタ関数 $\langle\rho|\rho'\rangle=\frac{1}{\rho}\delta(\rho-\rho')$，$\langle\phi|\phi'\rangle=\delta(\phi-\phi')$，$\langle z|z'\rangle=\delta(z-z')$ であり，$|\rho\phi z\rangle=|\rho\rangle\otimes|\phi\rangle\otimes|z\rangle$ は $V_\rho\otimes V_\phi\otimes V_z$ のデルタ関数 $\langle\rho\phi z|\rho'\phi'z'\rangle=\frac{1}{\rho}\delta(\rho-\rho')\delta(\phi-\phi')\delta(z-z')$ である[18]。以下の問いに答えよ。

[18]重み付き内積の場合のデルタ関数については §5.2.5 の (5.2.74) および補章 C.1 を参照してください。

(1) $\hat{L}$ の固有値 k_{mnp}^2 および正規化された固有関数 $\varphi_{mnp}(\rho,\phi,z) = \langle \rho\phi z|\varphi_{mnp}\rangle$ を求めよ。

(2) $\hat{L}$ のスペクトル分解を求めよ。

[解答]
(1)$\hat{L}$ は $V_\rho \otimes V_\phi$ の演算子と V_z の演算子のテンソル積の和として表されているから, $\hat{L}$ の固有値 k_{mnp}^2 は $\hat{L}_{\rho\phi}$ の固有値 λ_{mn} と $\hat{L}_z$ の固有値 λ_p の和 $k_{mnp}^2 = \lambda_{mn} + \lambda_p$ で与えられ，また，$\hat{L}$ の固有関数 $|\varphi_{mnp}\rangle$ は $\hat{L}_{\rho\phi}$ の固有関数 $|\chi_{mn}\rangle$ と $\hat{L}_z$ の固有関数 $|Z_p\rangle$ のテンソル積 $|\varphi_{mnp}\rangle = |\chi_{mn}\rangle \otimes |Z_p\rangle$ で与えられる。$\hat{L}_{\rho\phi}$ の固有値・固有関数は境界条件がノイマン境界条件であることに注意して以下のように求められる。$[\,\hat{l}_z, \hat{L}_{\rho\phi}\,] = 0$ であるから，$\hat{l}_z$ と $\hat{L}_{\rho\phi}$ は同時対角化可能である。$\hat{l}_z$ は角運動量演算子の z 成分であるから，固有値は m (m: 整数)，固有関数は $\Phi_m(\phi) = \langle \phi|\Phi_m\rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}e^{im\phi}$ である。次に，$\hat{l}_z$ の固有値 m に対応する V_ϕ における $\hat{l}_z$ の固有空間を $W_m = \mathrm{span}(\,|\Phi_m\rangle)$ として，$V_\rho \otimes W_m$ における $\hat{L}_{\rho\phi}$ の固有値問題を考える。$\langle \rho\phi|\chi_{mn}\rangle = R(\rho)\Phi_m(\phi)$ とすると，$R(\rho)$ は

$$\left(-\frac{1}{\rho}\frac{\partial}{\partial\rho}\rho\frac{\partial}{\partial\rho} + \frac{m^2}{\rho^2}\right)R(\rho) = \lambda R(\rho) \tag{7.3.168}$$

を満たす。$k = \sqrt{\lambda}$，$\zeta = k\rho$，$y(\zeta) = R(\rho)$ とおくと，(7.3.168) は

$$\frac{d^2}{d\zeta^2}y + \frac{1}{\zeta}\frac{d}{d\zeta}y + \left(1 - \frac{m^2}{\zeta^2}\right)y = 0 \tag{7.3.169}$$

と書ける。(7.3.169) はベッセルの微分方程式であり，原点で正則な解はベッセル関数 $J_m(\zeta)$ で与えられる。境界条件 $R'(a) = 0$ より，k は $J_m'(\zeta)$ の零点 j_{mn}' から決まる。ここで，$J_m'(j_{mn}') = 0\,(n = 1, 2, \cdots)$ の根として $j_{01}' = 0$ は含めないものとする。よって $R_{mn}(\rho) = A_{mn}J_m(k_{mn}\rho)$ である。正規化因子 A_{mn} は $\int_0^a \rho d\rho\,|R_{mn}(\rho)|^2 = 1$ より, $A_{mn} = \sqrt{\frac{2}{(1-m^2/j_{mn}'^2)J_m(j_{mn}')^2a^2}}$ と選ぶ。一方, $\hat{L}_z$ の固有値・固有関数は境界条件がディリクレ境界条件であることに注意して以下のように求められる。$-\partial_z^2 Z(z) = \lambda Z(z)$ の一般解は $k = \sqrt{\lambda}$ とおくと $Z(z) = A\sin(kz) + B\cos(kz)$ である。$Z(0) = 0$ より $B = 0$ である。さらに，$Z(d) = 0$ より $k = \frac{p\pi}{d}\,(p = 1, 2, \cdots)$ である。したがって，$\hat{L}_z$ の固有値は $\lambda_p = k_p^2 = \frac{p^2\pi^2}{d^2}$ である。A は $Z_p(z)$ が正規化されるように決める。$\int_0^d dz\,|A\sin(k_pz)|^2 = \frac{d}{2}|A|^2 = 1$ より，$A = \sqrt{\frac{2}{d}}$ と選べばよい。以上より，TE_{mnp} モードについて,

$$\text{固有値：}k_{mnp}^2 = k_{mn}^2 + k_p^2 \qquad \text{固有関数：}\varphi_{mnp}(\rho,\phi,z) = A_{mn}J_m(k_{mn}\rho)\Phi_m(\phi)Z_p(z) \tag{7.3.170}$$

$$k_{mn} = \frac{j'_{mn}}{a} \quad (m\text{: 整数}, n = 1, 2, \cdots) \qquad k_p = \frac{p\pi}{d} \quad (p = 1, 2, \cdots) \tag{7.3.171}$$

である。ただし，整数次数のベッセル関数の性質 $J_{-m}(x) = (-1)^m J_m(x)$ より，k_{mn} の m として零または正の整数 $(m = 0, 1, 2, \cdots)$ を考えればよい。
(2)$\{\, |\varphi_{mnp}\rangle \mid m$: 整数, $n = 1, 2, \cdots, p = 1, 2, \cdots \}$ は完全正規直交系であるから，$\hat{L}$ のスペクトル分解は

$$\hat{L} = \sum_{mnp} k_{mnp}^2 \, |\varphi_{mnp}\rangle\langle\varphi_{mnp}| \tag{7.3.172}$$

となる。

補章 A　行列記法と略記法

A.1　行列記法

本書で用いる**行列記法**についてまとめておく。先頭に示してある式番号は対応する第 1 章の式のものである[1]。

(1) (1.1.16)

$$[\ |a_1\rangle \cdots\ |a_n\rangle\,] + [\ |b_1\rangle \cdots\ |b_n\rangle\,] = [\ |a_1\rangle +\ |b_1\rangle \cdots\ |a_n\rangle +\ |b_n\rangle\,] \tag{A.1.1}$$

