駒場現代物理学(2020)第6回講義ノート

1　複素線形代数と量子力学

1.1　基本法則

I 系の状態は状態空間 $\mathcal{H}$ のノンゼロのベクトル $|\psi\rangle$ であらわされる。状態空間はエルミート内積付き複素線形空間である。

II 系に対する観測以外の操作(時間発展、回転等)は(反)ユニタリ演算子 U であらわされる。

III 系の観測量は $\mathcal{H}$ のエルミート演算子 A であらわされる。

IV 観測量 A の固有ベクトルを $|i\rangle$, $A|i\rangle = a_i|i\rangle$ とすると、状態 $|\psi\rangle$ において A を観測した際の結果は a_i のうちどれかであり、a_i が得られる確率は $|c_i|^2$ に比例する、ただし c_i は $|\psi\rangle = \sum_i c_i|i\rangle$ と展開したときの係数。

V 全系が部分系 A と部分系 B からなり、部分系がそれぞれ状態空間 $\mathcal{H}_A, \mathcal{H}_B$ を持つとき、全系の状態空間はテンソル積 $\mathcal{H}_A \otimes \mathcal{H}_B$ である。

ニュートンの運動の三法則のように法則の名前、順番等が決まっていればよいのだが、決まっていないようである。ここでは僕の趣味で I から V にした[1]。

1.2　法則 I について: 複素線形代数の基本

状態空間 $\mathcal{H}$ は複素線形空間である。すなわち

$$|\psi\rangle\,,\ |\phi\rangle \in \mathcal{H} \tag{1.2.1}$$

に対し

$$|\psi\rangle + |\phi\rangle \in \mathcal{H} \tag{1.2.2}$$

がさだまり、

$$|\psi\rangle\,\mathcal{H} \tag{1.2.3}$$

と複素数 $a \in \mathcal{H}$ に対して

$$a\,|\psi\rangle \ni \mathcal{H} \tag{1.2.4}$$

が定まっている[2]。

さらに状態空間にはエルミート内積が定まっている:

$$|\psi\rangle\,,\ |\phi\rangle \in \mathcal{H} \tag{1.2.5}$$

に対し

$$(|\psi\rangle\,, |\phi\rangle) \in \mathbb{C} \tag{1.2.6}$$

[1] この枠組みが論理的必然かどうかについてはいろいろ研究がある。Kapustin さんの講演 http://www.theory.caltech.edu/~kapustin/QM_colloq.pdf 等参照。

[2] 量子力学では慣習的に状態ベクトルを $|\psi\rangle$ などと書く。これを ket とよぶ。

が定まっていて、二つ目の引数に対して複素線形

$$(|\psi\rangle, a|\phi\rangle) = a(|\psi\rangle, |\phi\rangle), \quad (|\psi\rangle, |\phi\rangle + |\phi'\rangle) = (|\psi\rangle, |\phi\rangle) + (|\psi\rangle, |\phi'\rangle) \tag{1.2.7}$$

さらに

$$\overline{|\psi\rangle, |\phi\rangle} = (|\phi\rangle, |\psi\rangle). \tag{1.2.8}$$

すると $(a|\psi\rangle, |\phi\rangle) = \bar{a}(|\psi\rangle, |\phi\rangle)$ も従う。

すると $(|\psi\rangle, |\psi\rangle)$ は実であるが、さらに

$$(|\psi\rangle, |\psi\rangle) \geq 0 \tag{1.2.9}$$

がいつもなりたち、これを $|\psi\rangle$ の長さの二乗と呼ぶことにする。さらに

$$(|\psi\rangle, |\psi\rangle) = 0 \Leftrightarrow |\psi\rangle = 0 \tag{1.2.10}$$

が成り立つとする。[3]

この講義では有限次元の $\mathcal{H}$ しか扱わない。 n 次元とすると

$$|\psi\rangle \in \mathcal{H} \longleftrightarrow (\psi_1, \cdots, \psi_n)^T \tag{1.2.11}$$

という縦ベクトルだと思える。こういうものを $\mathcal{H} \simeq \mathbb{C}^n$ と書く。内積は

$$(|\psi\rangle, |\phi\rangle) = \bar{\psi}_1\phi_1 + \bar{\psi}_2\phi_2 + \bar{\psi}_3\phi_3 + \cdots + \bar{\psi}_n\phi_n. \tag{1.2.12}$$

これらが上記関係式をみたすのは確認できる。

1.3 線形変換、演算子、作用素

変換 $|\psi\rangle \mapsto A|\psi\rangle$ が線形であるとは

$$A(|\psi\rangle + |\psi'\rangle) = A|\psi\rangle + A|\psi'\rangle, \qquad A(a|\psi\rangle) = aA(|\psi\rangle) \tag{1.3.1}$$

を満たすこと。

複素線形変換は行列の掛け算である: $|\psi\rangle \mapsto |\phi\rangle = A|\psi\rangle$ は

$$\phi_i = \sum_{j=1}^{n} (A_{ij})\psi_j \tag{1.3.2}$$

ということ。

変換 T が反線形 (antilinear) もしくは共役線形 (conjugate linear) であるとは

$$T(|\psi\rangle + |\psi'\rangle) = T|\psi\rangle + T|\psi'\rangle, \qquad T(a|\psi\rangle) = \bar{a}T(|\psi\rangle) \tag{1.3.3}$$

