行列 Matrices

以下より一部抜粋

演習で学ぶ 科学のための数学 (Chemistry Primer Series)
D.S. Sivia (著), S.G. Rawlings (著), 山本 雅博 (翻訳), 加納 健司 (翻訳)
化学同人 (2018)
Foundations of Science Mathematics (OCP77)

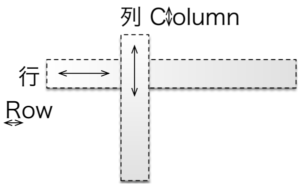
1 定義と命名法 Definition and nomenclature

行列の最も簡単な定義は，数字の長方形配列で大きな丸括弧で囲われている。M 行 N 列からなると，$M \times N$ 行列であると言われる。例えば，

$$\boldsymbol{A} = \begin{pmatrix} 2 & 5 & 3 \\ 1 & 4 & 7 \end{pmatrix} \tag{1}$$

$$\boldsymbol{A} = \begin{pmatrix} A_{11} & A_{12} & ... & A_{1N} \\ A_{21} & A_{22} & ... & A_{2N} \\ . & . & ... & . \\ . & . & ... & . \\ A_{M1} & A_{M2} & ... & A_{MN} \end{pmatrix}$$

は 2×3（訳注：２行３列）行列である。[訳注 : 左から右に横にいくのが「行」で，上から下に縦に行くのが「列」である。Row は「行」，Column は「列」である。R の文字の下の空いている部分が横なので「行」，C の文字の右の空いている部分が縦なので「列」と覚えるらしい。] 式 (1) のように行列を記号 $\boldsymbol{A}$ で書けば，その個々の「要素」は $\boldsymbol{A}$ に２つの添え字 i と j を加えて A_{ij} と書かれる。[訳注 : i 行，j 列目の要素が A_{ij} である。] 式 (1) の場合 i は１または２で，j は $j = 1, 2$ または３である。したがって，$A_{11} = 2, A_{21} = 1, A_{12} = 5$ 等々となる。　大きさ（または形）と要素の性質によって，行列は名前がつけられている。例えば,「行」行列は１行のみ ($M = 1$) で,「列」行列は１列のみ ($N = 1$) である。



もし，行と列の数が等しい時 ($M = N$)，それは「正方」行列であると言われる。正方行列が特に興味があり，この章のほとんどではそれを学ぶ。

しばしば実際に出会う行列の２つの特徴は,「実数性」と「対称性」である。前者は要素が複素数ではなく，２番目は正方行列を暗に仮定しているが，行と列は交換しても行列は同じになる。行と列をスイッチする操作は,「転置」とよばれ，行列に T の上付き文字で示す。$\boldsymbol{A}^T$ の ij 番目の要素は，$\boldsymbol{A}$ の ji 番目の要素に等しいと書くことができる。

[訳注] $\vec{a} \cdot \vec{b} = \begin{pmatrix} a_x \\ a_y \\ a_z \end{pmatrix} \begin{pmatrix} b_x & b_y & b_z \end{pmatrix} = a_x b_x + a_y b_y + a_z b_z$

$$(A^T)_{ij} = A_{ji} \tag{2}$$

$$\boldsymbol{A}^T = \begin{pmatrix} A_{11} & A_{21} & ... & A_{M1} \\ A_{12} & A_{22} & ... & A_{M2} \\ A_{13} & A_{23} & ... & A_{M3} \\ . & . & ... & . \\ . & . & ... & . \\ A_{1N} & A_{2N} & ... & A_{MN} \end{pmatrix}$$

列行列の転置は，もちろん，行行列になり，その逆も成立する。実対称行列は，それゆえ，以下の性質によって定義される。

$$\boldsymbol{A}^* = \boldsymbol{A}, \qquad \boldsymbol{A}^T = \boldsymbol{A} \tag{3}$$

ここで上付き文字 ‘*’ は，それぞれの要素を複素共役で置き換えることに対応する。ある型の行列は量子力学で中心的な働きをし,「エルミート行列」とよばれ，以下の条件を満足する。

$$\boldsymbol{A}^T = \boldsymbol{A}^* \tag{4}$$

式 (3) と式 (4) より，実対称行列はエルミート行列の特別な場合であることがわかる。

2 行列の演算 Matrix arithmetic

２つの行列 $\boldsymbol{A}$,$\boldsymbol{B}$ の和とか差は，それに対応する要素を足したり引いたりすることで計算できる。

$$\begin{pmatrix} 2 & 5 \\ 1 & 4 \\ 6 & 1 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 3 & -1 \\ 7 & 0 \\ -3 & 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 5 & 4 \\ 8 & 4 \\ 3 & 2 \end{pmatrix}$$

$$\boldsymbol{C} = \boldsymbol{A} \pm \boldsymbol{B} \quad \Longleftrightarrow \quad C_{ij} = A_{ij} \pm B_{ij} \tag{5}$$

両方の行列ともこの式が成立するためには，同じ大きさでないといけない。言い換えるなら，もし $\boldsymbol{A}$ が $M \times N$ 行列であるなら，$\boldsymbol{B}$ (そして $\boldsymbol{C}$) も $M \times N$ 行列でなくてはならない。

行列のかけ算は，足し算や引き算と比べて簡単ではない。 かけ算は以下のように定義される。$\boldsymbol{A}$ と $\boldsymbol{B}$ の積の ij 番目の要素は，$\boldsymbol{A}$ の i 番目の行と $\boldsymbol{B}$ の j 番目の列との内積でスカラーとして与えられる。厳密に書くと，

$$\begin{pmatrix} C_{11} & C_{12} & \cdots & C_{1N} \\ C_{21} & C_{22} & \cdots & \boxed{C_{2N}} \\ \cdot & \cdot & \cdots & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdots & \cdot \\ C_{M1} & C_{M2} & \cdots & C_{MN} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} A_{11} & A_{12} & \cdots & A_{1L} \\ A_{21} & A_{22} & \cdots & A_{2L} \\ \cdot & \cdot & \cdots & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdots & \cdot \\ A_{M1} & A_{M2} & \cdots & A_{ML} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} B_{11} & B_{12} & \cdots & B_{1N} \\ B_{21} & B_{22} & \cdots & B_{2N} \\ \cdot & \cdot & \cdots & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdots & \cdot \\ B_{L1} & B_{L2} & \cdots & B_{LN} \end{pmatrix}$$

$$\boldsymbol{C} = \boldsymbol{A}\boldsymbol{B} \quad \Longleftrightarrow \quad C_{ij} = \sum_k A_{ik} B_{kj} \tag{6}$$

となる。ここで，添え字 k に関する和をとるには，$\boldsymbol{A}$ の列の数が $\boldsymbol{B}$ の行の数と等しいことが必要である。[訳注： $\boldsymbol{C}$ が $M \times N$ 行列であるなら，$\boldsymbol{A}$ は $M \times L$ 行列で $\boldsymbol{B}$ は $L \times N$ 行列でなくてはならない。] 式 (6) のいくぶんかひねくれた規則の利点は後に明らかになるが，注意しておかなくてならないのは掛け算がもはや交換可能ではないことであり，すなわち，一般に

$$\begin{pmatrix} 2 & 5 \\ 1 & 4 \\ 6 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 3 & -1 \\ 7 & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 41 & -2 \\ 31 & -1 \\ 25 & -6 \end{pmatrix}$$

$$\boldsymbol{A}\boldsymbol{B} \neq \boldsymbol{B}\boldsymbol{A}$$

である。実際に，$\boldsymbol{A}\boldsymbol{B}$ はあったとしても，行と列の大きさが積をとれないという制限から $\boldsymbol{B}\boldsymbol{A}$ は存在しないということになる。[訳注： $\boldsymbol{B}\boldsymbol{A}$ が $L \times N$ 行列と $M \times L$ 行列の積になり，$N = M$ でない積はとれない。] [訳注 2つの行列とも n 次正方行列であっても，$C_{ij} = \sum_{k=1}^{n} A_{ik} B_{kj} \neq D_{ij} = \sum_{l=1}^{n} B_{il} A_{lj}$]

この交換可能性がないということは，式の両辺に行列が先にかけれるのか後からかけられるのか，順番を非常に注意しないといけない。

ちなみに，行列の積の転置は転置行列の積であるが，積の順番が逆になる。

$$(\boldsymbol{A}\boldsymbol{B})^T = \boldsymbol{B}^T \boldsymbol{A}^T \tag{7}$$

これは，式 (2) と式 (6) から得られる。[訳注 $\boldsymbol{C}^T = \boldsymbol{B}^T \boldsymbol{A}^T \quad \Longleftrightarrow \quad C_{ji} = \sum_k B_{jk} A_{ki}$]

割り算は行列の演算では許されないが，如何にこの制限が回避されるのかを簡単にみる。割り算の唯一の例外はスカラー（あるいは 1×1 行列）で割ることである。掛け算でもそうであるが特殊な場合であり，常に簡単な演算となる。

$$2 \begin{pmatrix} 3 & -1 \\ 7 & 0 \\ -3 & 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 6 & -2 \\ 14 & 0 \\ -6 & 2 \end{pmatrix}$$

$$\boldsymbol{C} = \alpha \boldsymbol{B} \quad \Longleftrightarrow \quad C_{ij} = \alpha B_{ij} \tag{8}$$

