3-4. 数学的準備（線形演算子）

先に３−４、３−５節の概略を述べておく。

量子力学では、「観測可能な物理量」はエルミート演算子で表される。この演算子の固有ベクトルが正規直交基底の組みを作り、複素ベクトル空間を張る。任意の「状態」は固有ベクトルの線形結合からなる状態ベクトルで表される。観測すると、固有ベクトル（基底ベクトル）のどれかの状態に跳び移り、その固有値が観測される。

この話の詳細に移る前に、演算子にまつわる数学の復習をいくつかしておこう。

3-4-1. 演算子

「演算子[1]」はベクトル空間内のベクトルに作用し、その方向や大きさを変える。今、任意の M という観測可能な物理量があったとしよう。例えば、M としては、スピン角運動量の各成分 ($\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z$)や運動量の各成分 (p_x, p_y, p_z) などを考えれば良い。

量子力学では、「観測可能な物理量」は、「その物理量に対応する演算子（線形演算子）」で表現する[2]。その両者は、本来、区別するべきなので、次のような記号を導入する。

$$M \ （観測可能な物理量） \rightarrow \hat{M} \quad （Mに対応した演算子） \qquad (3\text{-}4\text{-}1)$$

すなわち、演算子であることを明らかにするために、この講義では、その量を表す文字の上に「ハット」の記号をつけることにする（$\hat{M}$はエムハットと読む）。

演算子は、一般に、複素ベクトル空間内の、ある状態ベクトル（これを $|A>$ とする）に作用し、方向や長さを変え、別のベクトル（これを $|B>$ とする）にする[3]。

これを式で次のように書く。

$$\hat{M}\,|A> = |B> . \qquad (3\text{-}4\text{-}2)$$

$\hat{M}$ が以下のような式を満たす場合、この演算子を線形演算子（linear operator)とよぶ。

$$\hat{M}(a\,|\alpha> + b\,|\beta>) = a\hat{M}\,|\alpha> + b\hat{M}\,|\beta> \qquad (3\text{-}4\text{-}3)$$

ここで、a, b は任意の複素数、$|\alpha>, |\beta>$ は任意の状態ベクトルである。

ところで、特定の演算子を、ある状態ベクトルに作用させると、方向が変わらず、同じ方向のベクトルとして結果がでる場合がある。

$$\hat{M}\,|\lambda> = \lambda\,|\lambda> \qquad (3\text{-}4\text{-}4)$$

ここで、$|\lambda>$ を固有ベクトル（固有状態）、λ を固有値と呼ぶ。後で述べるように、量子力学では、固有ベクトルと固有値が重要な役割を果たす。

---

[1] 数学では「**作用素**」と言う。演算子も作用素も共に”operator”の訳

[2] すでに運動量は微分演算子で書けることを示した。(2-2-13)を見よ。

[3] 3-3-2節で述べたように、量子的な状態は向きだけが意味を持つことに注意

3-4-2. ケット空間における演算子の行列表示

N次元複素ベクトル空間において、状態ベクトルは、N個の成分を持つ列ベクトルや行ベクトルで表現できた。

これに対し、演算子はN行N列の正方行列で表現することができる。

これを以下に示す。

今、N個の正規直交基底ケットベクトルの組 $\{|j>\}$の張るN次元複素ベクトル空間があったとする（ $<i|j>=\delta_{ij}$ ）。このとき、この空間の任意のベクトル$|A>$と$|B>$は

$$|A> = \sum_{j=1}^{N} \alpha_j |j>, \qquad |B> = \sum_{j=1}^{N} \beta_j |j> \qquad \text{(3-4-5)}$$

と書ける(3-2-3節の（3-10）式参照)。ここで、α_j, β_j は複素数の係数で、係数のセット $\{\alpha_j\}, \{\beta_j\}$ は$|A>$と$|B>$それぞれの成分となる（式(3-4-12)参照）。

これを、(3-4-2)式　$\hat{M}|A> = |B>$ に代入すると、

$$\hat{M}\sum_{j=1}^{N} \alpha_j |j> = \sum_{j=1}^{N} \beta_j |j>$$

$$\sum_{j=1}^{N} \hat{M}|j>\alpha_j = \sum_{j=1}^{N} \beta_j |j> \qquad \text{(3-4-6)}$$