を満たすこと。

[3]量子力学では $(|\psi\rangle, |\phi\rangle)$ のことをしばしば $\langle\psi|\phi\rangle$ と書き、$\langle\psi|$ の部分を bra という。$\langle\psi|\phi\rangle$ とあわせて bra(c)ket となるという Dirac による駄洒落らしい。複素線形代数に慣れてしまえばこの記法は便利だが、複素線形代数も知らない時点だとかえってややこしいと思うので、今回の講義では bra は使わないことにする。また物理では複素共役は $\bar{z}$ のかわりに z^* と書くことがしばしばあるが今回の講義では $\bar{z}$ を使うことにする。

線形変換 A に対してそのエルミート共役 $A^\dagger$ は

$$(A|\psi\rangle, |\phi\rangle) = (|\psi\rangle, A^\dagger|\phi\rangle) \tag{1.3.4}$$

で定める。成分でかけば

$$(A^\dagger)_{ij} = \overline{A_{ji}}. \tag{1.3.5}$$

これより

$$\overline{(|\psi\rangle, A|\phi\rangle)} = (|\phi\rangle, A^\dagger|\psi\rangle) \tag{1.3.6}$$

となる。勝手な ψ に対して

$$\overline{(|\psi\rangle, A|\psi\rangle)} = (|\psi\rangle, B|\psi\rangle) \tag{1.3.7}$$

を満たすような B は $A^\dagger$ に限るので、これで定義してもよい。

線形変換のことを operator という。日本語訳は理論物理では演算子、数学では作用素ということが多い。

1.4 法則 II について: (反)ユニタリ変換

$\mathcal{H}$ の複素線形変換 $|\psi\rangle \mapsto U|\psi\rangle$ で長さを保つ、すなわち

$$(U|\psi\rangle, U|\psi\rangle) = (\psi, \psi) \tag{1.4.1}$$

をみたすものをユニタリ変換という。

反線形で長さを保つものを反ユニタリ変換という。

量子力学において観測以外の操作(t だけ時間をすすめる、空間を z 軸回り θ だけ回転させる、時間反転させる、など)はユニタリか反ユニタリである。反ユニタリ変換は時間反転を伴う変換に対応することが知られている。

1.5 法則 III について: エルミート行列

量子力学において観測量 (observable) とは状態空間 $\mathcal{H}$ のエルミート演算子 A のこと。観測量というのは、エネルギーだとか角運動量などのこと。無限次元だとエルミートという概念は自己共役、対称、エルミートという三つの微妙に異なる概念にわかれる。有限次元だとそういう問題はない。 A がエルミートとは $A = A^\dagger$ であること。

1.6 法則 IV について: エルミート行列の固有値分解

エルミート演算子 A であらわされる観測量を、状態 $|\psi\rangle \in \mathcal{H}$ で観測したときにどうなるかというルール。

$A|i\rangle = a_i|i\rangle$ となり $|i\rangle \neq 0$ であるようなとき、a_i を固有値、$|i\rangle$ を固有ベクトルもしくは固有状態という。

事実/定理 1.6.1 $\mathcal{H} \simeq \mathbb{C}^n$ に作用するエルミート行列 Aは n 個の固有ベクトル $|1\rangle$, $\ldots$, $|n\rangle$ で互いに直交し長さが 1 のものが取れる。その固有値はすべて実数である。

これは重要なので証明を与えておく。帰納法で証明する。まず $n = 1$ のとき、$n \times n$ 行列とは単に数である。よってエルミート行列 $A = A^\dagger$ とは単に実数である。ベクトル (1) は長さ 1 の固有状態である。

$\mathcal{H}$ の次元が一般の n のとき、長さ 1 のベクトル $|\psi\rangle$ 全体の空間を考える。これは $|\psi_1|^2+\cdots+|\psi_n|^2=1$ というベクトル全体の空間だから実 $2n$ 次元空間のなかの単位球面、すなわち S^{2n-1} をなす。このとき

$$\overline{(|\psi\rangle, A|\psi\rangle)} = (|\psi\rangle, A^\dagger|\psi\rangle) = (|\psi\rangle, A|\psi\rangle) \tag{1.6.1}$$

だから $(|\psi\rangle, A|\psi\rangle)$ は実である。以下の補題がある:

補題 1.6.2 長さ 1 の状態 $|\psi\rangle$ に対して $(|\psi\rangle, A|\psi\rangle)$ という関数を考え、最小値を a 、最小を実現するベクトルを $|1\rangle$ と書く。このとき $A|1\rangle = a|1\rangle$ となり $|1\rangle$ は固有状態である。

補題の証明はあとで与えるので、これをつかって証明をやってしまう。いま $\mathcal{H}$ の中で $|1\rangle$ に直交する部分空間を $\mathcal{H}'$ とする。すなわち

$$|\psi\rangle \in \mathcal{H}' \Leftrightarrow (|1\rangle, |\psi\rangle) = 0. \tag{1.6.2}$$

さて、A は $\mathcal{H}'$ を $\mathcal{H}'$ にうつす。なぜなら、$|\psi\rangle \in \mathcal{H}'$ なら

$$(|1\rangle, A|\psi\rangle) = (A^\dagger|1\rangle, |\psi\rangle) = (A|1\rangle, |\psi\rangle) = a(|1\rangle, |\psi\rangle) = 0 \tag{1.6.3}$$