(2) (1.1.17)

$$\lambda[\ |a_1\rangle \cdots\ |a_n\rangle\,] = [\,\lambda\,|a_1\rangle \cdots \lambda\,|a_n\rangle\,] \tag{A.1.2}$$

(3) (1.1.18)

$$\begin{bmatrix} \langle\alpha_1| \\ \vdots \\ \langle\alpha_n| \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} \langle\beta_1| \\ \vdots \\ \langle\beta_n| \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \langle\alpha_1| +\ \langle\beta_1| \\ \vdots \\ \langle\alpha_n| +\ \langle\beta_n| \end{bmatrix} \tag{A.1.3}$$

(4) (1.1.19)

$$\lambda \begin{bmatrix} \langle\alpha_1| \\ \vdots \\ \langle\alpha_n| \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \lambda\,\langle\alpha_1| \\ \vdots \\ \lambda\,\langle\alpha_n| \end{bmatrix} \tag{A.1.4}$$

[1]注意しなければならないのは，$|a_1\rangle, \cdots, |a_n\rangle$ を縦に並べたり，$\langle\alpha_1|, \cdots, \langle\alpha_n|$ を横に並べたりしてはいけないという点です。このようにしていけないのは，ベクトル，線形形式を列ベクトル，行ベクトルとして表現して考えれば明らかだと思います。ただし，ベクトルの直和や線形形式の直和を表す際にこのような表し方を用いることがありますので，この点にも注意しておく必要があります。

(5) (1.1.21)

$$\begin{bmatrix} \langle\alpha_1| \\ \vdots \\ \langle\alpha_n| \end{bmatrix} [\, |a_1\rangle \cdots |a_n\rangle \,] = \begin{bmatrix} \langle\alpha_1|a_1\rangle & \cdots & \langle\alpha_1|a_n\rangle \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \langle\alpha_n|a_1\rangle & \cdots & \langle\alpha_n|a_n\rangle \end{bmatrix} \tag{A.1.5}$$

(6) (1.1.23)

$$\hat{X}[\, |a_1\rangle \cdots |a_n\rangle \,] = [\, \hat{X}\,|a_1\rangle \cdots \hat{X}\,|a_n\rangle \,] \tag{A.1.6}$$

(7) (1.1.24)

$$\begin{bmatrix} \langle\alpha_1| \\ \vdots \\ \langle\alpha_n| \end{bmatrix} \hat{X} = \begin{bmatrix} \langle\alpha_1|\,\hat{X} \\ \vdots \\ \langle\alpha_n|\,\hat{X} \end{bmatrix} \tag{A.1.7}$$

(8) (1.1.26)

$$[\, |a_1\rangle \cdots |a_n\rangle \,] \begin{bmatrix} \langle\alpha_1| \\ \vdots \\ \langle\alpha_n| \end{bmatrix} = |a_1\rangle\langle\alpha_1| + \cdots + |a_n\rangle\langle\alpha_n| \tag{A.1.8}$$

(9) (1.1.42)

$$[\, |a_1\rangle \cdots |a_n\rangle \,]^\dagger = \begin{bmatrix} \langle a_1| \\ \vdots \\ \langle a_n| \end{bmatrix} \tag{A.1.9}$$

(10) (1.1.43)

$$\begin{bmatrix} \langle\alpha_1| \\ \vdots \\ \langle\alpha_n| \end{bmatrix}^\dagger = [\, |\alpha_1\rangle \cdots |\alpha_n\rangle \,] \tag{A.1.10}$$

A.2 略記法

本書で用いる**略記法**についてまとめておく。$|\,a\,]$，$[\,\alpha\,|$ を

$$|\,a\,] = [\, |a_1\rangle \cdots |a_n\rangle \,] \qquad\qquad [\,\alpha\,| = \begin{bmatrix} \langle\alpha_1| \\ \vdots \\ \langle\alpha_n| \end{bmatrix}$$

によって定義し，これらを用いて以下のような略記を行う。それぞれの略記に対応する和の記号による式も示す。

(1) ベクトルの線形結合

$$|\,a\,]\boldsymbol{c} = [\ |a_1\rangle\ \cdots\ |a_n\rangle\,]\begin{bmatrix} c_1 \\ \vdots \\ c_n \end{bmatrix} = \sum_{i=1}^{n} c_i\,|a_i\rangle \tag{A.2.1}$$

(2) 線形形式の線形結合

$$\boldsymbol{\gamma}[\,\alpha\,| = [\,\gamma_1\ \cdots\ \gamma_n\,]\begin{bmatrix} \langle\alpha_1| \\ \vdots \\ \langle\alpha_n| \end{bmatrix} = \sum_{i=1}^{n} \gamma_i\,\langle\alpha_i| \tag{A.2.2}$$

(3) ダイアドの線形結合 (ダイアディック)

$$|\,a\,]X[\,\alpha\,| = [\ |a_1\rangle\ \cdots\ |a_n\rangle\,]\begin{bmatrix} X_{11} & \cdots & X_{1n} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ X_{n1} & \cdots & X_{nn} \end{bmatrix}\begin{bmatrix} \langle\alpha_1| \\ \vdots \\ \langle\alpha_n| \end{bmatrix} = \sum_{i=1}^{n}\sum_{j=1}^{n} X_{ij}\,|a_i\rangle\langle\alpha_j| \tag{A.2.3}$$

特に X が単位行列 I のとき

$$|\,a\,][\,\alpha\,| = [\ |a_1\rangle\ \cdots\ |a_n\rangle\,]\begin{bmatrix} \langle\alpha_1| \\ \vdots \\ \langle\alpha_n| \end{bmatrix} = \sum_{i=1}^{n} |a_i\rangle\langle\alpha_i| \tag{A.2.4}$$

補章 B　球座標における軌道角運動量演算子

B.1　球座標

直交座標 (x, y, z) と球座標 (r, θ, ϕ) は

$$x = r\sin\theta\cos\phi \qquad y = r\sin\theta\sin\phi \qquad z = r\cos\theta \tag{B.1.1}$$