両辺に左から基底ブラベクトル $<k|$をかけると、

$$<k|\sum_{j=1}^{N} \hat{M}|j>\alpha_j = <k|\sum_{j=1}^{N} \beta_j |j>$$

$$\sum_{j=1}^{N} <k|\hat{M}|j>\alpha_j = \sum_{j=1}^{N} \beta_j <k|j> \qquad \text{(3-4-7)}$$

(3-4-7)の右辺は $<k|j>=\delta_{kj}$ なので β_k となる。

ここで、

$$m_{kj} \equiv <k|\hat{M}|j> \qquad \text{(3-4-8)}$$

を定義する。右辺の式中の $\hat{M}|j>$ は、ある１つのケットベクトルを作るから、それと$|k>$との内積であるm_{kj} は、あるスカラー量（複素数）となる。

なお、(3-4-8)の右辺のような形は、

$$<k|\hat{M}|j> = <k|(\hat{M}|j>) = (<k|\hat{M})|j> \qquad \text{(3-4-9)}$$

のように、$<k|$と$(\hat{M}|j>)$の積と見ても良いし、$(<k|\hat{M})$と$|j>$の積と見ても良い。これは、「ブラ、ケット、演算子の間の積の結合の公理」と呼ばれることがある。

さて、m_{kj} を使って(3-4-7)を書き直すと、

$$\sum_{j=1}^{N} m_{kj}\alpha_j = \beta_k \qquad \text{(3-4-10)}$$

となる。

この式の意味を見るために、$m_{kj} \equiv < k|\hat{M}|j >$ を、次の (3-4-11) 式に示すような配置において、N行N列の正方行列を作ってみよう（すなわち m_{kj} をk行j列成分として正方行列を作る）。

$$\hat{M} \to \begin{pmatrix} m_{11} & m_{12} & \dots & m_{1N} \\ m_{21} & m_{22} & \dots & m_{2N} \\ \vdots & & \ddots & \\ \vdots & & & \\ m_{N1} & m_{N2} & \dots & m_{NN} \end{pmatrix} \qquad \text{(3-4-11)}$$

次に、$|A>$ と $|B>$ を列ベクトルで表し、$\hat{M}|A> = |B>$ に対応する行列演算の式を書き出してみる。

$$|A> \to \begin{pmatrix} \alpha_1 \\ \alpha_2 \\ \vdots \\ \alpha_N \end{pmatrix}, \quad |B> \to \begin{pmatrix} \beta_1 \\ \beta_2 \\ \vdots \\ \beta_N \end{pmatrix} \qquad \text{(3-4-12)}$$

$$\hat{M}|A> = |B> \ \to \ \begin{pmatrix} m_{11} & m_{12} & \dots & m_{1N} \\ m_{21} & m_{22} & \dots & m_{2N} \\ \vdots & & \ddots & \\ \vdots & & & \\ m_{N1} & m_{N2} & \dots & m_{NN} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \alpha_1 \\ \alpha_2 \\ \vdots \\ \vdots \\ \alpha_N \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \beta_1 \\ \beta_2 \\ \vdots \\ \vdots \\ \beta_N \end{pmatrix} \qquad \text{(3-4-13)}$$

とかける。

次に、(3-4-13)の行列の積を実際に実行する。

$$\begin{gathered} m_{11}\alpha_1 + m_{12}\alpha_2 + \dots + m_{1N}\alpha_N = \beta_1 \\ m_{21}\alpha_1 + m_{22}\alpha_2 + \dots + m_{2N}\alpha_N = \beta_2 \\ \vdots \\ m_{k1}\alpha_1 + m_{k2}\alpha_2 + \dots + m_{kN}\alpha_N = \beta_k \\ \vdots \\ m_{N1}\alpha_1 + m_{N2}\alpha_2 + \dots + m_{NN}\alpha_N = \beta_N \end{gathered} \qquad \text{(3-4-14)}$$