なので。よって A は $\mathcal{H}' \simeq \mathbb{C}^{n-1}$ 上のエルミート行列とみなせる、帰納法の仮定よりしめされた。

補題を示す。多少式を簡略化するため $B = A - a$ と定義する。[4] すると ψ の長さが 1 で、$(\psi, B|\psi\rangle) \geq 0$ で、$|\psi\rangle = |1\rangle$ のとき 0 で最小値になる、このとき $B|1\rangle = 0$ を示せということになる。さて、 ϵ を(微小な)複素数として $|\phi\rangle = c^{-1}(|1\rangle + \epsilon B|1\rangle)$ と定める、ただし c は長さを 1 にするための係数で

$$\begin{aligned} c^2 &= (|1\rangle + \epsilon B|1\rangle, |1\rangle + \epsilon B|1\rangle) \\ &= 1 + (\epsilon + \bar{\epsilon})(|1\rangle, B|1\rangle) + |\epsilon|^2(B|1\rangle, B|1\rangle) \\ &= 1 + |\epsilon|^2(B|1\rangle, B|1\rangle). \end{aligned} \tag{1.6.4}$$

さてここで

$$\begin{aligned} (|\phi\rangle, B|\phi\rangle) &= c^{-2}(|1\rangle + \epsilon B|1\rangle, B|1\rangle + \epsilon B^2|1\rangle) \\ &= \frac{(\epsilon + \bar{\epsilon})(B|1\rangle, B|1\rangle) + |\epsilon|^2(|1\rangle, B^3|1\rangle)}{1 + |\epsilon|^2(B|1\rangle, B|1\rangle)} \end{aligned} \tag{1.6.5}$$

これは $|\epsilon| \ll 1$ ならば

$$\sim (\epsilon + \bar{\epsilon})(B|1\rangle, B|1\rangle) \tag{1.6.6}$$

であるが、仮定より $(|\phi\rangle, B|\phi\rangle) \geq 0$ であり、 $(\epsilon + \bar{\epsilon})$ は正負いずれの値もとりうることを思い出すと $(B|1\rangle, B|1\rangle) = 0$ すなわち $B|1\rangle = 0$ がわかった。

補題の証明がおわったので、もとの定理の証明もおわった。この補題は(量子力学における)変分法とよばれ、 A の最低固有値を近似的にもとめるためにもしばしば使われる。いろいろ $|\psi\rangle$ を選びながら $(|\psi\rangle, A|\psi\rangle)$ を最小化するわけである。

[4] 行列 A と実数 a を足すときは a のほうには単位行列が掛かっているという略記法をつかう。同様に $(-)^2 = +$ という記法も見たことがある。関係ないが positive を +ve, negative を −ve と書くのも見た事がある。

さて、観測量 A を状態 $|\psi\rangle$ で測ったときどうなるか。 A の固有状態、固有値を $|i\rangle, a_i$ と書く。 $|i\rangle$ は長さ 1 で互いに直交するように取っておく。すると $|\psi\rangle$ は

$$|\psi\rangle = \sum_{i=1}^{n} c_i |i\rangle \tag{1.6.7}$$

と展開できる。 c_i を求めるには

$$(|i\rangle, \psi) = (|i\rangle, \sum_j c_j |j\rangle) = \sum_j c_j (|i\rangle, |j\rangle) = c_i \tag{1.6.8}$$

を使えば良い。また同様に展開すれば

$$(|\psi\rangle, |\psi\rangle) = \sum |c_i|^2 \tag{1.6.9}$$

である。簡単のため a_i は全て異なるとする。

- 観測で得られる値は a_i のうちのどれかである。
- a_i が得られる確率は $|c_i|^2$ に比例する。

特に、固有状態 $|i\rangle$ で A を観測すると 100% の確率で a_i が測定される。もっと一般には、a_i が得られる確率は

$$\frac{|c_i|^2}{\sum_j |c_j|^2} = \frac{|(|i\rangle, |\psi\rangle)|^2}{|(|\psi\rangle, |\psi\rangle)|^2} \tag{1.6.10}$$

で与えられる。

勝手なノンゼロの複素数 z に対して、$|\psi\rangle$ と $z|\psi\rangle$ は上式の分子分母に同じ係数 $|z|^2$ が掛かるだけで同じ観測確率をあたえる。これは勝手な観測量 A について正しい。そこで、互いに複素数倍の状態ベクトルは「物理的に同じ」であるとよくいわれる。(しかし、勿論 $|\phi\rangle + |\psi\rangle$ と $|\phi\rangle + z|\psi\rangle$ は異なることに注意。) $\mathcal{H} \simeq \mathbb{C}^n$ のノンゼロのベクトルで互いに複素数倍のものを同一視した空間を $\mathbb{CP}^{n-1}$ と書き、複素 $(n-1)$ 次元射影空間という。すなわち、n 次元の状態空間をもつ量子系の物理的に異なる状態たちは $\mathbb{CP}^{n-1}$ をなす。

また、上式の分母は面倒くさいので、しばしば状態 $|\psi\rangle$ の長さは 1 であるように取っておく。それでも絶対値 1 の複素数 c に対し $|\psi\rangle$ と $c|\psi\rangle$ は両方とも長さ 1 でしかも物理的に同等である。

