

量子力学

§ 6.2

(2 4) 2次元複素ベクトル空間で、規格化された直交するベクトル $\mathbf{e}_1, \mathbf{e}_2$ を基底にしたときに

$$B = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}$$

のように表されるエルミート演算子 B があるとする。 B の固有値と固有ベクトルを求めよ。また、これを対角化するユニタリー変換の行列を記せ。そして、新基底 $\mathbf{e}_1'', \mathbf{e}_2''$ を求めよ。

(解)

永年方程式は

$$\begin{vmatrix} -\beta & -i \\ i & -\beta \end{vmatrix} = 0$$

であるから、 $\beta^2 - 1 = 0$ 。

よって $\beta_1 = 1, \beta_2 = -1$ であり、この 2 つが B の固有値である。

この β_1, β_2 より固有ベクトルを求める。

B の固有値 $\beta_1 = 1$ について。

$$\begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \end{pmatrix} = (+1) \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \end{pmatrix}$$

を解くと、 $b_1 = -ib_2$ より、

$\beta_1 = 1$ についての B の規格化された固有ベクトルは、 $\frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ i \end{pmatrix}$ である。

B の固有値 $\beta_2 = -1$ について。

$$\begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} b_3 \\ b_4 \end{pmatrix} = (-1) \begin{pmatrix} b_3 \\ b_4 \end{pmatrix}$$

を解くと、 $b_3 = ib_4$ より、

$\beta_2 = -1$ についての B の規格化された固有ベクトルは、 $\frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ -i \end{pmatrix}$ である。

B について、ユニタリー変換の行列と対角行列を求める。

この教科書では、ユニタリー変換を $B' = SBS^{-1}$ としているが、

$B' = X^{-1}BX$ として、ユニタリー変換の行列 $X, X^{-1}(= \tilde{X}^*)$ をまず求めよう。

そして教科書と対応させて、 S を表す。

よく線形代数の教科書で、ユニタリー変換の行列は、対角化する行列の規格化された固有ベクトルを横に並べたものであると書かれている。そして、この量子力学の教科書にもある、対角行列の対角要素は固有値であるということを、実際にそうであるか見てみよう。

$$X^{-1}BX = \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} & -i \\ \frac{1}{\sqrt{2}} & i \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} & 1 \\ i & -i \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

と確かにそうになっている。よって

$$X = \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}} \\ i & -i \end{pmatrix}, X^{-1} = \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} & -i \\ \frac{1}{\sqrt{2}} & i \end{pmatrix}$$

そして教科書と対応させると、 S は

$$S = \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} & -i \\ \frac{1}{\sqrt{2}} & i \end{pmatrix}, S^{-1} = \tilde{S}^* = \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}} \\ i & -i \end{pmatrix} \text{である。}$$

次に B の新基底を表す。

B の規格化直交性をもつ固有ベクトルは、 B を対角化する基底である。

これより新基底は $\begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} \\ i \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} \\ -i \end{pmatrix}$ である。

B の元の基底は $\mathbf{e}_1 = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \mathbf{e}_2 = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$ であるので、

新基底は $\mathbf{e}_1'' = \frac{1}{\sqrt{2}}\mathbf{e}_1 + \frac{i}{\sqrt{2}}\mathbf{e}_2, \mathbf{e}_2'' = \frac{1}{\sqrt{2}}\mathbf{e}_1 - \frac{i}{\sqrt{2}}\mathbf{e}_2$ と表される。

(※) エルミート行列でない一般の正方行列の対角化では、対角化行列の逆行列の求め方が上記とは異なることに、ご注意ください。