ここで行列のすべての要素は，定数 α で掛けたり，割ったりされる。

3　行列式 Determinants

行列の一般的な話を続ける前に，「行列式」という横道にちょっとそれる。行列式は，この章の残りで扱われる正方行列に関する議論をするための基本的前提条件となる。

$$\begin{vmatrix} 2 & 5 \\ 1 & 4 \end{vmatrix} = 2 \times 4 - 5 \times 1 = 3$$

1×1 行列の場合は，最も簡単で，その行列式は要素そのものである。つまり，$\det(\boldsymbol{A}) = |A_{11}| = A_{11}$ である。 より重要な場合として 2×2 行列の場合の行列式は，以下のように定義される。

$$\det \boldsymbol{A} = \begin{vmatrix} A_{11} & A_{12} \\ A_{21} & A_{22} \end{vmatrix} = A_{11} A_{22} - A_{12} A_{21} \tag{9}$$

例題 1　以下の行列式を解け

$$\begin{vmatrix} \alpha - E & \beta \\ \beta & \alpha - E \end{vmatrix} \quad = \quad 0 \tag{10}$$

$$\tag{11}$$

解答例　それぞれの行から β をくくりだし，$(\alpha - E)/\beta = x$ とおくと

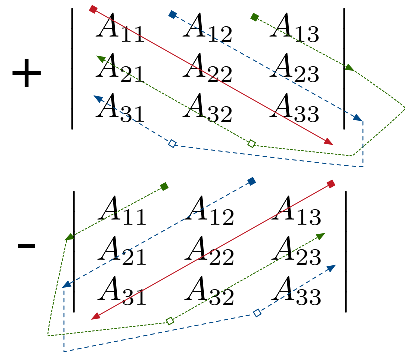
$$\beta^2 \begin{vmatrix} x & 1 \\ 1 & x \end{vmatrix} = 0 \tag{12}$$

$$x^2 - 1 = 0, x = -1, 1 \tag{13}$$

$$E_1 = \alpha + \beta, \quad E_2 = \alpha - \beta, \quad (\beta < 0) \tag{14}$$

これは，エチレンの π 電子に対するヒュッケル近似での固有値に対応する。

3 次の行列式にはサラスの方法が用いられる。右図にあるように，プラスとマイナスがつく項にわかれ，



$$\det \boldsymbol{A} = \begin{vmatrix} A_{11} & A_{12} & A_{13} \\ A_{21} & A_{22} & A_{23} \\ A_{31} & A_{32} & A_{33} \end{vmatrix} \tag{15}$$

$$\begin{aligned} &= A_{11}A_{22}A_{33} + A_{12}A_{23}A_{31} + A_{13}A_{32}A_{21} \\ &\quad - A_{13}A_{22}A_{31} - A_{12}A_{21}A_{33} - A_{11}A_{32}A_{23} \end{aligned} \tag{16}$$

例題 2　以下の行列式を解け

$$\begin{vmatrix} \alpha - E & \beta & 0 \\ \beta & \alpha - E & \beta \\ 0 & \beta & \alpha - E \end{vmatrix} = 0 \tag{17}$$

$$\tag{18}$$

解答例　それぞれの行から β をくくりだし，$(\alpha - E)/\beta = x$ とおくと

$$\beta^3 \begin{vmatrix} x & 1 & 0 \\ 1 & x & 0 \\ 0 & 1 & x \end{vmatrix} = 0 \tag{19}$$

$$x^3 - x = 0, x(x^2 - 2) = 0, x = 0, \pm\sqrt{2} \tag{20}$$

$$E_1 = \alpha + \sqrt{2}\beta, \quad E_2 = \alpha, \quad E_3 = \alpha - \sqrt{2}\beta, \quad (\beta < 0) \tag{21}$$

これは，プロピレンの π 電子に対するヒュッケル近似での固有値に対応する。

例題 3　以下の行列式を解け

$$\begin{vmatrix} \alpha - E & \beta & \beta \\ \beta & \alpha - E & \beta \\ \beta & \beta & \alpha - E \end{vmatrix} = 0 \tag{22}$$

解答例　それぞれの行から β をくくりだし，$(\alpha - E)/\beta = x$ とおくと

$$\beta^3 \begin{vmatrix} x & 1 & 1 \\ 1 & x & 1 \\ 1 & 1 & x \end{vmatrix} = 0 \tag{23}$$

$$x^3 + 2 - 3x = 0, (-2)^3 + 2 - 3(-2) = 0, 1^3 + 2 - 3 = 0 \tag{24}$$

$$(x+2)(x-1)^2 = 0, x = -2, 1, 1 \tag{25}$$

$$E_1 = \alpha + 2\beta, \quad E_{2,3} = \alpha - \beta \tag{26}$$

となる。これは，シクロプロピレンの π 電子に対するヒュッケル近似での固有値に対応する。

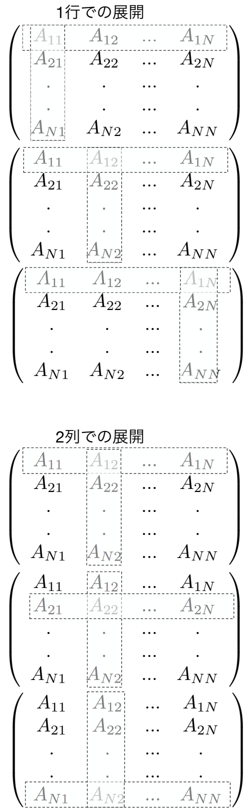
$$\begin{vmatrix} + & - & + & \cdots & \cdots \\ - & + & - & \cdots & \cdots \\ + & - & + & \cdots & \cdots \\ . & . & . & \cdots & \cdots \\ . & . & . & \cdots & + \end{vmatrix}$$

さらに高次の行列においてその行列式の展開式は非常にややこしくなるが，簡単な規則でより低次の行列式といつも関連づけられる。ある行および列に対応する「**余因子**」の積によって行列式は与えられる。

行列要素の A_{ij} の**余因子**は，i 番目の行と j 番目の列を除いた行列式に $(-1)^{i+j}$ を掛けたものであり，-1 の何乗になるのかは，$+1$ と -1 が右の図のように碁盤目

のようになっている。i 番目の行と j 番目の列を除いた行列式は「**小行列式**」と知られており，もとの行列式より 1 行 1 列小さい大きさをもつ。

n 次正方行列 $\boldsymbol{A} = (A_{ij})$ の第 (i, j) 余因子を $\tilde{A}_{ij}$ で表すと，$\det\boldsymbol{A} = |\boldsymbol{A}| = \sum_{j=1}^{n} A_{ij}\tilde{A}_{ij} = \sum_{i=1}^{n} A_{ij}\tilde{A}_{ij}$ となる。最初の和の式は，i 番目の行 $(i = 1, 2, 3, ..., n)$ のどれでもいい) での展開を示し，，2 番目の式は j 番目の列 $(j = 1, 2, 3, ..., n)$ のどれでもいい) での展開となる。右図にその展開の例を示す。また，$\boldsymbol{A}$ の第 (i, j) 小行列式を Δ_{ij} とすると，$\tilde{A}_{ij} = (-1)^{i+j}\Delta_{ij}$ である。ある行および列にゼロの要素が多いとその展開は少数の項のみとなるので容易になる。



例えば，3×3 の行列式は 3 つの 2×2 の行列式の展開で書かれる。

$$\begin{vmatrix} A_{11} & A_{12} & A_{13} \\ A_{21} & A_{22} & A_{23} \\ A_{31} & A_{32} & A_{33} \end{vmatrix} = A_{11}\begin{vmatrix} A_{22} & A_{23} \\ A_{32} & A_{33} \end{vmatrix} - A_{12}\begin{vmatrix} A_{21} & A_{23} \\ A_{31} & A_{33} \end{vmatrix} + A_{13}\begin{vmatrix} A_{21} & A_{22} \\ A_{31} & A_{32} \end{vmatrix}$$

ここで，展開は第 1 行に関して行った。もっとも，

2×2 の行列の行列式は 2 つの 1×1 行列式で書かれる。この結果は，上で述べたサラスの式 (11) と一致する。

4×4 の行列式も導いておこう。第 2 列で展開しよう。

$$\begin{vmatrix} A_{11} & A_{12} & A_{13} & A_{14} \\ A_{21} & A_{22} & A_{23} & A_{24} \\ A_{31} & A_{32} & A_{33} & A_{34} \\ A_{41} & A_{42} & A_{43} & A_{44} \end{vmatrix} = -A_{12}\begin{vmatrix} A_{21} & A_{23} & A_{24} \\ A_{31} & A_{33} & A_{34} \\ A_{41} & A_{43} & A_{44} \end{vmatrix} + A_{22}\begin{vmatrix} A_{11} & A_{13} & A_{14} \\ A_{31} & A_{33} & A_{34} \\ A_{41} & A_{43} & A_{44} \end{vmatrix}$$

$$-A_{32}\begin{vmatrix} A_{11} & A_{13} & A_{14} \\ A_{21} & A_{23} & A_{24} \\ A_{41} & A_{43} & A_{44} \end{vmatrix} + A_{42}\begin{vmatrix} A_{11} & A_{13} & A_{14} \\ A_{21} & A_{23} & A_{24} \\ A_{31} & A_{33} & A_{34} \end{vmatrix}$$