また、上のルールから観測量 A の長さ 1 の状態 $|\psi\rangle$ における期待値は

$$\sum_i a_i |c_i|^2 = \sum_i a_i |(|i\rangle, |\psi\rangle)|^2 \tag{1.6.11}$$

であるが、これは $(|\psi\rangle, A|\psi\rangle)$ と等しい、なぜなら

$$(|\psi\rangle, A|\psi\rangle) = (\sum_i c_i |i\rangle, A \sum_j c_j |j\rangle) = \sum_{i,j} \overline{c_i} a_j c_j (|i\rangle, |j\rangle) = \sum_i a_i |c_i|^2. \tag{1.6.12}$$

だから上記の補題で最小化していたものは観測量 A の期待値だった。期待値の最小値は最小の固有値であるということ。

エルミート行列の固有ベクトルの性質というのと量子力学の確率解釈が密接に関係しているというのに注意。

1.7 法則 V

この法則は複合系をつくる際の法則。次回以降に扱う。

1.8 法則 II と法則 III について

法則 II では、観測以外の時間発展、回転などの操作はユニタリ変換 U であるといい、法則 III では、観測量はエルミート行列 A であると言った。

一般に行列 A に対し、

$$e^A := 1 + A + \frac{A^2}{2!} + \frac{A^3}{3!} + \cdots \tag{1.8.1}$$

と定める。 A と B が交換しないと一般に $e^{A+B} \neq e^A e^B$ であるが、 A と B が交換すれば $e^{A+B} = e^A e^B$ は以前と同様に示せる。

A がエルミートのときに i は虚数単位、 s を実のパラメタとして $e^{\mathrm{i}sA}$ を考える。これはユニタリである。なぜなら

$$(e^{\mathrm{i}sA}\psi, e^{\mathrm{i}sA}\psi) = (\psi, e^{-\mathrm{i}sA}e^{\mathrm{i}sA}\psi) = (\psi, e^{-\mathrm{i}sA+\mathrm{i}sA}\psi) = (\psi, \psi). \tag{1.8.2}$$

また逆に勝手なユニタリ行列 U は何かエルミート行列をもちいて $e^{\mathrm{i}A}$ と掛ける。

具体的には、固有ベクトル $|i\rangle$ を互いに直交して長さが 1 になるようにとって、固有値を a_i と書き、さらに一般のベクトル $|\psi\rangle$ を $|\psi\rangle = \sum_i c_i |i\rangle$ と展開すると、

$$e^{\mathrm{i}sA}|\psi\rangle = \sum_i e^{\mathrm{i}sa_i} c_i |i\rangle . \tag{1.8.3}$$

まとめると、ある(観測以外の)操作がユニタリ U であらわされると、対応する観測量 A が $U = e^{iA}$ として存在する。

たとえば、角度 θ だけ回転させる、という操作 $R(\theta)$ はユニタリ演算子だが、エルミート演算子 $\underline{L}$ をもちいて

$$R(t) = e^{\mathrm{i}\theta\underline{L}} \tag{1.8.4}$$

指数関数の肩は無次元、すなわち単位を持たない。角度 θ も無次元。だから $\underline{L}$ も無次元。

一般に $\theta = 4\pi$ すなわち 720° まわすともとに戻るはずである。よって $e^{4\pi\mathrm{i}\underline{L}} = 1$。よって $\underline{L}$ は半整数、すなわち整数か整数割る 2 である。

古典極限をとると $\underline{L}$ は角運動量に対応することがしられている。角運動量 L は単位 $\mathrm{kg}\cdot\mathrm{m}^2\cdot\mathrm{s}^{-1}$ を持つ。

$$L = \hbar\underline{L} \tag{1.8.5}$$

とした換算係数がプランク定数 $\hbar$ で

$$2\pi\hbar = 6.62607015\cdot 10^{-34}\mathrm{kg}\cdot\mathrm{m}^2\cdot\mathrm{s}^{-1} \tag{1.8.6}$$

となるように kg, m, s が定義されている。よって、量子力学的には角運動量は半整数 $\times\hbar$ である。

また、時間 t だけすすめる、という操作 $U(t)$ もユニタリ演算子で、エルミート演算子 $\underline{H}$ を用いて

$$U(t) = e^{\mathrm{i}t\underline{H}} \tag{1.8.7}$$

とかける。指数関数の肩は無次元で、t は s の単位をもつので、 $\underline{H}$ は s^{-1} (周波数)の単位を自然に持つ。

そもそも s の定義は、セシウム 133 原子の $\underline{H}$ の特定の二つの固有状態 $\underline{H}\,|1\rangle = \omega_1\,|1\rangle$, $H\,|2\rangle = \omega_2\,|2\rangle$ に対して

$$\omega_1 - \omega_2 = 2\pi \cdot 9192631770\ \mathrm{s}^{-1} \tag{1.8.8}$$

となるように定められている。 $H = \hbar\underline{H}$ はエネルギーの次元をもち、古典極限をとると系のエネルギーに対応する。

$$U(t) = e^{itH/\hbar} \tag{1.8.9}$$

ということで、これをシュレーディンガー方程式という。

おまけだが、m の定義は光速が

$$c = 299792458\mathrm{m/s} \tag{1.8.10}$$

となるようにされている。

2 一番簡単な量子力学系

一番簡単な状態空間は $\mathcal{H} = \mathbb{C}^1$ である。しかし二つの状態ベクトル $|\psi\rangle$,$|\psi'\rangle$ が互いに複素数倍

$$|\psi'\rangle = z\,|\psi\rangle \tag{2.0.1}$$

のときは物理的に同等であった。勝手な $\mathbb{C}^1$ のベクトルは (1) の複素数倍なので、ほんとうに一コしか状態がない。勝手な1×1 のユニタリ変換は複素数倍なので実質なにもしない。勝手な1×1 のエルミート行列は単に実数 a で、ベクトル (1) はその固有値で、測定するとかならず a が得られる。だから面白いことはなにも起きない。