の関係にある。位置 $\boldsymbol{r} = x\,\boldsymbol{e}_x + y\,\boldsymbol{e}_y + z\,\boldsymbol{e}_z$ において，正規直交基底 $\{\boldsymbol{e}_x, \boldsymbol{e}_y, \boldsymbol{e}_z\}$ から正規直交基底 $\{\boldsymbol{e}_r, \boldsymbol{e}_\theta, \boldsymbol{e}_\phi\}$ への基底変換 $[\,\boldsymbol{e}_r\,\boldsymbol{e}_\theta\,\boldsymbol{e}_\phi\,] = [\,\boldsymbol{e}_x\,\boldsymbol{e}_y\,\boldsymbol{e}_z\,]P$ の基底変換の行列 P およびその逆行列 P^{-1} は

$$P = \begin{bmatrix} \frac{1}{h_r}\frac{\partial x}{\partial r} & \frac{1}{h_\theta}\frac{\partial x}{\partial \theta} & \frac{1}{h_\phi}\frac{\partial x}{\partial \phi} \\ \frac{1}{h_r}\frac{\partial y}{\partial r} & \frac{1}{h_\theta}\frac{\partial y}{\partial \theta} & \frac{1}{h_\phi}\frac{\partial y}{\partial \phi} \\ \frac{1}{h_r}\frac{\partial z}{\partial r} & \frac{1}{h_\theta}\frac{\partial z}{\partial \theta} & \frac{1}{h_\phi}\frac{\partial z}{\partial \phi} \end{bmatrix} \qquad P^{-1} = \begin{bmatrix} h_r\frac{\partial r}{\partial x} & h_r\frac{\partial r}{\partial y} & h_r\frac{\partial r}{\partial z} \\ h_\theta\frac{\partial \theta}{\partial x} & h_\theta\frac{\partial \theta}{\partial y} & h_\theta\frac{\partial \theta}{\partial z} \\ h_\phi\frac{\partial \phi}{\partial x} & h_\phi\frac{\partial \phi}{\partial y} & h_\phi\frac{\partial \phi}{\partial z} \end{bmatrix} \tag{B.1.2}$$

によって与えられる。ここで，$h_r = r$，$h_\theta = r$，$h_\phi = r\sin\theta$ は球座標のスケール因子である。この基底変換は正規直交基底の間の基底変換であるから，P はユニタリ行列であり，$P^{-1} = P^\dagger$ を満たす。よって，

$$\begin{bmatrix} h_r\frac{\partial r}{\partial x} & h_r\frac{\partial r}{\partial y} & h_r\frac{\partial r}{\partial z} \\ h_\theta\frac{\partial \theta}{\partial x} & h_\theta\frac{\partial \theta}{\partial y} & h_\theta\frac{\partial \theta}{\partial z} \\ h_\phi\frac{\partial \phi}{\partial x} & h_\phi\frac{\partial \phi}{\partial y} & h_\phi\frac{\partial \phi}{\partial z} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{1}{h_r}\frac{\partial x}{\partial r} & \frac{1}{h_r}\frac{\partial y}{\partial r} & \frac{1}{h_r}\frac{\partial z}{\partial r} \\ \frac{1}{h_\theta}\frac{\partial x}{\partial \theta} & \frac{1}{h_\theta}\frac{\partial y}{\partial \theta} & \frac{1}{h_\theta}\frac{\partial z}{\partial \theta} \\ \frac{1}{h_\phi}\frac{\partial x}{\partial \phi} & \frac{1}{h_\phi}\frac{\partial y}{\partial \phi} & \frac{1}{h_\phi}\frac{\partial z}{\partial \phi} \end{bmatrix} \tag{B.1.3}$$

が成り立つ。(B.1.3) の右辺は容易に計算できるから，左辺の r，θ，ϕ の x，y，z による偏微分を右辺の x，y，z の r，θ，ϕ による偏微分を計算することによって得ることができる。つまり，

$$\begin{bmatrix} \frac{\partial r}{\partial x} & \frac{\partial r}{\partial y} & \frac{\partial r}{\partial z} \\ r\frac{\partial \theta}{\partial x} & r\frac{\partial \theta}{\partial y} & r\frac{\partial \theta}{\partial z} \\ r\sin\theta\frac{\partial \phi}{\partial x} & r\sin\theta\frac{\partial \phi}{\partial y} & r\sin\theta\frac{\partial \phi}{\partial z} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \sin\theta\cos\phi & \sin\theta\sin\phi & \cos\theta \\ \cos\theta\cos\phi & \cos\theta\sin\phi & -\sin\theta \\ -\sin\phi & \cos\phi & 0 \end{bmatrix} \tag{B.1.4}$$

である。
[(B.1.2) の証明] 位置 $\boldsymbol{r} = x\,\boldsymbol{e}_x + y\,\boldsymbol{e}_y + z\,\boldsymbol{e}_z$ における線素ベクトル $d\boldsymbol{r}$ は

$$d\boldsymbol{r} = dx\,\boldsymbol{e}_x + dy\,\boldsymbol{e}_y + dz\,\boldsymbol{e}_z = h_r dr\,\boldsymbol{e}_r + h_\theta d\theta\,\boldsymbol{e}_\theta + h_\phi d\phi\,\boldsymbol{e}_\phi \tag{B.1.5}$$

と書ける。(B.1.5) より，

$$\begin{aligned}
\boldsymbol{e}_r &= \frac{1}{h_r}\frac{\partial x}{\partial r}\,\boldsymbol{e}_x + \frac{1}{h_r}\frac{\partial y}{\partial r}\,\boldsymbol{e}_y + \frac{1}{h_r}\frac{\partial z}{\partial r}\,\boldsymbol{e}_z \\
\boldsymbol{e}_\theta &= \frac{1}{h_\theta}\frac{\partial x}{\partial \theta}\,\boldsymbol{e}_x + \frac{1}{h_\theta}\frac{\partial y}{\partial \theta}\,\boldsymbol{e}_y + \frac{1}{h_\theta}\frac{\partial z}{\partial \theta}\,\boldsymbol{e}_z \\
\boldsymbol{e}_\phi &= \frac{1}{h_\phi}\frac{\partial x}{\partial \phi}\,\boldsymbol{e}_x + \frac{1}{h_\phi}\frac{\partial y}{\partial \phi}\,\boldsymbol{e}_y + \frac{1}{h_\phi}\frac{\partial z}{\partial \phi}\,\boldsymbol{e}_z
\end{aligned} \tag{B.1.6}$$

あるいは

$$\begin{aligned}
\boldsymbol{e}_x &= h_r\frac{\partial r}{\partial x}\,\boldsymbol{e}_r + h_\theta\frac{\partial \theta}{\partial x}\,\boldsymbol{e}_\theta + h_\phi\frac{\partial \phi}{\partial x}\,\boldsymbol{e}_\phi \\
\boldsymbol{e}_y &= h_r\frac{\partial r}{\partial y}\,\boldsymbol{e}_r + h_\theta\frac{\partial \theta}{\partial y}\,\boldsymbol{e}_\theta + h_\phi\frac{\partial \phi}{\partial y}\,\boldsymbol{e}_\phi \\
\boldsymbol{e}_z &= h_r\frac{\partial r}{\partial z}\,\boldsymbol{e}_r + h_\theta\frac{\partial \theta}{\partial z}\,\boldsymbol{e}_\theta + h_\phi\frac{\partial \phi}{\partial z}\,\boldsymbol{e}_\phi
\end{aligned} \tag{B.1.7}$$