となる。3×3 にはサラスの式を使えば求めることができる。

例題 4　以下の行列式を求めよ。

$$\begin{vmatrix} 1 & 0 & 2 \\ 3 & -1 & 5 \\ 4 & 3 & 7 \end{vmatrix} = 1\begin{vmatrix} -1 & 5 \\ 3 & 7 \end{vmatrix} + 0 + 2\begin{vmatrix} 3 & -1 \\ 4 & 3 \end{vmatrix} = -7 - 15 + 2(9 + 4) = 4$$

となる。サラスの式では，$-7 + 0 + 18 - (-8 + 0 + 15) = 4$ となる。

例題 5 以下の行列式を解き ϵ の値を求めよ。

$$\begin{vmatrix} -\epsilon & 0 & -3eEa_0 & 0 \\ 0 & -\epsilon & 0 & 0 \\ -3eEa_0 & 0 & -\epsilon & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -\epsilon \end{vmatrix} = 0 \tag{27}$$

解答例 4 列で展開すると

$$-\epsilon\begin{vmatrix} -\epsilon & 0 & -3eEa_0 \\ 0 & -\epsilon & 0 \\ -3eEa_0 & 0 & -\epsilon \end{vmatrix} = 0 \tag{28}$$

$$-\epsilon[-\epsilon^3 + (3eEa_0)^2\epsilon] = \epsilon^2[\epsilon^2 - (3eEa_0)^2] = 0 \tag{29}$$

$$\epsilon_1 = -3eEa_0, \quad \epsilon_{2,3} = 0, \quad \epsilon_4 = +3eEa_0 \tag{30}$$

これは，水素原子に電場 E を z 方向にかけた時に，4 重に縮退した $n = 2$ エネルギー準位および波動関数はどのように変化するのか摂動論を使って求める時に用いる。

例題 6　以下の行列式を解き固有値 E を求めよ。

$$\begin{vmatrix} \alpha - E & \beta & 0 & 0 \\ \beta & \alpha - E & \beta & 0 \\ 0 & \beta & \alpha - E & \beta \\ 0 & 0 & \beta & \alpha - E \end{vmatrix} = 0 \tag{31}$$

解答例 それぞれの行から β をくくりだし，$(\alpha-E)/\beta=x$ とおくと

$$
\begin{aligned}
\beta^4\begin{vmatrix} x & 1 & 0 & 0 \\ 1 & x & 1 & 0 \\ 0 & 1 & x & 1 \\ 0 & 0 & 1 & x \end{vmatrix} &= 0 \\
x\begin{vmatrix} x & 1 & 0 \\ 1 & x & 1 \\ 0 & 1 & x \end{vmatrix} &- \begin{vmatrix} 1 & 1 & 0 \\ 0 & x & 1 \\ 0 & 1 & x \end{vmatrix} = x(x^3-2x)-(x^2-1)=x^4-3x^2+1=0 \\
X &= x^2, X^2-3X+1=0, X=\frac{3\pm\sqrt{5}}{2}>0 \\
x=\pm\sqrt{\frac{3\pm\sqrt{5}}{2}} &= \pm\sqrt{\frac{6\pm2\sqrt{5}}{4}}=\pm\frac{\sqrt{(1\pm\sqrt{5})^2}}{2}=\pm\frac{1\pm\sqrt{5}}{2}=\pm1.618,\pm0.618 \\
E_1 &= \alpha+\frac{1+\sqrt{5}}{2}\beta, E_2=\alpha-\frac{1-\sqrt{5}}{2}\beta, E_3=\alpha+\frac{1-\sqrt{5}}{2}\beta, E_4=\alpha-\frac{1+\sqrt{5}}{2}\beta
\end{aligned}
\tag{32}
$$

これは，1,3-ブタジエンの π 電子に対するヒュッケル近似での固有値に対応する。

例題 7　以下の行列式を解き固有値 E を求めよ。

$$
\begin{vmatrix} \alpha-E & \beta & 0 & \beta \\ \beta & \alpha-E & \beta & 0 \\ 0 & \beta & \alpha-E & \beta \\ \beta & 0 & \beta & \alpha-E \end{vmatrix} = 0 \tag{33}
$$

解答例 それぞれの行から β をくくりだし，$(\alpha-E)/\beta=x$ とおくと

$$
\beta^4\begin{vmatrix} x & 1 & 0 & 1 \\ 1 & x & 1 & 0 \\ 0 & 1 & x & 1 \\ 1 & 0 & 1 & x \end{vmatrix} = 0 \tag{34}
$$

$$
\begin{aligned}
x\begin{vmatrix} x & 1 & 0 \\ 1 & x & 1 \\ 0 & 1 & x \end{vmatrix} - \begin{vmatrix} 1 & 1 & 0 \\ 0 & x & 1 \\ 1 & 1 & x \end{vmatrix} &- \begin{vmatrix} 1 & x & 1 \\ 0 & 1 & x \\ 1 & 0 & 1 \end{vmatrix} \\
=x(x^3-2x)-(x^2+1-1)-(1+x^2-1)=x^4-4x^2 &= x^2(x+2)(x-2)=0, x=0,0,\pm2 \\
E_1 &= \alpha+2\beta,\quad E_{2,3}=\alpha,\quad E_4=\alpha-2\beta
\end{aligned}
\tag{35}
$$

これは，シクロブタジエンの π 電子に対するヒュッケル近似での固有値に対応する。

例題 8　以下の行列式を解き固有値 E を求めよ。

$$
\begin{vmatrix} \alpha-E & \beta & 0 & 0 & 0 & \beta \\ \beta & \alpha-E & \beta & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \beta & \alpha-E & \beta & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \beta & \alpha-E & \beta & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \beta & \alpha-E & \beta \\ \beta & 0 & 0 & 0 & \beta & \alpha-E \end{vmatrix} = 0 \tag{36}
$$

解答例 それぞれの行から β をくくりだし，$(\alpha - E)/\beta = x$ とおくと

$$\beta^6 \begin{vmatrix} x & 1 & 0 & 0 & 0 & 1 \\ 1 & x & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & x & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & x & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & x & 1 \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 1 & x \end{vmatrix} = 0$$

$$x \begin{vmatrix} x & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & x & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & x & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & x & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & x \end{vmatrix} - \begin{vmatrix} 1 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & x & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & x & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & x & 1 \\ 1 & 0 & 0 & 1 & x \end{vmatrix} - \begin{vmatrix} 1 & x & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & x & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & x & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & x \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{vmatrix}$$

$$= x^2 \begin{vmatrix} x & 1 & 0 & 0 \\ 1 & x & 1 & 0 \\ 0 & 1 & x & 1 \\ 0 & 0 & 1 & x \end{vmatrix} - x \begin{vmatrix} 1 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & x & 1 & 0 \\ 0 & 1 & x & 1 \\ 0 & 0 & 1 & x \end{vmatrix} - \begin{vmatrix} x & 1 & 0 & 0 \\ 1 & x & 1 & 0 \\ 0 & 1 & x & 1 \\ 0 & 0 & 1 & x \end{vmatrix} + \begin{vmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & x & 1 & 0 \\ 0 & 1 & x & 1 \\ 1 & 0 & 1 & x \end{vmatrix}$$

$$- \begin{vmatrix} 1 & x & 1 & 0 \\ 0 & 1 & x & 1 \\ 0 & 0 & 1 & x \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{vmatrix} - \begin{vmatrix} x & 1 & 0 & 0 \\ 1 & x & 1 & 0 \\ 0 & 1 & x & 1 \\ 0 & 0 & 1 & x \end{vmatrix}$$

$$= x^3 \begin{vmatrix} x & 1 & 0 \\ 1 & x & 1 \\ 0 & 1 & x \end{vmatrix} - x^2 \begin{vmatrix} 1 & 1 & 0 \\ 0 & x & 1 \\ 0 & 1 & x \end{vmatrix} - x \begin{vmatrix} x & 1 & 0 \\ 1 & x & 1 \\ 0 & 1 & x \end{vmatrix}$$

$$-x \begin{vmatrix} x & 1 & 0 \\ 1 & x & 1 \\ 0 & 1 & x \end{vmatrix} + \begin{vmatrix} 1 & 1 & 0 \\ 0 & x & 1 \\ 0 & 1 & x \end{vmatrix} - \begin{vmatrix} 1 & 0 & 0 \\ x & 1 & 0 \\ 1 & x & 1 \end{vmatrix}$$

$$- \begin{vmatrix} 1 & x & 1 \\ 0 & 1 & x \\ 0 & 0 & 1 \end{vmatrix} - x \begin{vmatrix} x & 1 & 0 \\ 1 & x & 1 \\ 0 & 1 & x \end{vmatrix} + \begin{vmatrix} 1 & 1 & 0 \\ 0 & x & 1 \\ 0 & 1 & x \end{vmatrix}$$

$$= x^6 - 3x^4 + x^2 - x^4 + 2x^2$$

$$-x^4 + 3x^2 - 1 - 1$$

$$-x^4 + 2x^2 + x^2 - 2$$

$$0 = x^6 - 6x^4 + 9x^2 - 4, 0 = (x+1)^2(x-1)^2(x+2)(x-2)$$

$$x = \pm 1, \pm 1, \pm 2 \tag{37}$$

$$E_1 = \alpha + 2\beta, E_{2,3} = \alpha + \beta, E_{4,5} = \alpha - \beta, E_6 = \alpha - 2\beta \tag{38}$$