しかし、この一番簡単な量子力学系が外場にどのように依存するかというのは面白い問題で、昔からある Berry phase とか、トポロジカル物性で話題の symmetry protected topological phase (SPT phase) はそれをみていると思っても良い。ベクトル束を勉強したことがある人は、 line bundle がファイバーが一次元でも非自明なことはいろいろ起こるというのを知っていると思いますが似たような状況。しかし外場への応答は案外大変なので、次にすすむ。

3 二番めに簡単な量子力学系

次に二番めに簡単な状態空間として $\mathcal{H} \simeq \mathbb{C}^2$ という二次元の複素ベクトル空間の場合を考える。量子力学の講義で歴史的に進む場合は一粒子の運動を扱うことが多いが、その場合は状態空間は無限次元になって、出てくる演算子は微分演算子等になって難しい。でも二次元の複素ベクトル空間だと行列ですむので比較的簡単。量子力学の本当に面白い所は無限次元の状態空間が出てくるからだという人も(お年の人には)多いけれども、二次元(や有限次元)の複素ベクトル空間でも十分面白いことが沢山おこる。歴史的には量子力学は古典力学を量子化して得られ、その場合は無限次元の状態空間が出がちであったので、こういう有限次元の状態空間は驚きであった。はじめてこれが出て来たのは電子のスピン自由度に関してだが、それ以外にもいろんな系で出てくる。現在では量子情報で qubit と呼ばれてとても重要。

3.1 普通のやり方

どのような観測量があるか考える。観測量は 2×2 のエルミート行列 A_{ij} である。条件は $A_{ij}=\overline{A_{ji}}$ だから、行列としてあからさまに書くと

$$A=\begin{pmatrix} a & z \\ \bar{z} & b \end{pmatrix} \tag{3.1.1}$$

ただし a, b は実数、z は複素数、という形である。これの固有ベクトルは何か、固有値はなにかを計算すると、 A を観測したときにどの値がどの確率で得られるかがわかる。 A はまた a, s, t, u を実数として

$$A=a\mathrm{id}+s\sigma_x+t\sigma_y+u\sigma_z \tag{3.1.2}$$

とも展開できる、ただし

$$\mathrm{id}=\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \tag{3.1.3}$$

は単位行列で、

$$\sigma_x=\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix},\quad \sigma_y=\begin{pmatrix} 0 & -\mathrm{i} \\ \mathrm{i} & 0 \end{pmatrix},\quad \sigma_z=\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \tag{3.1.4}$$

ととる。$\sigma_{x,y,z}$ はパウリ行列と呼ばれる[5]。

σ_z の固有ベクトルは明らかに

$$\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix},\qquad \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \tag{3.1.5}$$

で、それぞれ固有値は $+1, -1$ である。状態

$$\begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \end{pmatrix} \tag{3.1.6}$$

ただし $|c_1|^2+|c_2|^2=1$ で σ_z を測定すると、確率 $|c_1|^2$ で $+1$ が得られ、確率 $|c_2|^2$ で -1 が得られ、期待値は $|c_1|^2-|c_2|^2$ である。

3.2 四元数を使おう

と、こういう風に 2×2 行列をつかって考えるのが普通だとおもうが、折角四元数を学んだので、この講義ではそれをつかってやってみよう[6]。

いま二次元の複素ベクトルと四元数を次のように対応させてみる:[7]

$$\mathbb{C}^2\ni|\psi\rangle=\begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{pmatrix}\longleftrightarrow \psi=\psi_2+\psi_1\mathrm{k}\in\mathbb{H} \tag{3.2.1}$$

[5] 2×2 のエルミート行列で単位行列でないものを書き下しただけで物理の歴史に名前が残るのだから昔は物理は簡単だった。

[6] 四元数を使ったほうが良いと主張する気は僕は無く、普通と異なるだけ。普通の方法はどこの教科書にでも載っていて、講義でもやるので、こういう特殊な講義でまでそれを聞く必要はないでしょう。

[7] 別に (3.2.1) はもっと安直に $\psi=\psi_1+\psi_2\mathrm{j}$ などとしてもよいのだが、あとに符合やらいろいろがでるのでこうとっておくとよい。

複素線形空間としての操作は

$$|\psi\rangle + |\phi\rangle \longleftrightarrow \psi + \phi, \qquad z\,|\psi\rangle \longleftrightarrow z\psi \quad (z \in \mathbb{C}) \tag{3.2.2}$$

と対応する。

また長さの二乗は

$$(|\psi\rangle\,, |\psi\rangle) = |\psi|^2 \tag{3.2.3}$$

である。内積は生憎綺麗にかけない[8]。一般に

$$\begin{aligned} 4(|\psi\rangle\,, |\phi\rangle) = &+(|\psi\rangle + |\phi\rangle\,, |\psi\rangle + |\phi\rangle) - (|\psi\rangle - |\phi\rangle\,, |\psi\rangle - |\phi\rangle) \\ &+ i(|\psi\rangle - i\,|\phi\rangle\,, |\psi\rangle - i\,|\phi\rangle) - i(|\psi\rangle + i\,|\phi\rangle\,, |\psi\rangle + i\,|\phi\rangle) \end{aligned} \tag{3.2.4}$$