式(3-4-14)を和の記号を使って書き直せば、

$$m_{k1}\alpha_1 + m_{k2}\alpha_2 + \ldots + m_{kN}\alpha_N = \sum_{j=1}^{N} m_{kj}\alpha_j = \beta_k \quad (k = 1 \ldots N) \qquad \text{(3-4-15)}$$

となるので、これは、(3-4-10)と同じである。

結局、演算子はN個の正規直交基底の組$\{|j>\}$の張るN次元複素ベクトル空間において、N行N列の正方行列で表現でき、そのk行j列目の成分 m_{kj} は(3-4-8)式、$m_{kj} = <k|\hat{M}|j>$ で書けることがわかった。

ただし、基底ベクトルの組が変わった場合、その演算子の行列成分の値は変化することに注意せよ。すなわち、演算子の行列表現は、基底ベクトルの組をどう選ぶかに依存する。

3-4-3. ブラ空間における演算子の表示（エルミート共役）

次に、ブラ空間では演算子をどう表現するか、について述べる。

今、複素数の係数 z を含むケットの関係式 $z|A> = |B>$ があったとする。この場合、対応するブラ空間での表式は、z を複素共役 z^* にして、$<A|z^* = <B|$ となる（3-2-1節参照）。

では、演算子 $\hat{M}$ がケットに作用した式 $\hat{M}|A> = |B>$ の場合、ブラ空間で対応する表式はどうなるであろうか。$<A|\hat{M} = <B|$ と書けば良さそうであるが、これは以下に示すように、一般には間違いである。

正しくは、

$$\hat{M}|A> = |B> \quad \text{（ケット空間）} \rightarrow <A|\hat{M}^\dagger = <B| \quad \text{（ブラ空間）} \qquad \text{(3-4-16)}$$

となる。ここで、$\hat{M}^\dagger$ は「エムダガー」と読み $\hat{M}$ の「エルミート共役」（Hermitian conjugate、or Hermitian adjoint）という。

$\hat{M}|A> = |B>$ を成分で書くと、$\sum_{j=1}^{N} m_{kj}\alpha_j = \beta_k \quad (k = 1 \ldots N)$ であったが、これの複素共役をとると、$\sum_{j=1}^{N} m_{kj}^* \alpha_j^* = \beta_k^* \ (k = 1 \ldots N)$ となる。この式を$<A|$と$<B|$が行ベクトルで表される事を考慮して行列の積で表現すると、

$$\left(\alpha_1^* \alpha_2^* \ldots \alpha_N^*\right) \begin{pmatrix} m_{11}^* & m_{21}^* & \ldots & m_{N1}^* \\ m_{12}^* & m_{22}^* & \ldots & m_{N2}^* \\ \vdots & & \ddots & \\ \vdots & & & \\ m_{1N}^* & m_{2N}^* & \ldots & m_{NN}^* \end{pmatrix} = \left(\beta_1^* \beta_2^* \ldots \beta_N^*\right) \qquad \text{(3-4-17)}$$

となる。これが、(3-4-16)のブラ空間の表式

$$<A|\hat{M}^\dagger = <B| \qquad \text{(3-4-18)}$$

に等しい、と置くと、

$$\hat{M}^\dagger \to \begin{pmatrix} m_{11}^* & m_{21}^* & \dots & m_{N1}^* \\ m_{12}^* & m_{22}^* & \dots & m_{N2}^* \\ \vdots & & \ddots & \\ \vdots & & & \\ m_{1N}^* & m_{2N}^* & \dots & m_{NN}^* \end{pmatrix} \qquad (3\text{-}4\text{-}19)$$

と書ける。ここで、(3-4-10)を再び示して $\hat{M}^\dagger$ と $\hat{M}$ の行列表現を比べよう。

$$\hat{M} \to \begin{pmatrix} m_{11} & m_{12} & \dots & m_{1N} \\ m_{21} & m_{22} & \dots & m_{2N} \\ \vdots & & \ddots & \\ \vdots & & & \\ m_{N1} & m_{N2} & \dots & m_{NN} \end{pmatrix} \qquad (3\text{-}4\text{-}20)$$