これは，ベンゼンの π 電子に対するヒュッケル近似での固有値に対応する。

行列式はいくつかの一般的な特徴があり，いくつかは計算を楽にするという意味で「使える」。証明は行わないが，読者自らが 2×2 行列で以下の法則が正しいのかどうかチェックしてほしい。(i) 行と列を交換しても行列式は変わらない; (ii) 行または列に定数 k をかけると，行列式も k 倍になる; (iii) ある行（または列）がすべてゼロの場合，行列式もゼロになる ; (iv) ある行（または列）が他の行（または列）にある数を掛けたものになっている場合，行列式はゼロとなる; (v) 2 つの行 (または列）を交換するとその行列式は -1 をかけたものになる; (vi) ある行（または列）の何倍かを他の行（または列）に加えても行列式は変わらない; (vii) 行列の積の行列式は，それぞれの行列式の積である。

$\det(\boldsymbol{A}^T) = \det(\boldsymbol{A})$

$\det(\boldsymbol{AB}) = \det(\boldsymbol{A}) \det(\boldsymbol{B})$

ちなみに，行列式に対する余因子規則は，ベクトル積の公式を思い出させるのにいい方法である。

$$\vec{a} \times \vec{b} = \begin{vmatrix} \vec{i} & \vec{j} & \vec{k} \\ a_x & a_y & a_z \\ b_x & b_y & b_z \end{vmatrix} \tag{39}$$

$$(\vec{a} \times \vec{b}) \cdot \vec{c} = \begin{vmatrix} c_x & c_y & c_z \\ a_x & a_y & a_z \\ b_x & b_y & b_z \end{vmatrix}$$

さらには，スカラー三重積も, 第 1 行を 3 番目のベクトル $\vec{c}$ の成分で置き換えれば容易に得られる。このようにして，3×3 行列の行列式が平行六面体の体積を示す。事実，行（または列）が平行 6 面体の辺のベクトルとすれば発生した物体の体積を行列式の大きさが与えるというのは，行列式の一般的な物理的解釈である。行列式の大きさは，1×1 行列の場合は長さになり，2×2 行列の場合は面積になる。

4　逆行列 Inverse matrices

$$\boldsymbol{I} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & ... & 0 \\ 0 & 1 & ... & 0 \\ . & . & ... & . \\ 0 & 0 & ... & 1 \end{pmatrix}$$

冒頭で，行列の割り算は許されてないと述べた。しかしながら，正方行列にはこの演算に似たようなものがある。逆行列によるかけ算である。これは，以下のような性質を持つ。

$$\boldsymbol{A}^{-1}\boldsymbol{A} = \boldsymbol{A}\boldsymbol{A}^{-1} = \boldsymbol{I} \tag{40}$$

ここで $\boldsymbol{I}$ は 1 に等価な行列で対角項は 1 それ以外はゼロであり，「単位行列」とよばれる。何かに $\boldsymbol{I}$ を (許されるなら) 掛けると，その何か自身に戻る。

逆行列のより系統的な定義は以下のように与えられる。

$$\boldsymbol{A}^{-1} = \frac{\mathrm{adj}(\boldsymbol{A})}{\det(\boldsymbol{A})} \tag{41}$$

$$\mathrm{adj}(\boldsymbol{A}) = \begin{pmatrix} \tilde{A}_{11} & \tilde{A}_{21} & ... & \tilde{A}_{n1} \\ \tilde{A}_{12} & \tilde{A}_{22} & ... & \tilde{A}_{n2} \\ . & . & ... & . \\ . & . & ... & . \\ \tilde{A}_{1n} & \tilde{A}_{2n} & ... & \tilde{A}_{nn} \end{pmatrix}$$

$[\mathrm{adj}(\boldsymbol{A})]_{ij} = (\tilde{\boldsymbol{A}}^T)_{ij} = \tilde{A}_{ji} = (-1)^{j+i}\Delta_{ji}$

ここで，$\mathrm{adj}(\boldsymbol{A})$ は $\boldsymbol{A}$ の「余因子行列（随伴行列）」とよばれ，$\boldsymbol{A}$ の要素を転置した $\boldsymbol{A}^T$ とその余因子からなる。[訳注： 余因子行列は i と j がひっくりかえっていることに注意！]

もし行列式 $\det(\boldsymbol{A})$ がゼロであれば $\boldsymbol{A}$ の逆行列 $\boldsymbol{A}^{-1}$ が存在しないということを示す。そのような行列は「特異行列」であるといわれる。

5　連立 1 次方程式 Linear simultaneous equations

$$\begin{pmatrix} 5 & 3 \\ 2 & 1 \end{pmatrix}^{-1} = \frac{1}{5-6}\begin{pmatrix} 1 & -3 \\ -2 & 5 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -1 & 3 \\ 2 & -5 \end{pmatrix}$$

解くのに最も簡単なのは線形の連立方程式であるが，これらは以下の一般の形で示すことができる。

$$\boldsymbol{A}\vec{X} = \vec{B} \tag{42}$$

ここで $\boldsymbol{A}$ は行列で，$\vec{X}$ と $\vec{B}$ はベクトル（あるいは列行列）であり，$\boldsymbol{A}$ と $\vec{B}$ の要素は既知で，$\vec{X}$ の要素がこの式を満たすと考える。例えば，以下のように書かれる。

$$\begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix}\begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix}$$

ここで，$a, b, c, d, \alpha,$ および β は定数である。

この式の解は，逆行列 $\boldsymbol{A}^{-1}$ を前から掛けることによって得られる。

$$\boldsymbol{A}^{-1}\boldsymbol{A}\vec{X} = \boldsymbol{A}^{-1}\vec{B} \quad\Longrightarrow\quad \boldsymbol{I}\vec{X} = \vec{X} = \boldsymbol{A}^{-1}\vec{B} \tag{43}$$

逆行列を求めることは，少々骨がおれるが，実際にこの式を使って $\vec{X}$ を求めるのが簡単である。

ここで，以下のことを暗に仮定した。つまり，(i) 行列 $\boldsymbol{A}$ は正方であること，そして (ii) $\det(\boldsymbol{A}) \neq 0$ である。最初のは未知数と同じ数だけの連立方程式が必要であるということ，そして 2 番目のは「線形独立」であることを意味している。それはすなわち他の式の組み合わせでは方程式を表せないことであり，それで表われるよりも少ない方程式の数になる。もし，$\boldsymbol{A}$ が特異行列であれば，解は唯一でなくなるか解は全くないことになる。幾何学的には，2×2 行列の場合は直線の交点を探すことになる。もし線が平行であれば，ひとつの点で交差することはなく，お互いが同一線上にあれば線のどの部分もが解になる，そうでなければ，連立方程式の条件は満たされない。

$$\begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix}^{-1}\begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix} = \frac{1}{\Delta}\begin{pmatrix} d & -b \\ -c & a \end{pmatrix}\begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix}$$

for $\Delta = ad - bc \neq 0$

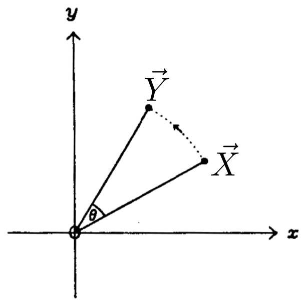
6　変換 Transformations

行列が（必ずしも正方行列である必要はない）ベクトルに作用すると，新しい列行列（ベクトル）を生む。

$$\boldsymbol{A}\vec{X} = \vec{Y} \tag{44}$$

入力の $\vec{X}$ から出力の $\vec{Y}$ への変化は「写像」あるいは「変換」とよばれ，行列 $\boldsymbol{A}$ はしばしば「演算子」と言われる。例えば，二次元のベクトルに前から以下の行列を掛けられると

$$\boldsymbol{A} = \begin{pmatrix} \cos\theta & -\sin\theta \\ \sin\theta & \cos\theta \end{pmatrix} \tag{45}$$