であるから，基底変換 $[\,\boldsymbol{e}_r\,\boldsymbol{e}_\theta\,\boldsymbol{e}_\phi\,] = [\,\boldsymbol{e}_x\,\boldsymbol{e}_y\,\boldsymbol{e}_z\,]P$ の基底変換の行列 P およびその逆行列 P^{-1} は (B.1.2) によって与えられることがわかる。 ■

なお，r，θ，ϕ の x，y，z による偏微分は

$$r^2 = x^2 + y^2 + z^2 \qquad \tan^2\theta = \frac{x^2+y^2}{z^2} \qquad \tan\phi = \frac{y}{x} \tag{B.1.8}$$

を x，y，z によって偏微分することにより得ることもできる (計算略)。

B.2 球座標における軌道角運動量演算子の座標表示

球座標 (r,θ,ϕ) における軌道角運動量演算子の座標表示 $\boldsymbol{\ell}$ およびその 2 乗の座標表示 $\boldsymbol{\ell}^2$ を導く。また，$\boldsymbol{\ell}^2$ と波数演算子の 2 乗の座標表示 $\boldsymbol{k}^2$ との関係についても述べる。

軌道角運動量演算子の球座標 (r,θ,ϕ) に関する座標表示は，その直交座標 (x,y,z) に関する座標表示

$$\ell_x = -i\left(y\frac{\partial}{\partial z} - z\frac{\partial}{\partial y}\right) \qquad \ell_y = -i\left(z\frac{\partial}{\partial x} - x\frac{\partial}{\partial z}\right) \qquad \ell_z = -i\left(x\frac{\partial}{\partial y} - y\frac{\partial}{\partial x}\right) \tag{B.2.1}$$

を変数変換することにより，

$$\ell_x = -i\left(-\frac{\cos\phi}{\tan\theta}\frac{\partial}{\partial\phi} - \sin\phi\frac{\partial}{\partial\theta}\right) \quad \ell_y = -i\left(-\frac{\sin\phi}{\tan\theta}\frac{\partial}{\partial\phi} + \cos\phi\frac{\partial}{\partial\theta}\right) \quad \ell_z = -i\frac{\partial}{\partial\phi} \tag{B.2.2}$$

と表される。

[(B.2.2) の証明] 直交座標 (x, y, z) と球座標 (r, θ, ϕ) の間の変数変換 $x = r\sin\theta\cos\phi$, $y = r\sin\theta\sin\phi$, $z = r\cos\theta$ について示した補章 B.1 の (B.1.4) を用いると，連鎖律により

$$\begin{aligned}
\frac{\partial}{\partial x} &= \frac{\partial r}{\partial x}\frac{\partial}{\partial r} + \frac{\partial\theta}{\partial x}\frac{\partial}{\partial\theta} + \frac{\partial\phi}{\partial x}\frac{\partial}{\partial\phi} = \sin\theta\cos\phi\frac{\partial}{\partial r} + \frac{\cos\theta\cos\phi}{r}\frac{\partial}{\partial\theta} - \frac{\sin\phi}{r\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\phi} \\
\frac{\partial}{\partial y} &= \frac{\partial r}{\partial y}\frac{\partial}{\partial r} + \frac{\partial\theta}{\partial y}\frac{\partial}{\partial\theta} + \frac{\partial\phi}{\partial y}\frac{\partial}{\partial\phi} = \sin\theta\sin\phi\frac{\partial}{\partial r} + \frac{\cos\theta\sin\phi}{r}\frac{\partial}{\partial\theta} + \frac{\cos\phi}{r\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\phi} \\
\frac{\partial}{\partial z} &= \frac{\partial r}{\partial z}\frac{\partial}{\partial r} + \frac{\partial\theta}{\partial z}\frac{\partial}{\partial\theta} + \frac{\partial\phi}{\partial z}\frac{\partial}{\partial\phi} = \cos\theta\frac{\partial}{\partial r} - \frac{\sin\theta}{r}\frac{\partial}{\partial\theta}
\end{aligned} \tag{B.2.3}$$

と書ける。(B.2.3) より，

$$
\begin{aligned}
\ell_x &= -i\left(y\frac{\partial}{\partial z} - z\frac{\partial}{\partial y}\right) \\
&= -i\left(r\cos\theta\sin\theta\sin\phi\,\frac{\partial}{\partial r} - \sin^2\theta\sin\phi\,\frac{\partial}{\partial\theta}\right. \\
&\qquad\qquad \left. -r\cos\theta\sin\theta\sin\phi\,\frac{\partial}{\partial r} - \cos^2\theta\sin\phi\,\frac{\partial}{\partial\theta} - \frac{\cos\theta\cos\phi}{\sin\theta}\,\frac{\partial}{\partial\phi}\right) \\
&= -i\left(-\frac{\cos\phi}{\tan\theta}\,\frac{\partial}{\partial\phi} - \sin\phi\,\frac{\partial}{\partial\theta}\right) \\
\ell_y &= -i\left(z\frac{\partial}{\partial x} - x\frac{\partial}{\partial z}\right) \\
&= -i\left(r\cos\theta\sin\theta\sin\phi\,\frac{\partial}{\partial r} + \cos^2\theta\cos\phi\,\frac{\partial}{\partial\theta} - \frac{\cos\theta\sin\phi}{\sin\theta}\,\frac{\partial}{\partial\phi}\right. \\
&\qquad\qquad \left. -r\cos\theta\sin\theta\cos\phi\,\frac{\partial}{\partial r} + \sin^2\theta\cos\phi\,\frac{\partial}{\partial\theta}\right) \\
&= -i\left(-\frac{\sin\phi}{\tan\theta}\,\frac{\partial}{\partial\phi} + \cos\phi\,\frac{\partial}{\partial\theta}\right) \\
\ell_z &= -i\left(x\frac{\partial}{\partial y} - y\frac{\partial}{\partial x}\right) \\
&= -i\left(r\sin^2\theta\cos\phi\sin\phi\,\frac{\partial}{\partial r} + \cos\theta\sin\theta\cos\phi\sin\phi\,\frac{\partial}{\partial\theta} + \cos^2\phi\,\frac{\partial}{\partial\phi}\right. \\
&\qquad\qquad \left. -r\sin^2\theta\cos\phi\sin\phi\,\frac{\partial}{\partial r} - \cos\theta\sin\theta\cos\phi\sin\phi\,\frac{\partial}{\partial\theta} + \sin^2\phi\,\frac{\partial}{\partial\phi}\right) \\
&= -i\frac{\partial}{\partial\phi}
\end{aligned}
\tag{B.2.4}
$$

を得る。 ■

軌道角運動量演算子の 2 乗の球座標 (r,θ,ϕ) に関する座標表示は

$$
\boldsymbol{\ell}^2 = -\left(\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta} + \frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\phi^2}\right) \tag{B.2.5}
$$