(3-4-19)と(3-4-20)の比較から、 $\hat{M}$ の行列に対応したブラ空間での演算子$\hat{M}^\dagger$ の行列は、次の二つの作業で作れることがわかる。

１）$\hat{M}$の行列の行と列を入れ替える（転置行列を作る）、

２）1)の行列の各成分の複素共役をとる（転置行列の複素共役をとる、$m_{kj} \to m_{jk}^*$）

こうして、エルミート共役に対応する行列は、元の行列の行と列を入れ替え、各成分の複素共役をとったもの、となる。

なお、$|A>$ 、$|B>$ を任意の状態ベクトルとするとき、お互いがエルミート共役の関係にある演算子$\hat{M}$と$\hat{M}^\dagger$の間には次の関係式が成りたつことを示せる[4]。

$$<B|\hat{M}|A> = <A|\hat{M}^\dagger|B>^* \qquad (3\text{-}4\text{-}21)$$

3-4-4. エルミート演算子

$\hat{M}$と$\hat{M}^\dagger$ が等しくなるような場合、この演算子を「エルミート演算子[5]」という。すなわち、エルミート演算子とは、エルミート共役が自分自身に等しい演算子である。

$$\hat{M} = \hat{M}^\dagger \qquad \text{（エルミート演算子）} \qquad (3\text{-}4\text{-}22)$$

エルミート演算子に対応する行列を「エルミート行列」という。エルミート行列では、

$$m_{kj} = m_{jk}^* \qquad (3\text{-}4\text{-}23)$$

となる[6]。

---

[4] 演習問題とする。

[5] Hermitian operator. 「自己共役演算子」とも言う。

[6] 実数成分しかなければ、**対称行列**となる。

後の節で示す理由から、測定可能な物理量に対応する演算子は、すべてエルミート演算子になっている。以下に示すのは、有名なPauli （パウリ）行列と呼ばれるもので、スピンの各成分の演算子の行列表現となっている[7]。これらはすべてエルミート行列になっている。

$$\hat{\sigma}_x \to \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} 、\quad \hat{\sigma}_y \to \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}、\quad \hat{\sigma}_z \to \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \qquad (3\text{-}4\text{-}24)$$

例えば、$\hat{\sigma}_y \to \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}$を見てみよう。$\hat{\sigma}_y$ のエルミート共役 $\hat{\sigma}_y^\dagger$ に対応する行列は、$\hat{\sigma}_y$ の行列の転置（行と列の入れ替え）をとって各成分の複素共役を取れば良いので、

$$\begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \xrightarrow{\text{(転置)}} \begin{pmatrix} 0 & i \\ -i & 0 \end{pmatrix} \xrightarrow{\text{(複素共役)}} \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \qquad (3\text{-}4\text{-}25)$$

最後の結果は、元の行列と一致する。したがって、$\hat{\sigma}_y = \hat{\sigma}_y^\dagger$ となるから、$\hat{\sigma}_y$はエルミート演算子である。$\hat{\sigma}_x$ と$\hat{\sigma}_z$ に対応する行列も同様にしてエルミート行列であることがすぐにわかる。

3-4-5. エルミート演算子の基本定理

以下にエルミート演算子（ここでは $\hat{M}$ とする）の基本定理を述べる。

１）エルミート演算子 $\hat{M}$ の固有値はすべて実数である

２）異なる固有値に属する[8] $\hat{M}$ の固有ベクトルは互いに直交する

３）エルミート演算子 $\hat{M}$ の固有ベクトルの組は正規直交基底を形成する（完備性）

１）２）の証明は演習とする。

複素数を許す空間において、１）の「エルミート演算子の固有値が必ず実数になる」、ということは、注目に値する。なぜなら、観測可能な物理量の観測値は実数でなければならぬからである。こうして、「観測可能な物理量(observable, 「オブザーバブル」とも言う）」に対応した演算子はエルミート演算子であることを要求するのは自然であろう[9]。