ベクトルは反時計方向に角度 θ 回転する。すべての 2×2 行列では，変換の性質は，(0, 0), (0,1), (1,0) および (1,1) がどこに変換されるのかでわかる。もし $\boldsymbol{A}$ が正方行列で，特異行列でなければ，逆変換は，逆行列 $\boldsymbol{A}^{-1}$ を $\vec{Y}$ に作用させれば得られる。

7　固有値と固有ベクトル Eigenvalues and eigenvectors

連立方程式には特別な場合があり，それは固有値方程式とよばれており，物理的に非常に重要である。それは，$\vec{X}$ が自分自身に長さ λ 倍だけかけて変換される時に起こる。

$$\boldsymbol{A}\vec{X} = \lambda\vec{X} \tag{46}$$

λ の値と $\vec{X}$ は，$\boldsymbol{A}$ の「固有値」と「固有ベクトル」とそれぞれよばれる。

ここで行列 $\boldsymbol{A}$ は暗に正方であることになっており，以下のようになる。

$$(\boldsymbol{A} - \lambda\boldsymbol{I})\vec{X} = 0 \tag{47}$$

ここで，$\boldsymbol{I}\vec{X} = \vec{X}$ を使い，単位行列は $\boldsymbol{A}$ と同じサイズである。両辺に前から $(\boldsymbol{A} - \lambda\boldsymbol{I})$ の逆行列を掛けると $\vec{X} = 0$ という結論になる。これは避ける唯一の方法は,

$$\det(\boldsymbol{A} - \lambda\boldsymbol{I}) = 0 \tag{48}$$

となることであり，$(\boldsymbol{A} - \lambda\boldsymbol{I})^{-1}$ は存在しないことになる。そうすれば，自明な解 $\vec{X} = 0$ を無理矢理受け入れる必要はなくなる。

これが固有値方程式を解く時の第一段階である。$\boldsymbol{A}$ の対角成分から λ を引き算し，その行列の行列式をゼロとする。$N\times N$ 行列の場合は，λ の N 次多項式 (特性方程式と呼ばれる) の根を見つける問題になる。したがって, N 個の固有値 $(\lambda_1, \lambda_2, \lambda_3, ..., \lambda_N)$ があり, その後それに対応する固有ベクトル $(\vec{X}_1, \vec{X}_2, \vec{X}_3, ..., \vec{X}_N)$ を見つけなくてはならない。

$$\begin{vmatrix} 4-\lambda & 1 \\ 2 & 3-\lambda \end{vmatrix} = 0$$
$$\Rightarrow \lambda^2 - 7\lambda + 10 = 0$$
$$\Rightarrow \lambda = 2 \text{ or } \lambda = 5$$

固有ベクトルを見つける最も良い方法は，λ をひとつづつ，固有値方程式に入れていくことである。$\vec{X}$ のひとつの成分を t のようなパラメータに等しくし，他も t で表す。未知の変数 (t) があるということは，単に $\vec{X}$ に対する解が唯一の点ではないことを示している。要素間の関係は固定されているが，ある決められた方向を持つということを確かめることができる。慣例によると，個々の固有ベクトルは t のある値を使って長さが 1 になるように「**規格化**」される。

When $\lambda = 2$,
$2x + y = 0$
$\Rightarrow \vec{X} = t\begin{pmatrix} 1 \\ -2 \end{pmatrix}$

物理的に興味ある問題を扱うときには，対象の行列は実数で対称またはエルミートである傾向を持ち，これらの行列は，便利な固有値特性を持つことが示される。すなわち，すべての固有値は実数で, 固有ベクトルはお互いに直交する。

When $\lambda = 5$,
$-x + y = 0$
$\Rightarrow \vec{X} = t\begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}$

$$\lambda_i = \lambda_i^*, \qquad \vec{X}_i^T\vec{X}_j = \vec{X}_i \cdot \vec{X}_j = 0 \quad \text{if } i \neq j \tag{49}$$

ここで，添え字は異なる解を示している。さらには，固有値の積は $\det(\boldsymbol{A})$ に等し

$\det(\boldsymbol{A}) = \lambda_1\lambda_2\lambda_3...\lambda_N$
$\text{trace}(\boldsymbol{A}) = \lambda_1 + \lambda_2 + \lambda_3 + ... + \lambda_N$

くなり，固有の和は $\boldsymbol{A}$ の対角成分の和（対角和またはトレース）で与えられる。

例題 9 例題 1 で，固有値 E_1, E_2 に対応する規格化された固有ベクトル $\vec{X}_1, \vec{X}_2$ を求めよ。

$$\begin{pmatrix} \alpha-(\alpha+\beta) & \beta \\ \beta & \alpha-(\alpha+\beta) \end{pmatrix}\begin{pmatrix} x_1 \\ y_1 \end{pmatrix}=0$$

$$-\beta x_1+\beta y_1=0, \beta x_1-\beta y_1=0, x_1=y_1, x_1^2+y_1^2=1, x_1=y_1=\frac{1}{\sqrt{2}}$$

$$\begin{pmatrix} \alpha-(\alpha-\beta) & \beta \\ \beta & \alpha-(\alpha-\beta) \end{pmatrix}\begin{pmatrix} x_2 \\ y_2 \end{pmatrix}=0$$

$$x_2+y_2=0, x_2=-y_2, x_2^2+y_2^2=1, x_2=\frac{1}{\sqrt{2}}, y_2=-\frac{1}{\sqrt{2}}$$

$$\vec{X}_1=\begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} \\ \frac{1}{\sqrt{2}} \end{pmatrix}, \quad \vec{X}_2=\begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} \\ -\frac{1}{\sqrt{2}} \end{pmatrix} \qquad (50)$$

これは，エチレンの π 電子に対するヒュッケル近似での固有状態に対応する。

例題 10 例題 2 で，固有値 E_1, E_2, E_3 に対応する規格化された固有ベクトル $\vec{X}_1, \vec{X}_2, \vec{X}_3$ を求めよ。

$$\begin{pmatrix} \alpha-(\alpha+\sqrt{2}\beta) & \beta & 0 \\ \beta & \alpha-(\alpha+\sqrt{2}\beta) & \beta \\ 0 & \beta & \alpha-(\alpha+\sqrt{2}\beta) \end{pmatrix}\begin{pmatrix} x_1 \\ y_1 \\ z_1 \end{pmatrix}=0$$

$$-\sqrt{2}x_1+y_1=0, x_1-\sqrt{2}y_1+z_1=0, y_1-\sqrt{2}z_1=0,$$

$$x_1^2+y_1^2+z_1^2=1, x_1=z_1=\frac{1}{2}, y_1=\frac{\sqrt{2}}{2}$$

$$\begin{pmatrix} \alpha-\alpha & \beta & 0 \\ \beta & \alpha-\alpha & \beta \\ 0 & \beta & \alpha-\alpha \end{pmatrix}\begin{pmatrix} x_2 \\ y_2 \\ z_2 \end{pmatrix}=0$$

$$y_2=0, x_2+z_2=0, y_2=0, x_2^2+y_2^2+z_2^2=1,$$

$$x_2=\frac{1}{\sqrt{2}}, y_2=0, z_2=-\frac{1}{\sqrt{2}}$$

$$\begin{pmatrix} \alpha-(\alpha-\sqrt{2}\beta) & \beta & 0 \\ \beta & \alpha-(\alpha-\sqrt{2}\beta) & \beta \\ 0 & \beta & \alpha-(\alpha-\sqrt{2}\beta) \end{pmatrix}\begin{pmatrix} x_3 \\ y_3 \\ z_3 \end{pmatrix}=0$$

$$\sqrt{2}x_3+y_3=0, x_3+\sqrt{2}y_3+z_3=0, y_3+\sqrt{2}z_3=0, x_3^2+y_3^2+z_3^2=1, x_3=z_3=\frac{1}{2}, y_3=-\frac{\sqrt{2}}{2}$$

$$\vec{X}_1=\begin{pmatrix} 1/2 \\ \sqrt{2}/2 \\ 1/2 \end{pmatrix}, \quad \vec{X}_2=\begin{pmatrix} 1/\sqrt{2} \\ 0 \\ -1/\sqrt{2} \end{pmatrix} \vec{X}_3=\begin{pmatrix} 1/2 \\ -\sqrt{2}/2 \\ 1/2 \end{pmatrix} \qquad (51)$$