と表される。

[(B.2.5) の証明] 球座標 (r,θ,ϕ) によって表した勾配

$$
\boldsymbol{\nabla} = \boldsymbol{e}_r\frac{\partial}{\partial r} + \boldsymbol{e}_\theta\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial\theta} + \boldsymbol{e}_\phi\frac{1}{r\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\phi} \tag{B.2.6}
$$

を用いると，$\boldsymbol{r} = r\,\boldsymbol{e}_r$ より，

$$\boldsymbol{\ell} = -i\boldsymbol{r} \times \boldsymbol{\nabla} = -i\left(\boldsymbol{e}_\phi \frac{\partial}{\partial\theta} - \boldsymbol{e}_\theta \frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\phi}\right) \tag{B.2.7}$$

と書ける。ℓ_x，ℓ_y，ℓ_z はエルミート演算子であるから，

$$(\ell_x f, \ell_x g) + (\ell_y f, \ell_y g) + (\ell_z f, \ell_z g) = (f, \ell_x^2 g) + (f, \ell_y^2 g) + (f, \ell_z^2 g) = (f, \boldsymbol{\ell}^2 g) \tag{B.2.8}$$

が成り立つ。(B.2.7) を用いると，(B.2.8) の左辺は

$$\begin{aligned}
\int d^3r\,(\boldsymbol{\ell} f)^* \cdot \boldsymbol{\ell} g &= \int r^2 \sin\theta dr d\theta d\phi \left(\frac{\partial f^*}{\partial\theta}\frac{\partial g}{\partial\theta} + \frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial f^*}{\partial\phi}\frac{\partial g}{\partial\phi}\right) \\
&= \int r^2 dr d\theta d\phi \left(\frac{\partial f^*}{\partial\theta}\sin\theta\frac{\partial g}{\partial\theta} + \frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial f^*}{\partial\phi}\frac{\partial g}{\partial\phi}\right) \\
&\overset{①}{=} -\int r^2 dr d\theta d\phi \left(f^*\frac{\partial}{\partial\theta}\sin\theta\frac{\partial g}{\partial\theta} + f^*\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial^2 g}{\partial\phi^2}\right) \\
&= -\int r^2 \sin\theta dr d\theta d\phi\, f^* \left(\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta} + \frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\phi^2}\right) g \\
&= -\int d^3r\, f^* \left(\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta} + \frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\phi^2}\right) g
\end{aligned} \tag{B.2.9}$$

と書ける。等式①において θ，ϕ について部分積分を行った[1]。(B.2.8) の右辺と (B.2.9) の右辺を比べることにより (B.2.5) を得る。 ■

波数演算子の 2 乗の球座標 (r, θ, ϕ) に関する座標表示は

$$\boldsymbol{k}^2 = -\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}r^2\frac{\partial}{\partial r} - \frac{1}{r^2}\left(\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta} + \frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\phi^2}\right) \tag{B.2.10}$$

と表される。(B.2.5) より，(B.2.10) の右辺第 2 項は $\boldsymbol{\ell}^2/r^2$ である。
[(B.2.10) の証明] 球座標 (r, θ, ϕ) によって表した勾配

$$\boldsymbol{\nabla} = \boldsymbol{e}_r\frac{\partial}{\partial r} + \boldsymbol{e}_\theta\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial\theta} + \boldsymbol{e}_\phi\frac{1}{r\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\phi} \tag{B.2.11}$$

を用いると，

$$\boldsymbol{k} = -i\boldsymbol{\nabla} = -i\left(\boldsymbol{e}_r\frac{\partial}{\partial r} + \boldsymbol{e}_\theta\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial\theta} + \boldsymbol{e}_\phi\frac{1}{r\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\phi}\right) \tag{B.2.12}$$

[1] θ についての部分積分で境界項が消えるのは，被積分関数に $\sin\theta$ の因子があるためです。また，ϕ についての部分積分で境界項が消えるのは，被積分関数が ϕ の 2π の周期関数だからです。

と書ける。$\hbar_x$，$\hbar_y$，$\hbar_z$ はエルミート演算子であるから，

$$(\hbar_x f, \hbar_x g) + (\hbar_y f, \hbar_y g) + (\hbar_z f, \hbar_z g) = (f, \hbar_x^2 g) + (f, \hbar_y^2 g) + (f, \hbar_z^2 g) = (f, \boldsymbol{\hbar}^2 g) \tag{B.2.13}$$

が成り立つ。(B.2.12) を用いると，(B.2.13) の左辺は

$$\begin{aligned}
\int d^3r\,(\boldsymbol{\hbar} f)^* \cdot \boldsymbol{\hbar} g &= \int r^2 \sin\theta dr d\theta d\phi \left(\frac{\partial f^*}{\partial r}\frac{\partial g}{\partial r} + \frac{1}{r^2}\frac{\partial f^*}{\partial \theta}\frac{\partial g}{\partial \theta} + \frac{1}{r^2 \sin^2\theta}\frac{\partial f^*}{\partial \phi}\frac{\partial g}{\partial \phi} \right) \\
&= \int dr d\theta d\phi \left(\sin\theta \frac{\partial f^*}{\partial r} r^2 \frac{\partial g}{\partial r} + \frac{\partial f^*}{\partial \theta}\sin\theta\frac{\partial g}{\partial \theta} + \frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial f^*}{\partial \phi}\frac{\partial g}{\partial \phi} \right) \\
&\overset{①}{=} -\int dr d\theta d\phi \left(\sin\theta f^* \frac{\partial}{\partial r} r^2 \frac{\partial g}{\partial r} + f^* \frac{\partial}{\partial \theta}\sin\theta\frac{\partial g}{\partial \theta} + f^* \frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial^2 g}{\partial \phi^2} \right) \\
&= -\int r^2 \sin\theta dr d\theta d\phi\, f^* \left(\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r} r^2 \frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r^2}\left(\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial \theta}\sin\theta\frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \right) \right) g \\
&= -\int d^3r\, f^* \left(\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r} r^2 \frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r^2}\left(\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial \theta}\sin\theta\frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \right) \right) g
\end{aligned} \tag{B.2.14}$$

と書ける。等式①において r，θ，ϕ について部分積分を行った[2]。(B.2.13) の右辺と (B.2.14) の右辺を比べることにより (B.2.10) を得る。 ■

[2] r についての部分積分で境界項が消えるのは，被積分関数に r^2 の因子があることと，被積分関数が $r \to \infty$ において十分速やかに 0 に収束するものを対象としていることによります (そうでないと，$\boldsymbol{\hbar}$ はエルミート演算子になりません)。θ についての部分積分で境界項が消えるのは，被積分関数に $\sin\theta$ の因子があるためです。また，ϕ についての部分積分で境界項が消えるのは，被積分関数が ϕ の 2π の周期関数だからです。