また、２）３）から、固有ベクトルはお互い「直交」するが、これは物理的には、3-3のスピンの量子状態の節で検討した「観測時の互いに排他的な状態」に対応している、とみなせるだろう。こうして、量子力学では、基底には固有ベクトルの組みを選び、任意の状態はその固有ベクトル（基底ベクトル）の組が張るベクトル空間内のベクトルであらわすことになる。

更に、任意の状態でその演算子に対応する物理量の観測を行なった場合、状態は固有ベクトルの一つに収縮し、その時の固有値が観測される、と考えると実験をうまく説明できる事が示せる。次節では、これらを量子力学の基本原理としてまとめ、スピンの実験との整合性を見る。

---

[7] これは3-5節で導く。

[8] １次独立な二つの固有状態（固有ケット）が同じ固有値をもつ場合がある。これを「**縮退**」(degeneracy) という. この場合でも、対応する固有ベクトルを互いに直交する形に選ぶことができる。（講義ではふれないが、Gram-Schmidt（グラム・シュミット）」の方法がよく知られている）。

[9] 更に完備性（「完全系」をなすとも言う）も要求する。

演習４（演算子に関する重要な性質）

N 次元複素ベクトル空間において、 $\hat{X},\hat{Y},\hat{M}$ を任意の線形演算子、$|A>$、$|B>$ を任意の状態ベクトル、$|\alpha>,|\beta>$、$|k>,|j>$ を基底ベクトルとするとき、以下の１）〜１３）の事が成り立つことを示せ。

1) $(\hat{X}\hat{Y})^{\dagger}=\hat{Y}^{\dagger}\hat{X}^{\dagger}$　(3-4-26)

2) $<k|\hat{X}\hat{Y}|j>=\sum_{\alpha=1}^{N}<k|\hat{X}|\alpha><\alpha|\hat{Y}|j>$ [10]　(3-4-27)

3) $<B|\hat{M}|A>=<A|\hat{M}^{\dagger}|B>^{*}$　(3-4-28)

4) $<A|\hat{M}^{\dagger}\hat{M}|A>\geq 0$

5) $\hat{M}$ が「複素数 α をかける演算子」のとき、 $\hat{M}^{\dagger}$ は「複素数 α^{*} をかける演算子」

6) $\hat{M}\equiv|B><A|$ ならば 、$\hat{M}^{\dagger}=|A><B|$　(3-4-29)[11]

7) 任意の $\hat{M}$ は $\hat{M}=\sum_{k=1}^{N}\sum_{j=1}^{N}|k><k|\hat{M}|j><j|$ と書ける[12]　(3-4-30)

8) 基底を $\hat{M}$ の固有ベクトルに取った場合、$\hat{M}$ に対応した行列は固有値を対角成分とする対角行列になる[13]

9) 基底を $\hat{M}$ の固有ベクトルの組$\{|\lambda_j>\}$ にとった場合、それぞれの固有値を λ_j とすると

$$\hat{M}=\sum_{j=1}^{N}\lambda_j|\lambda_j><\lambda_j| \qquad (3\text{-}4\text{-}31)$$