これは，プロピレンの π 電子に対するヒュッケル近似での固有状態に対応する。

例題 11 例題 3 で，固有値 E_1, E_2, E_3 に対応する規格化された固有ベクトル $\vec{X}_1, \vec{X}_2, \vec{X}_3$ を求めよ。

$$\begin{pmatrix} \alpha-(\alpha+2\beta) & \beta & \beta \\ \beta & \alpha-(\alpha+2\beta) & \beta \\ \beta & \beta & \alpha-(\alpha+2\beta) \end{pmatrix}\begin{pmatrix} x_1 \\ y_1 \\ z_1 \end{pmatrix}=0$$

$$-2x_1+y_1+z_1=0, x_1-2y_1+z_1=0, x_1+y_1-2z_1=0,$$

$$x_1^2+y_1^2+z_1^2=1, x_1=y_1=z_1=\frac{1}{\sqrt{3}}$$

$$\begin{pmatrix} \alpha-(\alpha-\beta) & \beta & \beta \\ \beta & \alpha-(\alpha-\beta) & \beta \\ \beta & \beta & \alpha-(\alpha-\beta) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_2 \\ y_2 \\ z_2 \end{pmatrix} = 0$$

$$x_2+y_2+z_2=0, x_2^2+y_2^2+z_2^2=1,$$

$$x_2=\frac{1}{\sqrt{2}}, y_2=0, z_2=-\frac{1}{\sqrt{2}}$$

$$x_3+y_3+z_3=0, x_3^2+y_3^2+z_3^2=1,$$

$$x_3=\frac{1}{\sqrt{6}}, y_2=-\frac{2}{\sqrt{6}}, z_3=\frac{1}{\sqrt{6}}$$

$$\vec{X}_1=\begin{pmatrix} 1/\sqrt{3} \\ 1/\sqrt{3} \\ 1/\sqrt{3} \end{pmatrix}, \quad \vec{X}_2=\begin{pmatrix} 1/\sqrt{2} \\ 0 \\ -1/\sqrt{2} \end{pmatrix}, \quad \vec{X}_3=\begin{pmatrix} 1/\sqrt{6} \\ -2/\sqrt{6} \\ 1/\sqrt{6} \end{pmatrix} \tag{52}$$

$\vec{X}_2, \vec{X}_3$ については，その取り方に任意性があったが，$\vec{X}_1, \vec{X}_2, \vec{X}_3$ がお互いに直交するようにした。

これは，シクロプロピレンの π 電子に対するヒュッケル近似での固有状態に対応する。

例題 12 例題 5 で，固有値 $\epsilon_1, \epsilon_2, \epsilon_3, \epsilon_4$ に対応する規格化された固有ベクトル $\vec{X}_1, \vec{X}_2, \vec{X}_3, \vec{X}_4$ を求めよ。

$$\begin{pmatrix} 3eEa_0 & 0 & -3eEa_0 & 0 \\ 0 & 3eEa_0 & 0 & 0 \\ -3eEa_0 & 0 & 3eEa_0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 3eEa_0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_{1,1} \\ x_{1,2} \\ x_{1,3} \\ x_{1,4} \end{pmatrix} = 0$$

$$x_{1,1}=x_{1,3}=\frac{1}{\sqrt{2}}, x_{1,2}=x_{1,4}=0$$

$$\begin{pmatrix} 0 & 0 & -3eEa_0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ -3eEa_0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_{2,1} \\ x_{2,2} \\ x_{2,3} \\ x_{2,4} \end{pmatrix} = 0$$

$$x_{2,3}=x_{2,1}=0, x_{2,2}=1, x_{2,4}=0$$

$$x_{3,3}=x_{3,1}=0, x_{2,2}=0, x_{2,4}=1$$

$$\begin{pmatrix} -3eEa_0 & 0 & -3eEa_0 & 0 \\ 0 & -3eEa_0 & 0 & 0 \\ -3eEa_0 & 0 & -3eEa_0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -3eEa_0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_{4,1} \\ x_{4,2} \\ x_{4,3} \\ x_{4,4} \end{pmatrix} = 0$$

$$x_{4,1}=-x_{4,3}=\frac{1}{\sqrt{2}}, x_{4,2}=x_{4,4}=0$$

$$\vec{X}_1=\begin{pmatrix} 1/\sqrt{2} \\ 0 \\ 1/\sqrt{2} \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \vec{X}_2=\begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \vec{X}_3=\begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}, \quad \vec{X}_4=\begin{pmatrix} 1/\sqrt{2} \\ 0 \\ -1/\sqrt{2} \\ 0 \end{pmatrix} \tag{53}$$

これは，水素原子に電場 E を z 方向にかけた時に，4 重に縮退した $n=2$ エネルギー準位および波動関数はどのように変化するのか摂動論を使って求める時に用いる。

例題 13 例題 6 で，固有値 E_1, E_2, E_3, E_4 に対応する規格化された固有ベクトル $\vec{X}_1, \vec{X}_2, \vec{X}_3, \vec{X}_4$ を求めよ。

$$\begin{pmatrix} -\frac{1+\sqrt{5}}{2}\beta & \beta & 0 & 0 \\ \beta & -\frac{1+\sqrt{5}}{2}\beta & \beta & 0 \\ 0 & \beta & -\frac{1+\sqrt{5}}{2}\beta & \beta \\ 0 & 0 & \beta & -\frac{1+\sqrt{5}}{2}\beta \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_{1,1} \\ x_{1,2} \\ x_{1,3} \\ x_{1,4} \end{pmatrix} = 0$$

$$\frac{1+\sqrt{5}}{2}x_{1,1} = x_{1,2}, x_{1,1} - \frac{1+\sqrt{5}}{2}x_{1,2} + x_{1,3} = 0$$

$$x_{1,2} - \frac{1+\sqrt{5}}{2}x_{1,3} + x_{1,4} = 0, x_{1,3} = \frac{1+\sqrt{5}}{2}x_{1,4}$$

$$\frac{1+\sqrt{5}}{2}x_{1,1} = x_{1,3}, \quad x_{1,2} = \frac{1+\sqrt{5}}{2}x_{1,4}$$

$$x_{1,1} = \frac{1}{\sqrt{5+\sqrt{5}}} = 0.3717.., \quad x_{1,2} = \frac{1+\sqrt{5}}{2\sqrt{5+\sqrt{5}}} = 0.6015.., \quad x_{1,3} = x_{1,2}, x_{1,4} = x_{1,1}$$

$$\begin{pmatrix} \frac{1-\sqrt{5}}{2}\beta & \beta & 0 & 0 \\ \beta & \frac{1-\sqrt{5}}{2}\beta & \beta & 0 \\ 0 & \beta & \frac{1-\sqrt{5}}{2}\beta & \beta \\ 0 & 0 & \beta & \frac{1-\sqrt{5}}{2}\beta \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_{2,1} \\ x_{2,2} \\ x_{2,3} \\ x_{2,4} \end{pmatrix} = 0$$

$$\frac{1-\sqrt{5}}{2}x_{2,1} = -x_{2,2}, x_{2,1} + \frac{1-\sqrt{5}}{2}x_{2,2} + x_{2,3} = 0$$

$$x_{2,2} + \frac{1-\sqrt{5}}{2}x_{2,3} + x_{2,4} = 0, -x_{2,3} = \frac{1-\sqrt{5}}{2}x_{2,4}$$

$$x_{2,3} = \frac{1-\sqrt{5}}{2}x_{2,1}, \quad x_{2,2} = \frac{1-\sqrt{5}}{2}x_{2,4}$$

$$x_{2,1} = \frac{1}{\sqrt{5-\sqrt{5}}} = 0.6015.., \quad x_{2,2} = -\frac{1-\sqrt{5}}{2\sqrt{5-\sqrt{5}}} = 0.3717.., \quad x_{2,3} = -x_{2,2},\ x_{2,4} = -x_{2,1}$$

$$\begin{pmatrix} -\frac{1-\sqrt{5}}{2}\beta & \beta & 0 & 0 \\ \beta & -\frac{1-\sqrt{5}}{2}\beta & \beta & 0 \\ 0 & \beta & -\frac{1-\sqrt{5}}{2}\beta & \beta \\ 0 & 0 & \beta & -\frac{1-\sqrt{5}}{2}\beta \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_{3,1} \\ x_{3,2} \\ x_{3,3} \\ x_{3,4} \end{pmatrix} = 0$$

$$\frac{1-\sqrt{5}}{2}x_{3,1} = x_{3,2}, x_{3,1} - \frac{1-\sqrt{5}}{2}x_{3,2} + x_{3,3} = 0$$

$$x_{3,2} - \frac{1-\sqrt{5}}{2}x_{3,3} + x_{3,4} = 0, x_{3,3} = \frac{1-\sqrt{5}}{2}x_{3,4}$$

$$\frac{1-\sqrt{5}}{2}x_{3,1} = x_{2,3}, \quad x_{3,2} = \frac{1-\sqrt{5}}{2}x_{3,4}$$

$$x_{3,1} = \frac{1}{\sqrt{5-\sqrt{5}}} = 0.6015.., \quad x_{3,2} = \frac{1-\sqrt{5}}{2\sqrt{5-\sqrt{5}}} = -0.3717.., \quad x_{3,3} = x_{3,2}, x_{3,4} = x_{3,1}$$

$$\begin{pmatrix} \frac{1+\sqrt{5}}{2}\beta & \beta & 0 & 0 \\ \beta & \frac{1+\sqrt{5}}{2}\beta & \beta & 0 \\ 0 & \beta & \frac{1+\sqrt{5}}{2}\beta & \beta \\ 0 & 0 & \beta & \frac{1+\sqrt{5}}{2}\beta \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_{4,1} \\ x_{4,2} \\ x_{4,3} \\ x_{4,4} \end{pmatrix} = 0$$