補章 C　重み付き内積

C.1　重み付き内積

区間 $[a, b]$ における関数全体のなす線形空間を考える。正の実関数 $w(x)$ を用いて関数 $|f\rangle$ と $|g\rangle$ の**重み付き内積**を

$$(|f\rangle, |g\rangle) = \int_a^b w(x)dx\, f(x)^* g(x) \tag{C.1.1}$$

によって定義する。$w(x)$ を**重み関数**という。関数 $|f\rangle$ を**矩形関数**の線形結合で近似することを考える。そこで，一旦区間を $[a - \Delta x/2, b + \Delta x/2]$ として，矩形関数 $|\tau_i\rangle$ $(i = 1, \cdots, n)$ を

$$\tau_i(x) = \begin{cases} \dfrac{1}{\sqrt{w(x)\Delta x}} & (x_i - \Delta x/2 < x < x_i + \Delta x/2) \\ 0 & (\text{上記以外}) \end{cases} \tag{C.1.2}$$

によって定義する。ここで，$x_i = a + (i-1)\Delta x$，$\Delta x = (b-a)/(n-1)$ である。$V = \mathrm{span}(|\tau_1\rangle, \cdots, |\tau_n\rangle)$ とすると，

$$\tau = \{|\tau_1\rangle, \cdots, |\tau_n\rangle\} \text{ は } V \text{ の正規直交基底} \tag{C.1.3}$$

である。

[(C.1.3) の証明] $|\tau_i\rangle$ と $|\tau_j\rangle$ の内積を計算する。$i = j$ のとき，

$$\langle\tau_i|\tau_i\rangle = \int_{a-\Delta x/2}^{b+\Delta x/2} w(x)dx\, \tau_i(x)^* \tau_i(x) = \int_{x_i-\Delta x/2}^{x_i+\Delta x/2} w(x)dx \left(\frac{1}{\sqrt{w(x)\Delta x}}\right)^2 = 1 \tag{C.1.4}$$

であるから，$|\tau_i\rangle$ は正規化されている。一方，$i \neq j$ のときは恒等的に $\tau_i(x)\tau_j(x) = 0$ となるから，$\langle\tau_i|\tau_j\rangle = 0$，つまり，$|\tau_i\rangle$ と $|\tau_j\rangle$ は直交する。以上より，(C.1.3) が示

された。 ■

次に $n \to \infty$ の極限を考える。$|\tau_i\rangle$ と $|f\rangle$ の内積は

$$\lim_{n\to\infty} \langle \tau_i | f \rangle = \lim_{n\to\infty} \int_{x_i-\Delta x/2}^{x_i+\Delta x/2} w(x)dx \frac{1}{\sqrt{w(x)\Delta x}} f(x) = \lim_{n\to\infty} \sqrt{w(x_i)\Delta x} f(x_i) \tag{C.1.5}$$

となるから，ダイアドの定義 (2.2.16) より，

$$\lim_{n\to\infty} |\tau_i\rangle\langle\tau_i|f\rangle = \lim_{n\to\infty} \sqrt{w(x_i)\Delta x} f(x_i) \, |\tau_i\rangle \tag{C.1.6}$$

である。(C.1.6) を $i = 1, \cdots, n$ について和をとり完全性関係 $\hat{I} = |\,\tau\,][\,\tau\,|$ を考慮すると，

$$|f\rangle = \lim_{n\to\infty} \sum_{i=1}^{n} \sqrt{w(x_i)\Delta x} f(x_i) \, |\tau_i\rangle = \lim_{n\to\infty} \sum_{i=1}^{n} w(x_i)\Delta x f(x_i) \frac{1}{\sqrt{w(x_i)\Delta x}} \, |\tau_i\rangle \tag{C.1.7}$$

と書ける。$|x\rangle$ を

$$|x\rangle = \lim_{n\to\infty} \frac{1}{\sqrt{w(x_i)\Delta x}} \, |\tau_i\rangle \tag{C.1.8}$$

によって定義すると，

$$|f\rangle = \int_a^b w(x)dx \, f(x) \, |x\rangle \tag{C.1.9}$$

を得る。また，(C.1.5) と (C.1.8) より

$$\langle x|f\rangle = f(x) \tag{C.1.10}$$

である。したがって，$|x\rangle = |\xi\rangle$ と $|f\rangle$ の内積は $\langle\xi|f\rangle = f(\xi)$ であり，(C.1.9) より

$$f(\xi) = \int_a^b w(x)dx f(x) \, \langle\xi|x\rangle \tag{C.1.11}$$

と書ける。$\langle\xi|x\rangle$ が実数であること，つまり，$\langle\xi|x\rangle = \langle x|\xi\rangle$ であること，および，デルタ関数の定義 (5.1.4) より，

$$\langle x|\xi\rangle = \frac{1}{w(x)} \delta(x-\xi) \tag{C.1.12}$$

を得る[1]。以上より，関数 $|\xi\rangle$ がデルタ関数 $\delta(x-\xi)$ に対応することがわかった。

デルタ関数 $|x\rangle$ に関する完全性関係は，$\hat{I}=\sum_{i=1}^{n}|\tau_i\rangle\langle\tau_i|$ において $n\to\infty$ の極限をとることにより，

$$\hat{I}=\int_a^b w(x)dx\ |x\rangle\langle x| \tag{C.1.13}$$

と表せる。また，**位置演算子** $\hat{x}$ を，$\hat{x}=\sum_{i=1}^{n}x_i\,|\tau_i\rangle\langle\tau_i|$ とおいて $n\to\infty$ の極限をとることにより，

$$\hat{x}=\int_a^b w(x)dx\,x\,|x\rangle\langle x| \tag{C.1.14}$$

によって定義する。$\hat{x}$ はエルミート演算子であり，

$$\hat{x}\,|x\rangle=x\,|x\rangle \qquad\qquad \langle x|\,\hat{x}=x\,\langle x| \tag{C.1.15}$$

が成り立つ。$|x\rangle$ は $\hat{x}$ の固有値 x に属する固有関数である。

§5.1.3 で述べた完全性関係 (5.1.16) は，(C.1.10) と (C.1.12) を用いると以下のように修正される。完全正規直交系 $\{\,|u_i\rangle\}$ に関する完全性関係は

$$\hat{I}=\sum_i |u_i\rangle\langle u_i| \tag{C.1.16}$$

である。(C.1.16) の両辺を $\langle x|$ と $|x'\rangle$ ではさむことにより，

$$\langle x|x'\rangle=\sum_i\langle x|u_i\rangle\langle u_i|x'\rangle \quad \text{つまり} \quad \frac{1}{w(x)}\delta(x-x')=\sum_i u_i(x)u_i(x')^* \tag{C.1.17}$$

を得る。

[1]変数変換 $u=u(x)=\int^x w(x')dx'$ を行うと，$w(x)dx=du$ および $\frac{1}{w(x)}\delta(x-\xi)=\delta(u(x)-u(\xi))$ となります。(C.1.12) はこの変数変換に伴う修正だと考えることもできます。実際，$|u\rangle=|x\rangle$ と選べば，変数を u とする関数全体のなす関数空間では重み関数を 1 とした場合のデルタ関数の公式が成り立ちます。