という等式があるので、

$$4(|\psi\rangle\,, |\phi\rangle) = |\psi + \phi|^2 - |\psi - \phi|^2 + \mathrm{i}|\psi - \mathrm{i}\phi|^2 - \mathrm{i}|\psi + \mathrm{i}\phi|^2 \tag{3.2.5}$$

となる。

複素線形変換は四元数をつかってどんな風にかけるだろうか。勿論複素数 w に対して

$$\mathbb{H} \ni \psi \mapsto w\psi \in \mathbb{H} \tag{3.2.6}$$

は複素線形である。しかし、四元数 q に対して

$$\mathbb{H} \ni \psi \mapsto q\psi \in \mathbb{H} \tag{3.2.7}$$

は複素線形では一般には「ない」。なぜなら一般には

$$z(q\psi) \neq q(z\psi) \tag{3.2.8}$$

だから。一方で四元数 q に対して

$$\mathbb{H} \ni \psi \mapsto \psi q \in \mathbb{H} \tag{3.2.9}$$

は複素線形変換である、なぜなら

$$z(\psi q) = (z\psi)q \tag{3.2.10}$$

なので。四元数の結合則が複素線形性になる。

すると、(3.2.6) と (3.2.9) を組み合わせて、複素数 w と四元数 q に対し

$$\psi \mapsto w\psi q \tag{3.2.11}$$

は複素線形変換である。

いつ変換

$$\psi \mapsto U(\psi) := w\psi q \tag{3.2.12}$$

はユニタリだろうか? $|\psi| = |w\psi q|$ であれば長さを保つ。特に $|w| = |q| = 1$ であればこれは満たされる。実は勝手な 2×2 のユニタリ行列はこのように書ける

また長さを保つが上記のように複素線形ではない

$$\psi \mapsto \mathrm{k}\psi \tag{3.2.13}$$

という変換をかんがえてみる。これは

$$\mathrm{k}(z\psi) = \bar{z}(\mathrm{k}\psi) \tag{3.2.14}$$

だから反ユニタリである。

[8] qubit を四元数で扱うのはかならずしも良く無いとはすでに言ったはず...

3.3 回転の $\mathcal{H}$ への作用

二次元の状態空間をいま四元数 $\mathbb{H}$ として扱っている。ここに三次元空間の回転操作はどう作用させればいいだろうか? 法則 II より、ユニタリ変換でなければならない。ユニタリ変換は (3.2.11) で $|w| = |q| = 1$ というものだった。

さて、三次元空間の回転は三次元空間を純虚四元数 v であらわすと四元数 $|q| = 1$ をもちいて

$$v \mapsto qv\bar{q} \tag{3.3.1}$$

とあらわせるのだった。そこで、q であらわされる三次元回転は

$$\mathbb{H} \ni \psi \mapsto \psi\bar{q} \in \mathbb{H} \tag{3.3.2}$$

と作用するとするのが自然である。三次元の回転が (3.3.1) と作用するものをベクトル (vector) とよび、三次元の回転が (3.3.2) と作用するものをスピノル (spinor) とよぶ。

i 軸周りの θ 回転は $q = e^{\mathrm{i}\theta/2}$ であたえられるのだった。これは ψ には

$$\psi \mapsto \psi e^{-\mathrm{i}\theta/2} \tag{3.3.3}$$

と作用する。特に $\theta = 2\pi$ のとき

$$\psi \mapsto -\psi \tag{3.3.4}$$

であるから、360° 回転で -1 がつき、$\theta = 4\pi$ すなわち 720° 回転ではじめて

$$\psi \mapsto \psi \tag{3.3.5}$$

となって元に戻る。

この作用のもとで

$$1 \mapsto e^{-\mathrm{i}\theta/2}1 \tag{3.3.6}$$

だから 1 は固有値 $e^{-\mathrm{i}\theta/2}$ の固有ベクトル、同様に k は

$$\mathrm{k} \mapsto \mathrm{k}e^{-\mathrm{i}\theta/2} = e^{+\mathrm{i}\theta/2}\mathrm{k} \tag{3.3.7}$$

だから固有値 $e^{+\mathrm{i}\theta/2}$ の固有ベクトルである。

一般に θ 回転の固有値を $e^{\mathrm{i}\theta\underline{L}}$ と書いた際に $L = \hbar\underline{L}$ がその系の角運動量だった。これより、qubit に回転が (3.3.2) のように作用するときは角運動量は $\pm\hbar/2$ であることがわかった。

3.4 時間反転の $\mathcal{H}$ への作用

時間反転は反ユニタリ変換である。この講義では時間反転は

$$\psi \mapsto \mathrm{k}\psi \tag{3.4.1}$$

と作用するものとする。この作用は回転の作用と交換する、なぜなら

$$\mathrm{k}(\psi\bar{q}) = (\mathrm{k}\psi)\bar{q} \tag{3.4.2}$$

だから。時間反転を二回行うと

$$\mathrm{kk}\psi = -\psi \tag{3.4.3}$$

なので -1 倍される。これは $t \mapsto -t$ を二回やると $t \mapsto +t$ になりそうなのに不思議だが、360° 回転が座標には $+1$ 倍で作用するのにスピノルには -1 倍で作用するのとローレンツ変換を通じてつながっていることが知られている。