$$\frac{1+\sqrt{5}}{2}x_{4,1} = -x_{4,2}, x_{4,1} + \frac{1+\sqrt{5}}{2}x_{4,2} + x_{4,3} = 0$$

$$x_{4,2} + \frac{1+\sqrt{5}}{2}x_{4,3} + x_{4,4} = 0, -x_{4,3} = \frac{1+\sqrt{5}}{2}x_{4,4}$$

$$\frac{1+\sqrt{5}}{2}x_{4,1} = x_{4,3}, \quad x_{4,2} = \frac{1+\sqrt{5}}{2}x_{4,4}$$

$$x_{4,1} = \frac{1}{\sqrt{5+\sqrt{5}}} = 0.3717.., \quad x_{4,2} = -\frac{1+\sqrt{5}}{2\sqrt{5+\sqrt{5}}} = -0.6015.., \quad x_{4,3} = -x_{4,2}, x_{4,4} = -x_{4,1}$$

$$\vec{X}_1 = \begin{pmatrix} 1/\sqrt{5+\sqrt{5}} \\ (1+\sqrt{5})/(2\sqrt{5+\sqrt{5}}) \\ (1+\sqrt{5})/(2\sqrt{5+\sqrt{5}}) \\ 1/\sqrt{5+\sqrt{5}} \end{pmatrix}, \quad \vec{X}_2 = \begin{pmatrix} 1/\sqrt{5-\sqrt{5}} \\ -(1-\sqrt{5})/(2\sqrt{5-\sqrt{5}}) \\ (1-\sqrt{5})/(2\sqrt{5-\sqrt{5}}) \\ -1/\sqrt{5-\sqrt{5}} \end{pmatrix}, \quad (54)$$

$$\vec{X}_3 = \begin{pmatrix} 1/\sqrt{5-\sqrt{5}} \\ (1-\sqrt{5})/(2\sqrt{5-\sqrt{5}}) \\ (1-\sqrt{5})/(2\sqrt{5-\sqrt{5}}) \\ 1/\sqrt{5-\sqrt{5}} \end{pmatrix}, \quad \vec{X}_4 = \begin{pmatrix} 1/\sqrt{5+\sqrt{5}} \\ -(1+\sqrt{5})/(2\sqrt{5+\sqrt{5}}) \\ (1+\sqrt{5})/(2\sqrt{5+\sqrt{5}}) \\ -1/\sqrt{5+\sqrt{5}} \end{pmatrix} \quad (55)$$

これは，1,3-ブタジエンの π 電子に対するヒュッケル近似での固有状態に対応する。

例題 14 例題 7 で，固有値 E_1, E_2, E_3, E_4 に対応する規格化された固有ベクトル $\vec{X}_1, \vec{X}_2, \vec{X}_3, \vec{X}_4$ を求めよ。

$$\begin{pmatrix} -2\beta & \beta & 0 & \beta \\ \beta & -2\beta & \beta & 0 \\ 0 & \beta & -2\beta & \beta \\ \beta & 0 & \beta & -2\beta \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_{1,1} \\ x_{1,2} \\ x_{1,3} \\ x_{1,4} \end{pmatrix} = 0$$

$$-2x_{1,1} + x_{1,2} + x_{1,4} = 0$$

$$x_{1,1} - 2x_{1,2} + x_{1,3} = 0$$

$$x_{1,2} - 2x_{1,3} + x_{1,4} = 0$$

$$x_{1,1} + x_{1,3} - 2x_{1,4} = 0$$

$$x_{1,1} = x_{1,2} = x_{1,3} = x_{1,4} = \frac{1}{2}$$

$$\begin{pmatrix} 0 & \beta & 0 & \beta \\ \beta & 0 & \beta & 0 \\ 0 & \beta & 0 & \beta \\ \beta & 0 & \beta & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_{2,1} \\ x_{2,2} \\ x_{2,3} \\ x_{2,4} \end{pmatrix} = 0$$

$$x_{2,2} + x_{2,4} = 0$$

$$x_{2,1} + x_{2,3} = 0$$

$$x_{2,1} = \frac{1}{\sqrt{2}}, x_{2,2} = 0, x_{2,3} = -\frac{1}{\sqrt{2}}, x_{2,4} = 0$$

$$x_{3,1} = 0, x_{3,2} = \frac{1}{\sqrt{2}}, x_{3,3} = 0, x_{3,4} = -\frac{1}{\sqrt{2}}$$

$$\begin{pmatrix} 2\beta & \beta & 0 & \beta \\ \beta & 2\beta & \beta & 0 \\ 0 & \beta & 2\beta & \beta \\ \beta & 0 & \beta & 2\beta \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_{4,1} \\ x_{4,2} \\ x_{4,3} \\ x_{4,4} \end{pmatrix} = 0$$

$$2x_{1,1} + x_{1,2} + x_{1,4} = 0$$

$$x_{1,1} + 2x_{1,2} + x_{1,3} = 0$$

$$x_{1,2} + 2x_{1,3} + x_{1,4} = 0$$

$$x_{1,1} + x_{1,3} + 2x_{1,4} = 0$$

$$x_{1,2} = x_{1,4}, x_{1,1} = -x_{1,4}, x_{1,3} = -x_{1,4} x_{1,1} = \frac{1}{2}, x_{1,2} = -\frac{1}{2}, x_{1,3} = \frac{1}{2}, x_{1,4} = -\frac{1}{2}$$

$$\vec{X}_1 = \begin{pmatrix} 1/2 \\ 1/2 \\ 1/2 \\ 1/2 \end{pmatrix}, \quad \vec{X}_2 = \begin{pmatrix} 1/\sqrt{2} \\ 0 \\ -1/\sqrt{2} \\ 0 \end{pmatrix}, \vec{X}_3 = \begin{pmatrix} 0 \\ 1/\sqrt{2} \\ 0 \\ -1/\sqrt{2} \end{pmatrix}, \quad \vec{X}_4 = \begin{pmatrix} 1/2 \\ -1/2 \\ 1/2 \\ -1/2 \end{pmatrix} \quad (56)$$

これは，シクロブタジエンの π 電子に対するヒュッケル近似での固有状態に対応する。

例題 15 例題 8 で，固有値 $E_1, E_2, E_3, E_4, E_5, E_6$ に対応する規格化された固

有ベクトル $\vec{X}_1, \vec{X}_2, \vec{X}_3, \vec{X}_4, \vec{X}_5, \vec{X}_6$ を求めよ。

$$\begin{pmatrix} -2\beta & \beta & 0 & 0 & 0 & \beta \\ \beta & -2\beta & \beta & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \beta & -2\beta & \beta & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \beta & -2\beta & \beta & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \beta & -2\beta & \beta \\ \beta & 0 & 0 & 0 & \beta & -2\beta \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_{1,1} \\ x_{1,2} \\ x_{1,3} \\ x_{1,4} \\ x_{1,5} \\ x_{1,6} \end{pmatrix} = 0$$

$$-2x_{1,1} + x_{1,2} + x_{1,6} = 0$$
$$x_{1,1} - 2x_{1,2} + x_{1,3} = 0$$
$$x_{1,2} - 2x_{1,3} + x_{1,4} = 0$$
$$x_{1,3} - 2x_{1,4} + x_{1,5} = 0$$
$$x_{1,4} - 2x_{1,5} + x_{1,6} = 0$$
$$x_{1,1} + x_{1,5} - 2x_{1,6} = 0$$
$$x_{1,1} = x_{1,2} = x_{1,3} = x_{1,4} = x_{1,5} = x_{1,6} = \frac{1}{\sqrt{6}}$$

$$\begin{pmatrix} -\beta & \beta & 0 & 0 & 0 & \beta \\ \beta & -\beta & \beta & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \beta & -\beta & \beta & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \beta & -\beta & \beta & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \beta & -\beta & \beta \\ \beta & 0 & 0 & 0 & \beta & -\beta \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_{2,1} \\ x_{2,2} \\ x_{2,3} \\ x_{2,4} \\ x_{2,5} \\ x_{2,6} \end{pmatrix} = 0$$

$$-x_{2,1} + x_{2,2} + x_{2,6} = 0$$
$$x_{2,1} - x_{2,2} + x_{2,3} = 0$$
$$x_{2,2} - x_{2,3} + x_{2,4} = 0$$
$$x_{2,3} - x_{2,4} + x_{2,5} = 0$$
$$x_{2,4} - x_{2,5} + x_{2,6} = 0$$
$$x_{2,1} + x_{2,5} - x_{1,6} = 0$$
$$x_{2,1} = -x_{2,4},\ x_{2,2} = -x_{2,5},\ x_{2,3} = -x_{2,6}$$
$$x_{3,1} = -x_{3,4},\ x_{3,2} = -x_{3,5},\ x_{3,3} = -x_{3,6}$$
$$\text{we choose that} \tag{57}$$
$$x_{2,1} = -x_{2,4} = 0, x_{2,2} = -x_{2,5} = \frac{1}{2}, x_{2,3} = -x_{2,6} = \frac{1}{2}$$
$$x_{3,1} = -x_{3,4} = \frac{1}{\sqrt{3}}, x_{3,2} = -x_{3,5} = \frac{1}{2\sqrt{3}}, x_{3,3} = -x_{3,6} = -\frac{1}{2\sqrt{3}}$$