参考文献

[1] 佐武 一郎『線型代数学（数学選書 1)』（裳華房，1958 年刊，1974 年増補改題，2015 年新装版）

[2] 入江 昭二『線形数学 I・II（共立数学講座 3)』（共立出版，1966 年）

[3] 齋藤 正彦『線型代数入門（基礎数学 1)』（東京大学出版会，1966 年）

[4] 笠原 晧司『線形代数学：教養課程（サイエンスライブラリ 数学 25)』（サイエンス社，1982 年）

[5] 小寺 平治『明解演習 線形代数（明解演習シリーズ)』（共立出版，1982 年）

[6] 佐武 一郎『線形代数（共立講座２１世紀の数学 2)』（共立出版，1997 年）

[7] 小寺 平治『テキスト線形代数』（共立出版，2002 年）

[8] 伊理 正夫『一般線形代数』（岩波書店，2003 年）

[9] 新井 仁之『線形代数：基礎と応用』（日本評論社，2006 年）

[10] 長谷川 浩司『線型代数 [改訂版]』（日本評論社，2015 年）

[11] 黒田 紘敏『線形代数学入門』（https://www7b.biglobe.ne.jp/ ~h-kuroda/lecture.html，2024 年 7 月 17 日参照）

[12] 小野寺 嘉孝『物理のための応用数学』（裳華房，1988 年）

[13] G. B. Arfken, H. J. Weber（権平 健一郎，神原 武志，小山 直人 訳）『基礎物理数学 Vol.1-4（第 4 版)』（講談社，1999 年，原著 1995 年）

[14] 杉浦 光夫，横沼 健雄『ジョルダン標準形・テンソル代数』（岩波書店，2002 年）

[15] J. von Neumann（井上 健，広重 徹，恒藤 敏彦 訳）『量子力学の数学的基礎』（みすず書房，1957 年，原著 1932 年）

[16] M. E. Rose（山内 恭彦，森田 正人 訳）『角運動量の基礎理論』（みすず書房，1971 年，原著 1957 年）

[17] 猪木 慶治，川合 光『量子力学 I・II』（講談社，1994 年）

[18] R. P. Feynman（西川 恭治 監訳）『ファインマン統計力学』（丸善出版，2012 年，原著 1972 年）

[19] 犬井 鉄郎，田辺 行人，小野寺 嘉孝『応用群論：群表現と物理学（増補版）』（裳華房，1980 年）

[20] 小野寺 嘉孝『物性物理/物性化学のための群論入門』（裳華房，1996 年）

[21] 吉川 圭二『群と表現（理工系の基礎数学 9）』（岩波書店，1996 年）

[22] 藤永 茂, 成田 進『化学や物理のためのやさしい群論入門』（岩波書店, 2001 年）

[23] 近藤 武『群論 (岩波基礎数学選書) 』（岩波書店，1991 年）

[24] H. Weyl（蟹江 幸博 訳）『古典群 -不変式と表現- (シュプリンガー数学クラシックス) 』（丸善出版，2012 年）

索 引

$\hat{0}$, 0 44
$\mathbf{1}$ 32

$\boldsymbol{a}$, $\boldsymbol{b}$, $\boldsymbol{c}$ 1
$\boldsymbol{\alpha}$, $\boldsymbol{\beta}$, $\boldsymbol{\gamma}$ 1
$A^\dagger$, $\boldsymbol{a}^\dagger$, $\boldsymbol{\alpha}^\dagger$ 7, 8

e, ε, $|\,e\,]$, $[\,\varepsilon\,|$ 42
$e^\dagger$, $\varepsilon^\dagger$, $[\,e\,|$, $|\,\varepsilon\,]$ 95–97

$\mathscr{C}_\kappa$, $\mathscr{C}(G_i)$ 209

D_x, ∂_x 47
δ_{ij} 16
$\det A$, $\det \hat{X}$ 33, 69
$\dim V$ 15, 40

$\mathscr{G}$ 207

h, $\hbar$ 47, 49, 81

I, I_n 4, 17
$\hat{I}$, $\hat{I}_V$ 44
$\operatorname{im} A$, $A(V)$, $\operatorname{im} \hat{X}$, $\hat{X}(V)$ 26, 44, 83

$\ker A$, $\ker \hat{X}$ 26, 44, 83

n_c, $n_c(\mathscr{G})$ 209

O, $O_{m,n}$ 3

$\operatorname{rank} A$, $\operatorname{rank} \hat{X}$ 13, 44, 83

$\operatorname{sgn}(\sigma)$ 32

$\operatorname{span}(\boldsymbol{a}_1, \cdots, \boldsymbol{a}_n)$, $\operatorname{span}(S)$ 10, 39

$\operatorname{tr} A$, $\operatorname{tr} \hat{X}$ 5, 69

V, W 15, 39
V^*, W^* 16, 43

アーベル群 207
アダマールの補題 53

位数 207
位置演算子 167, 363
一次形式 43
一次従属 10, 40
一次独立 10, 40
異値な既約表現 212
異値な表現 212
1 体演算子 144, 155
一般化固有値問題 124

運動量演算子 47, 169
運動量表示 173

エルミート共役 7, 95–97, 103
エルミート行列 9
エルミート多項式 113, 179
エルミートの微分方程式 179
エルミート変換 99

重み関数 177, 361
重み付き内積 162, 178, 294, 299, 302, 327, 330, 332, 338, 340, 346, 348, 361

解 27
階数 13, 44, 83
階段関数 163
回転 47
回転演算子 50, 194
回転群 207, 233
ガウスの消去法 27
可換 45
可換群 207
可逆 84
可逆写像 84
核 26, 44, 83
角運動量 45
角運動量演算子 49
拡大係数行列 27
可約 64, 89
可約表現 212
関数空間 162
完全 164
完全系 164
完全性関係 24, 57, 164
簡約 213
簡約階段形 12

疑似逆行列 119
疑似逆変換 119
奇置換 32
基底 15, 40
基底変換 66
基底変換の行列 66
軌道角運動量演算子 49, 55, 101, 191
基本解 27
既約 64, 88
逆行列 4, 20
逆元 207
既約指標 215
逆置換 32
既約表現 212
既約表現の基底 212
既約表現の次元 212
既約表現の直和 213
既約不変部分空間 64, 89
既約分解 213
逆変換 46
球ベッセル関数 184, 303
球面調和関数 303, 333
鏡映 47
鏡映演算子 168, 189
行簡約階段形 12
行基本変形 12, 27
行ベクトル 1
行ベクトル空間 16
行ベクトル表現 60
共役 209
共役類 209
行列 3
行列記法 42, 351
行列式 33, 69
行列表現 62
局所的演算子 205
極性ベクトル 188
極分解 118

