エルミート行列とユニタリー行列の関係

クロメル@物理のかぎプロジェクト

2013-04-20

量子力学でもお馴染みの話です．エルミート行列 H ならば，ユニタリー行列 U で挟むことによって対角化し，対角行列 $\Lambda = U^\dagger H U$ とできます．では，逆にユニタリー行列 U で対角化できる行列 A は，エルミート行列しかないの？という疑問に答えるのがこの記事です．簡単の為，３次行列で話を進めます．

条件を整理する

列ベクトル $\boldsymbol{x}_1, \boldsymbol{x}_2, \boldsymbol{x}_3$ をユニタリー行列の成分とします．つまり，

$$U = \begin{pmatrix} \boldsymbol{x}_1 & \boldsymbol{x}_2 & \boldsymbol{x}_3 \end{pmatrix} \tag{1}$$

です．すると，その逆行列は，エルミート共役 (共役転置) をダガー † で表すと，

$$U^{-1} = U^\dagger = \begin{pmatrix} \boldsymbol{x}_1^\dagger \\ \boldsymbol{x}_2^\dagger \\ \boldsymbol{x}_3^\dagger \end{pmatrix} \tag{2}$$

となります．対角化された行列を次のように Λ とします．

$$\Lambda = \begin{pmatrix} \lambda_1 & & \\ & \lambda_2 & \\ & & \lambda_3 \end{pmatrix} \tag{3}$$

さあ，準備ができた

すると，正方行列の三連続積の展開 でやったように，行列を展開[*1] できます．

$$
\begin{aligned}
A &= U\Lambda U^{-1} \\
&= \lambda_1 \boldsymbol{x}_1 \boldsymbol{x}_1^\dagger + \lambda_2 \boldsymbol{x}_2 \boldsymbol{x}_2^\dagger + \lambda_3 \boldsymbol{x}_3 \boldsymbol{x}_3^\dagger \\
&= \sum_{i=1}^{3} \lambda_i \boldsymbol{x}_i \boldsymbol{x}_i^\dagger
\end{aligned} \tag{4}
$$

この $\boldsymbol{x}_i \boldsymbol{x}_i^\dagger$ はダイアド積と呼ばれる積です．具体的に

$$
\boldsymbol{x} = \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \\ \gamma \end{pmatrix} \tag{5}
$$

と置くと，$*$ を複素共役とするなら，

$$
\begin{aligned}
\boldsymbol{x}\boldsymbol{x}^\dagger &= \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \\ \gamma \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \alpha^* & \beta^* & \gamma^* \end{pmatrix} \\
&= \begin{pmatrix} |\alpha|^2 & \alpha\beta^* & \alpha\gamma^* \\ \alpha^*\beta & |\beta|^2 & \beta\gamma^* \\ \alpha^*\gamma & \beta^*\gamma & |\gamma|^2 \end{pmatrix} \\
&= (\boldsymbol{x}\boldsymbol{x}^\dagger)^\dagger
\end{aligned} \tag{6}
$$

となり，見事にこれは，エルミート行列の条件，$H = H^\dagger$ を満たすことが分かります．その和である A も当然，エルミート行列です．

つまり，ユニタリー行列で対角化できるならば，その行列 A はエルミート行列であることが分かりました．[*2]

今日はこの辺で，お疲れさまでした．

[*1] どうやらこれを，スペクトル展開と呼ぶようです．

[*2] さらに強く言うなら，エルミート行列はユニタリー行列（別の言い方では，ユニタリー行列とは複素「正規」直交行列です．）$\begin{pmatrix} \boldsymbol{x}_1 & \boldsymbol{x}_2 & \cdots & \boldsymbol{x}_n \end{pmatrix}$ ではなく，任意の複素数 ω_i を各列に掛けた複素直交行列 $\begin{pmatrix} \omega_1\boldsymbol{x}_1 & \omega_2\boldsymbol{x}_2 & \cdots & \omega_n\boldsymbol{x}_n \end{pmatrix}$（ただし，その逆行列は

$$
\begin{pmatrix} \omega_1^{-1}\boldsymbol{x}_1^\dagger \\ \omega_2^{-1}\boldsymbol{x}_2^\dagger \\ \vdots \\ \omega_n^{-1}\boldsymbol{x}_n^\dagger \end{pmatrix}
$$

）でも，以上の議論は成立します．