$$\begin{pmatrix} \beta & \beta & 0 & 0 & 0 & \beta \\ \beta & \beta & \beta & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \beta & \beta & \beta & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \beta & \beta & \beta & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \beta & \beta & \beta \\ \beta & 0 & 0 & 0 & \beta & \beta \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_{4,1} \\ x_{4,2} \\ x_{4,3} \\ x_{4,4} \\ x_{4,5} \\ x_{4,6} \end{pmatrix} = 0$$

$$x_{4,1} + x_{4,2} + x_{4,6} = 0$$
$$x_{4,1} + x_{4,2} + x_{4,3} = 0$$
$$x_{4,2} + x_{4,3} + x_{4,4} = 0$$
$$x_{4,3} + x_{4,4} + x_{4,5} = 0$$
$$x_{4,4} + x_{4,5} + x_{4,6} = 0$$
$$x_{4,1} + x_{4,5} + x_{1,6} = 0$$
$$x_{4,1} = x_{4,4},\ x_{4,2} = x_{4,5},\ x_{4,3} = x_{2,6}$$
$$x_{5,1} = x_{5,4},\ x_{5,2} = x_{5,5},\ x_{5,3} = x_{3,6}$$
$$\text{we choose that} \tag{58}$$
$$x_{4,1} = x_{4,4} = 0, x_{4,2} = x_{4,5} = \frac{1}{2}, x_{4,3} = x_{4,6} = -\frac{1}{2}$$

$$x_{5,1}=x_{5,4}=\frac{1}{\sqrt{3}},x_{5,2}=x_{5,5}=-\frac{1}{2\sqrt{3}},x_{5,3}=x_{5,6}=-\frac{1}{2\sqrt{3}}$$

$$\begin{pmatrix} 2\beta & \beta & 0 & 0 & 0 & \beta \\ \beta & 2\beta & \beta & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \beta & 2\beta & \beta & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \beta & 2\beta & \beta & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \beta & 2\beta & \beta \\ \beta & 0 & 0 & 0 & \beta & 2\beta \end{pmatrix}\begin{pmatrix} x_{6,1} \\ x_{6,2} \\ x_{6,3} \\ x_{6,4} \\ x_{6,5} \\ x_{6,6} \end{pmatrix}=0$$

$$\begin{aligned} 2x_{6,1}+x_{6,2}+x_{6,6}&=0 \\ x_{6,1}+2x_{6,2}+x_{6,3}&=0 \\ x_{6,2}+2x_{6,3}+x_{6,4}&=0 \\ x_{6,3}+2x_{6,4}+x_{6,5}&=0 \\ x_{6,4}+2x_{6,5}+x_{6,6}&=0 \\ x_{6,1}+x_{6,5}+2x_{6,6}&=0 \end{aligned}$$

$$x_{6,1}=x_{6,3}=x_{6,5}=\frac{1}{\sqrt{6}},\ x_{6,2}=x_{6,4}=x_{6,6}=-\frac{1}{\sqrt{6}}$$

$$\vec{X}_1=\begin{pmatrix} 1/\sqrt{6} \\ 1/\sqrt{6} \\ 1/\sqrt{6} \\ 1/\sqrt{6} \\ 1/\sqrt{6} \\ 1/\sqrt{6} \end{pmatrix},\ \vec{X}_2=\begin{pmatrix} 0 \\ 1/2 \\ 1/2 \\ 0 \\ -1/2 \\ -1/2 \end{pmatrix},\ \vec{X}_3=\begin{pmatrix} 1/\sqrt{3} \\ 1/(2\sqrt{3}) \\ -1/(2\sqrt{3}) \\ -1/\sqrt{3} \\ -1/(2\sqrt{3}) \\ 1/(2\sqrt{3}) \end{pmatrix}, \tag{59}$$

$$\vec{X}_4=\begin{pmatrix} 0 \\ 1/2 \\ -1/2 \\ 0 \\ 1/2 \\ -1/2 \end{pmatrix},\vec{X}_5=\begin{pmatrix} 1/\sqrt{3} \\ -1/(2\sqrt{3}) \\ -1/(2\sqrt{3}) \\ 1/\sqrt{3} \\ -1/(2\sqrt{3}) \\ -1/(2\sqrt{3}) \end{pmatrix},\ \vec{X}_6=\begin{pmatrix} 1/\sqrt{6} \\ -1/\sqrt{6} \\ 1/\sqrt{6} \\ -1/\sqrt{6} \\ 1/\sqrt{6} \\ -1/\sqrt{6} \end{pmatrix} \tag{60}$$

これは，ベンゼンの π 電子に対するヒュッケル近似での固有状態に対応する。

8　対角化 Diagonalisation

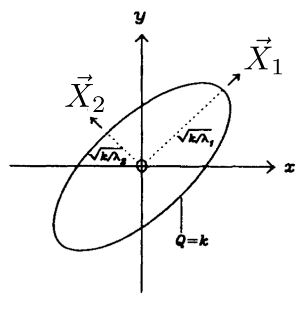
以下のスカラー量を考えることで，固有値と固有ベクトルの幾何学的な解釈を得よう。

$$Q=\vec{X}^T\boldsymbol{A}\vec{X} \tag{61}$$

これは「二次形式」とよばれる。例えば，もし $\boldsymbol{A}$ が実対称の 2×2 行列なら, 両方の固有値は同じ符号をもち，ベクトル $\vec{X}^T$ は行行列 $(x\ y)$ であり上の式は楕円の式を生み出す。その結果得られた式は単純な形ではない，なぜなら，一般に，楕円は x，y 軸に関して傾いているからである。 このようにして，固有ベクトルは主軸の方向を向き，対応する幅の２乗の逆数に比例する。高次の行列では多次元の楕円体を与えるが，主軸と固有値問題との関係は保たれる。

$\boldsymbol{A}$ の固有値と固有ベクトルを求めたら，新しい座標系 $\vec{Y}$ で考えたほうがその後の解析がしばしば簡単になる。その新しい座標系は楕円の主軸に沿った方向である。$\vec{X}$ と $\vec{Y}$ の変換は以下のように与えられる。

$$\vec{X}=\boldsymbol{O}\vec{Y} \tag{62}$$



ここで行列 $\boldsymbol{O}$ の列は，$\boldsymbol{A}$ の規格化された固有ベクトルから構成される。式 (9.20) と併せて，写像行列は「直交」していて以下の関係を満たす。

$$\boldsymbol{O}^T\boldsymbol{O}=\boldsymbol{I} \tag{63}$$

$$\boldsymbol{O}=\begin{pmatrix} | & | & & | \\ \vec{X}_1 & \vec{X}_2 & \dots & \vec{X}_N \\ | & | & & | \end{pmatrix}$$

従って二次形式は以下のようになる。

$$Q = \vec{Y}^T \mathbf{\Lambda} \vec{Y} \tag{64}$$

ここで，$\mathbf{\Lambda}$ は「対角」行列で，対角成分以外はすべてゼロであり，対角成分の要素は $\boldsymbol{A}$ の固有値に等しい。[訳注: $Q = \vec{X}^T \boldsymbol{A} \vec{X} = \vec{Y}^T \boldsymbol{O}^T \boldsymbol{A} \boldsymbol{O} \vec{Y}$]

固有値解析の物理的な価値は，一見複雑な挙動を基本的構成パーツに分解することである。例えば，分子振動に関連した固有ベクトルは，系の「基準（ノーマル）モード」に対応し，固有値は固有振動数を与える。同じように，量子力学の問題で出会う固有ベクトルと固有値は「定常状態」の波動関数とエネルギー準位に関連する。

$\boldsymbol{O}^T \boldsymbol{A} \boldsymbol{O} = \mathbf{\Lambda}$
$\mathbf{\Lambda} =$
$$\begin{pmatrix} \lambda_1 & 0 & 0 & ... & 0 \\ 0 & \lambda_2 & 0 & ... & 0 \\ 0 & 0 & \lambda_3 & ... & 0 \\ . & . & . & ... & . \\ 0 & 0 & 0 & ... & \lambda_N \end{pmatrix}$$

ちなみに，もし 2 つの固有値が等しければ (例えば $\lambda_1 = \lambda_2$) 2 次形式は円になり，これは「縮退」している場合として知られている。はっきりとした主軸がないので，平面内のすべての方向が固有ベクトルとなる。2 次元のいかなるベクトルでも 2 つの基底ベクトルから構成することができるので，2 つの独立した方向を固有ベクトルとして選択できる自由度を持つ。慣例にしたがうと，それは直交したものが選ばれる。