3.5 パウリ行列と四元数

さて、一般にエルミート演算子 A を用いて $U(s) = e^{\mathrm{i}sA}$ というユニタリ変換をかんがえられるのだった。軸 (s,t,u) まわりの θ 回転は長さ 1 の純虚四元数 $c = s\mathrm{i} + t\mathrm{j} + u\mathrm{k}$ を用いてユニタリ変換

$$\psi \mapsto \psi e^{-c\theta/2} \tag{3.5.1}$$

であたえられた。これが

$$\psi \mapsto e^{\mathrm{i}\theta \underline{L}} |\psi\rangle \tag{3.5.2}$$

となるようなエルミート演算子 $\underline{L}$ は何か? これは

$$\psi(-c\theta/2) = \mathrm{i}\theta \underline{L}(\psi) \tag{3.5.3}$$

であればよいから

$$\underline{L}(\psi) = \mathrm{i}\psi c/2 \tag{3.5.4}$$

である。 $\hbar\underline{L}$ は軸 (s,t,u) まわりの角運動量演算子である。

$\psi = \psi_2 + \psi_1\mathrm{k}$ に対して $\psi \mapsto \mathrm{i}\psi c$ を $c = \mathrm{i}, \mathrm{j}, \mathrm{k}$ の場合にやってみると、

$\psi \mapsto \mathrm{i}\psi\mathrm{i}$	$\psi \mapsto \mathrm{i}\psi\mathrm{j}$	$\psi \mapsto \mathrm{i}\psi\mathrm{k}$
$\|\psi\rangle \mapsto \sigma_z \|\psi\rangle$	$\|\psi\rangle \mapsto \sigma_x \|\psi\rangle$	$\|\psi\rangle \mapsto \sigma_y \|\psi\rangle$

(3.5.5)

と対応することがわかる。すなわち、(s,t,u) 軸まわりの角運動量演算子は

$$L = \frac{\hbar}{2}(s\sigma_z + t\sigma_x + u\sigma_y) \tag{3.5.6}$$

であらわされる。

3.6 角運動量演算子の固有状態

エルミート演算子 $s\sigma_z + t\sigma_x + t\sigma_y$ の固有値と固有状態を求めよう。以下 $s^2 + t^2 + u^2 = 1$ と仮定する。 (3.5.5) より、四元数で書くと

$$\psi \mapsto \mathrm{i}\psi(s\mathrm{i} + t\mathrm{j} + u\mathrm{k}) \tag{3.6.1}$$

という作用の固有状態がわかればよい。 $c := s\mathrm{i} + t\mathrm{j} + u\mathrm{k}$ と書くとこれは純虚で長さ 1 の四元数であるから、これに対して

$$\psi \mapsto \mathrm{i}\psi c \tag{3.6.2}$$

の固有状態を見出せということである。

さて、純虚四元数を三次元のベクトルだと思った際にベクトル $-\mathrm{i}$ を c まで回転させるような回転があった。これは長さ 1 の四元数 q を用いてあらわせるのだった:

$$c = \bar{q}(-\mathrm{i})q. \tag{3.6.3}$$

すると $\psi = q$ は (3.6.2) の固有状態である:

$$\mathrm{i}qv = \mathrm{i}q\bar{q}(-\mathrm{i})q = q. \tag{3.6.4}$$

固有値は $+1$。また $\mathrm{k}q$ も固有ベクトルである:

$$\mathrm{i}(\mathrm{k}qv) = \mathrm{i}\mathrm{k}q\bar{q}(-\mathrm{i})q = -\mathrm{k}q \tag{3.6.5}$$

固有値は -1。 ($\mathrm{k}q$ は q の時間反転だった。時間反転は角運動量を逆向きにする。)

これで $s^2 + t^2 + u^2 = 1$ のときの $s\sigma_z + t\sigma_x + u\sigma_y$ の固有値は ± 1 であることがわかり、固有ベクトルも決定された。

3.7 「物理的に同等」な状態の分類; Bloch 球; Hopf fibration

さて、この項目での考察のおしまいに、 qubit 系 $\mathcal{H} \simeq \mathbb{C}^2 \simeq \mathbb{H}$ において物理的に同等な波動関数をどう分類するかを考えよう。一般に $|\psi\rangle, |\psi'\rangle \in \mathcal{H}$ が非ゼロの複素数 z に対して

$$|\psi'\rangle = z\,|\psi\rangle \tag{3.7.1}$$

ならば物理的に同等というのだった。確率解釈のためには $(|\psi\rangle, |\psi\rangle) = 1$ にしておくのは自然である。それでも (3.7.1) で $|z| = 1$ な場合は「物理的に同等」ということにする。