と書ける[14]。これを $\hat{M}$ の「**スペクトル分解**」と呼ぶときがある。

3-2-4節、(3-14)式で定義した射影演算子$\hat{\Lambda}_j=|\lambda_j><\lambda_j|$を使うと、(3-4-31)は、

$$\hat{M}=\sum_{j=1}^{N}\lambda_j\hat{\Lambda}_j \qquad (3\text{-}4\text{-}32)$$

と書くことができる。

10) $|A>$ なる状態の時、Mを測定した場合の期待値（平均値） $<\hat{M}>_A$ は

$$<\hat{M}>_A\equiv<A|\hat{M}|A> \qquad (3\text{-}4\text{-}33)$$

となることを示せ（上のスペクトル分解の表式 (3-4-31)を代入してみよ）

11）エルミート演算子の**固有値は実数**となる

12) エルミート演算子の異なる固有値に属する**固有ベクトルは互いに直交**する

13) ２つのエルミート演算子の積はエルミート演算子とは限らない

---

[10] 3-2-4節の式(3-13)を使うとすぐに証明できる。なお、この式は二つの行列の積に対応していることを確かめよ

[11] 外積が演算子とみなせることは3-2-4節で述べた

[12] これも3-2-4節の式(3-13)を使うとすぐに導ける

[13] 式(3-4-8)と式(3-4-4)を使う

[14] 式(3-4-30)を使う

3-5. 量子力学の基本原理

3-5-1. 基本原理

　　これまでのことを一般化し、以下に量子力学の基本原理をまとめる。

1) ある系における観測可能な物理量M は**エルミート演算子** $\hat{M}$ で表すことができる
2) 任意の状態$|A>$は、$\hat{M}$ の固有ベクトルの組$\{|\lambda_i>\}$を正規直交基底とするN次元複素ベクトル空間の中の状態ベクトルで表される。[15]

$$\hat{M}|\lambda_i> = \lambda_i|\lambda_i> \qquad (i = 1\ldots N) \qquad (3\text{-}5\text{-}1)$$

ここで、$|\lambda_i>$は固有値ベクトル（基底ベクトル）、固有値を λ_i （**実数**[16]）とした。また、

$$|A> = \sum_{i=1}^{N} \alpha_i|\lambda_i> \qquad (3\text{-}5\text{-}2)$$

ここで、α_i は複素数の係数（$|A>$の i 番目の成分）で、$\alpha_i = <\lambda_i|A>$.

3) 状態$|A>$においてM を観測すると、$|A>$は $\hat{M}$ の固有状態のどれか($|\lambda_i>$)に跳び移り、対応する固有値 λ_i （実数）が観測にかかる。その時の確率 $P(\lambda_i)$ は、上の式の成分α_iの絶対値の２乗となる。

すなわち、観測により、

$$|A> \;\rightarrow\; |\lambda_i> \quad \text{（固有状態のどれかに跳び移る。測定値は}\lambda_i\text{）}$$

4) このときの確率（何度も実験を繰り返した場合のλ_iが観測される割合）は、

$$P(\lambda_i) = |\alpha_i|^2 = \alpha_i^*\alpha_i = <\lambda_i|A>^* <\lambda_i|A> = <A|\lambda_i><\lambda_i|A> \qquad (3\text{-}5\text{-}3)$$

と書ける 。

　　各固有状態どうしは互いに直交しているが、これは、互いに排他的な状態であることを意味する、と考える。[17]

---

[15] エルミート演算子の性質

[16] エルミート演算子の性質

[17] 3-3節の「スピンの量子状態の表現」のところでは |u>と|d>に関して議論した。

3-5-2. 基本原理のスピンの実験への適用例

上の４つの基本原理をスピンの実験に適用してみよう。

原理１）より、スピンの各成分は観測可能な物理量なので、対応した演算子、$\hat{\sigma}_x, \hat{\sigma}_y, \hat{\sigma}_z$ はエルミート演算子である。

スピンのz成分 $\hat{\sigma}_z$ の場合について見てみよう。

３−３節のスピンの実験の議論と、上の基本原理を合わせて考えると、その固有状態は排他的であった $|u>$ と $|d>$ であり、固有値は、それぞれの測定値である ＋１と−１のはずである。すなわち、(3-5-1)より

$$\hat{\sigma}_z |u> = (+1)|u> \qquad (3\text{-}5\text{-}4)$$

$$\hat{\sigma}_z |d> = (-1)|d> \qquad (3\text{-}5\text{-}5)$$

を満たす、と考えられる。

$|u>$ と $|d>$ が固有ベクトルであれば、原理２)より、それらは２次元の複素ベクトル空間の基底ベクトルとなるので、任意のスピン状態に対応したベクトル $|A>$ は、$|u>$ と $|d>$ の線形結合で表される。

$$|A> = \alpha_u |u> + \alpha_d |d> \qquad (3\text{-}5\text{-}6)$$

この式は (3-16)式と同じである。原理３)より、σ_zを 観測すれば、固有状態である $|u>$ か $|d>$ しか出現せず、測定値は、固有値である ＋１か−１しか観測されない。それぞれが起こる確率は原理4)の式(3-5-3)より、

$$P_u = |\alpha_u|^2 = <u|A>^* <u|A> = <A|u><u|A> \qquad (3\text{-}5\text{-}7)$$

$$P_d = |\alpha_d|^2 = <d|A>^* <d|A> = <A|d><d|A> \qquad (3\text{-}5\text{-}8)$$

で決まる。これらの式は (3-19)(3-20)式と同じである。

この後の議論は、3-3節の議論と同じになる。

しかし、3-3節ではまだ明らかでなかった「基底ベクトルがどう選ばれるのか」、「観測した時の測定値がどのようにな値として決まるのか（スピンの場合だと、＋１と−１が何の値なのか）」が、基本原理によりはっきりした、といえよう。