空間反転 47
偶置換 32
矩形関数 165, 361
組み換え定理 208
グラム行列 94
グラム–シュミットの直交化法 112
グリーン関数 119
クレブシュ–ゴルダン係数 224
クロネッカー積 130
クロネッカーのデルタ 17
群 207

群環 220
群の表現 212
群のユニタリ表現 212

係数比較法 11
計量 94
計量線形空間 93

コーシーの主値 164
交換可能 45
交換関係 45
交換子 45
交空間 40
交代性 34
恒等置換 32
恒等表現 221
恒等変換 44
固定境界条件 178
コヒーレント状態 158
固有空間 70
固有射影 72
固有射影公式 72
固有多項式 74
固有値 70
固有値問題 70
固有ベクトル 70
固有方程式 74
混合境界条件 178

座標表示 170
サラスの方法 35
三角不等式 114

軸性ベクトル 188
次元 15, 40
次元定理 26, 44, 84
辞書式順序 127
指数 210
次数 64
自然境界条件 178
指標 215
指標の第 1 種直交性 216
指標の第 2 種直交性 217
指標表 217
射影 23, 56
射影演算子 218
シューアの補題 90, 213
周期的境界条件 125, 169, 178
主軸 242
主軸問題 242
シュツルム–リウヴィル理論 177
シュレーディンガー描像 176
シュワルツの不等式 113
巡回群 207
巡回演算子 125
商群 210
消滅演算子 142, 155
剰余類 210
真空状態 139, 153

随伴 97, 103
随伴行列 7
数演算子 146, 156
数ベクトル表現 61
数密度演算子 205
スカラー演算子 198
スピン 1 重項状態 135, 152
スピン角運動量演算子 51, 110, 132, 192
スピン軌道相互作用 198
スピン 3 重項状態 135, 152
スペクトル分解 72
スレイター行列式 140

正規行列 9

正規直交基底 103
正規部分群 210
正規変換 98
制限 44
正射影 106
生成演算子 142, 155
正則 4, 20, 46
正則行列 4, 20
正則表現 220
正則変換 46
正定値 117
正方行列 3
正方行列の次数 3
跡 5
積表 208
積表現 223
零行ベクトル 1
零行列 3
零ベクトル 1, 39
零変換 44
零列ベクトル 1
線形空間 39
線形形式 43
線形結合 10, 39
線形写像 26, 83
線形従属 10, 40
線形独立 10, 40
線形変換 44
線形包 10, 39

像 26, 44, 83
相互作用描像 176
相似 69
双線形性 129
双対基底 22, 42
双対空間 43
相反基底 97
ソホーツキー–プレメリの定理 164

ダイアディック 47, 62, 353
ダイアド 47, 56, 62, 353
対角化 64
対角化可能 70
対角行列 64
対角成分 3
対角和 5
対称化演算子 153
対称テンソル 153
対称テンソル空間 153
大直交性定理 214
代表 209
多重線形性 34
縦ベクトル 1
ダブルドット積 105
単位行列 4, 18
単位元 207
単位の分解 24
単純群 210
単純対称テンソル 153
単純テンソル 137
単純反対称テンソル 140

置換 31
置換演算子 136
忠実 212
忠実な表現 212
超関数 162
直和 58
直和条件 58
直和分解 58
直交射影 106
直交する 93
直交直和 106
直交直和分解 106

直交補空間 107

ディリクレ境界条件 178
テニスラケットの定理 283
デルタ関数 162, 167, 363
点スペクトル 167
テンソル 135
テンソル空間 135
テンソル積 127
転置共役 7

同次境界条件 178
同時対角化可能 73
同時ブロック対角化可能 88
同次方程式 27
同値な既約表現 212
同値な表現 212
トレース 5, 69

内積 93
内積空間 93

2 次形式の標準形 242
2 体演算子 144, 155

捻れらた周期的境界条件 169

ノイマン関数 183
ノイマン境界条件 178
ノルム 93

ハートリー–フォック近似 140
パーマネント 153
ハイゼンベルク描像 176
パウリ行列 51, 111, 132, 192, 236
パウリの排他律 140
波数演算子 54, 132, 133, 169
波動方程式 285, 286, 288, 290, 292, 294, 296, 299, 302

場の演算子 204
パリティ変換 47
張る，張られる 10, 40
反交換子 142
反対称化演算子 138
反対称テンソル 139
反対称テンソル空間 139
反転 47
反転演算子 47, 168, 188

非アーベル群 208
非可換 45
非可換群 207
非可換性 6
左基本変形 12
左剰余類 210
左剰余類分解 210
非単純群 210
非同次境界条件 178
非同次方程式 27
微分演算子 47
ヒュッケル法 120, 121
表現空間 212
表現の基底 212
表現の次元 212
標準基底 15
標準系 84
標準双対基底 16
標準内積 104
ヒルベルト-シュミット内積 45, 104

フーリエ級数 171
不確定性原理 45
符号 32
部分空間 15, 39
部分群 207
不変部分空間 44, 88

ブロック 64
ブロック対角化 64
ブロック対角行列 64
ブロック分割 3
ブロッホ関数 125
ブロッホの定理 125
フロベニウス内積 104

ペアリング 2, 43
ベイカー–キャンベル–ハウスドルフ公式 52
並進演算子 47, 174, 190
平面波 171
ベクトル 39
ベクトル演算子 199
ベクトル空間 39
ベッセル関数 183, 291, 295, 300, 328, 339, 341, 347, 349
ベッセルの微分方程式 183, 291, 295, 300, 328, 339, 341, 347, 349
ヘリシティー演算子 133
ヘルムホルツ方程式 334, 336, 338, 340, 342, 344, 346, 348
変形ベッセル関数 331

マリケン記号 217

右基本変形 11
右剰余類 210
右剰余類分解 210

ムーア–ペンローズ逆行列 119
無限群 207

ヤコビ恒等式 46

有限群 207
ユニタリ行列 9
ユニタリ変換 99

余因子 36
余因子行列 36
余因子展開 36
横ベクトル 1

ラグランジュの定理 210
ラゲール多項式 181
ラゲールの陪微分方程式 181
ラゲールの微分方程式 181
ラゲール陪多項式 181
ラプラス方程式 320, 322, 324, 327, 330, 332
ラベル 135

リー括弧積 45
リー代数 45
リップマン–シュウィンガーの関係式 164
略記法 42, 352
量子エンタングルメント 129
量子もつれ 129

類関数 216
ルジャンドル多項式 113, 180
ルジャンドルの陪微分方程式 180
ルジャンドルの微分方程式 180
ルジャンドル陪関数 180

レヴィ-チヴィタ記号 199
列簡約階段形 12
列基本変形 11
列行展開 5
列ベクトル 1
列ベクトル空間 15
列ベクトル表現 60
連続群 207
連続スペクトル 167
連立一次方程式 27

ロドリゲスの回転公式 195
ロビン境界条件 178

歪エルミート行列 9
歪エルミート変換 99
和空間 40