$\mathcal{H} = \mathbb{C}^2$ の元を $|\psi\rangle = (\psi_1, \psi_2)^T$ とかくと、

$$(|\psi\rangle, |\psi\rangle) = |\psi_1|^2 + |\psi_2|^2 = 1 \tag{3.7.2}$$

は $\psi_{1,2}$ の実部虚部をとれば S^3 をなす。ここにさらに $|z| = 1$ なる複素数に対して

$$(\psi_1, \psi_2) \sim z(\psi_1, \psi_2) \tag{3.7.3}$$

という同一視をした場合にどうなるか? という問題である。

さてこの講義では変な方法を使うというのがモットーである。そこで四元数を用いよう。 $\mathbb{H} \ni \psi := \psi_2 + \psi_1 \mathrm{k}$ を使うのだった。以下 ψ を別の用途でつかうので、q と書くことにする。問題は単位長さの四元数たち $|q| = 1$ の間に $|z| = 1$ なる複素数に対して

$$q \sim q' = zq \tag{3.7.4}$$

という同一視をするとどうなるか、という問題である。

実はこれは前節で答えが与えられている。なぜか? 前節で長さ 1 の純虚四元数 $c = \bar{q}(-\mathrm{i})q$ に対してそれから定まるエルミート演算子

$$\psi \mapsto \mathrm{i}\psi c \tag{3.7.5}$$

の固有値 $+1$ の固有ベクトルとして $\psi = q$ をとれることを学んだ。

そこで長さ 1 の四元数 q に対して対応

$$q \mapsto c = \bar{q}(-\mathrm{i})q \tag{3.7.6}$$

を考える。c は長さ 1 の純虚四元数なのでこれは

$$S^3 \to S^2 \tag{3.7.7}$$

という写像である。

三次元を二次元にうつすので、同じ c にうつされる q は沢山ある。たとえば絶対値 1 の複素数 z に対し $q' = zq$ ならば

$$\overline{zq}(-\mathrm{i})zq = \bar{q}\bar{z}(-\mathrm{i})zq = \bar{q}(-\mathrm{i})q \tag{3.7.8}$$

となり対応する c は等しい。実はこれは逆もなりたつ。なぜなら、

$$c = \bar{q}(-\mathrm{i})q = \bar{q}'(-\mathrm{i})q' \tag{3.7.9}$$

ならば、q も q' もエルミート演算子 (3.7.5) の固有値 $+1$ の固有状態である。固有値 $+1$ の固有状態は一次元だから、 q と q' は互いに複素数倍である: $q' = zq$。長さが等しいので、$z = 1$ である。

数学語でまとめると

事実/定理 3.7.1 絶対値 1 の四元数 q のなす三次元球面 S^3 の間に、絶対値 1 の複素数 z をもちいて $q \sim zq$ という同一視を行ったものは、絶対値 1 の純虚四元数 $c = \bar{q}(-\mathrm{i})q$ のなす二次元球面 S^2 になる。

物理語でまとめると

事実/定理 3.7.2 Qubit の状態空間 $\mathcal{H}$ で長さ 1 に正規化した状態 $|\psi\rangle$ たちは三次元球面 S^3 をなす。それらの間で絶対値 1 の複素数 z で関連付く物理的に同等な状態たち $|\psi\rangle \sim z\,|\psi\rangle$ を同一視したものは、$|\psi\rangle$ が固有値 $+1$ の固有状態になるような方向の角運動量演算子

$$s\sigma_z + t\sigma_x + u\sigma_y, \qquad (s^2 + t^2 + u^2 = 1)$$

のなす二次元球面 S^2 になる。

ということである。

この S^2 は物理では Bloch 球とよばれる。また、この写像 $S^3 \to S^2$ は数学では Hopf ファイブレーションとして知られる。 S^2 の一点 c を固定して、そこにうつる S^3 の点全体をかんがえると、それは $c \in S^2$ にうつる $q \in S^3$ をひとつ固定すれば zq たちのなす S^1 である。この状況を、S^3 は S^2 の各点に S^1 がファイバーしている、といい、

$$S^1 \to S^3 \to S^2 \tag{3.7.10}$$

と書く。

一般に空間 M 上に S^1 ファイブレーションを与えることは数学語では $U(1)$ バンドル、物理語では $U(1)$ ゲージ場すなわち電磁場を指定することに対応する。この観点からは Hopf fibration は S^2 上の特別な電磁場を指定しているとも思えるが、ちょうどこれは Dirac monopole というものと一致する。

また、ハミルトニアンが

$$s\sigma_z + t\sigma_x + u\sigma_y, \qquad (s^2 + t^2 + u^2 = 1) \tag{3.7.11}$$

であたえらえるような系を考えると (s, t, u) は物理的には外部磁場の向きと思える。このとき外部磁場の向き (s, t, u) を断熱的に変化させたときの量子状態の変化を考えることもできる。この変化を記述するのが Berry phase で、この場合は Berry phase が Dirac monopole と一致する。

また、$p + r = q$ で

$$S^p \to S^q \to S^r \tag{3.7.12}$$

というふうに球面が球面のうえの球面のファイブレーションになるものを一般に Hopf fibration というが、それらは

$$\begin{aligned} S^1 &\to S^3 \to S^2 \\ S^3 &\to S^7 \to S^4 \\ S^7 &\to S^{15} \to S^8 \end{aligned} \tag{3.7.13}$$

の三種類しかないことが知られており、それぞれ $\mathbb{C}, \mathbb{H}, \mathbb{O}$ と対応する。

兎に角、この系は Hopf fibration, Bloch sphere, Dirac monopole, Berry phase と有名な概念がすべて交錯する系で、それが二番めに簡単な量子系 $\mathcal{H} \simeq \mathbb{C}^2$ をかんがえるだけで出てくるというのは不思議なことである。また、この系を徹底的に学ぶのは為になる、ということでもある。