3-5-3. スピン演算子 $\hat{\sigma}_z$ の行列表示

ここで、スピン演算子の行列表示であるPauli行列（(3-4-24) 式）の中で $\hat{\sigma}_z$ に対応する行列表示を実際に求める。$\hat{\sigma}_z$ の固有ベクトル $|u>$ と $|d>$ は２次元複素ベクトル空間における正規直交基底となれるので、$|u>$ と $|d>$ を、以下のような成分を持つ列ベクトルで表すことにする。

$$|u> \to \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad |d> \to \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \qquad (3\text{-}5\text{-}9)$$

$< u|d> = (1\ 0)\begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix} = 0$ なので、$|u>$ と $|d>$ が直交していることを満たしている[18]。

演算子の行列表示の方法については3-4-2節で詳しく述べた。
(3-4-8)と(3-4-11)をスピン演算子に適用すると、$\hat{\sigma}_z$ は２行２列の正方行列となることがわかる。すなわち、

$$\hat{\sigma}_z \to \begin{pmatrix} <u|\hat{\sigma}_z|u> & <u|\hat{\sigma}_z|d> \\ <d|\hat{\sigma}_z|u> & <d|\hat{\sigma}_z|d> \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} (\sigma_z)_{uu} & (\sigma_z)_{ud} \\ (\sigma_z)_{du} & (\sigma_z)_{dd} \end{pmatrix}、\qquad (3\text{-}5\text{-}10)$$

となる。この行列の成分は以下のようになる。[19]

$$\begin{aligned}
(\sigma_z)_{uu} &\equiv <u|\hat{\sigma}_z|u> = <u|(+1)|u> = (+1) <u|u> = +1 \\
(\sigma_z)_{ud} &\equiv <u|\hat{\sigma}_z|d> = <u|(-1)|d> = (-1) <u|d> = 0 \\
(\sigma_z)_{du} &\equiv <d|\hat{\sigma}_z|u> = <d|(+1)|u> = (+1) <d|u> = 0 \\
(\sigma_z)_{dd} &\equiv <d|\hat{\sigma}_z|d> = <d|(-1)|d> = (-1) <d|d> = -1
\end{aligned} \qquad (3\text{-}5\text{-}11)$$

なお、計算には基底ベクトルの規格直交性、

$$<u|u> = 1, <u|d> = 0, <d|u> = 0, <d|d> = 1、\qquad (3\text{-}5\text{-}12)$$

と固有値方程式(3-5-4)(3-5-5)を使った。これを(3-5-10)に代入すると、

$$\hat{\sigma}_z \to \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \qquad (3\text{-}5\text{-}13)$$

となり、Pauliの行列の $\hat{\sigma}_z$ が求まった[20]。Pauliの行列は $\hat{\sigma}_z$ の固有ベクトル $|u>$ と $|d>$ を基底ベクトルに選んでいるので、$\hat{\sigma}_z$ に対応する行列は対角行列（非対角成分が0）になっていることがわかる。[21]

[18] 同様にして、<u|u>=1, <d|d>=1も示せる。

[19] (3-4-8)と(3-4-11)式でNは２なので２行２列になる。成分の添字の1はuに、2はdに置き換えた。

[20] (3-4-24)式をみよ。σx、σy に対応する行列は3-5-5節で外積の表現から求める。

[21] σ_x, σ_yに対応する行列は対角行列になっていない。これはσ_zの固有ベクトルがσ_x, σ_yの固有状態にはなっていないからである。演習4-8) .を参照