

第II部

量子力学のためのヒルベルト空間入門

1 ヒルベルト空間の定義

1.1 線形空間(ベクトル空間)の定義

定義 1.1. スカラー体 \mathbb{K} に対して集合 V が次の条件を満たすとき, V を \mathbb{K} 上の線形空間と呼ぶ, 特に \mathbb{K} が実数体 \mathbb{R} のときは V を実線形空間, \mathbb{K} が複素数体 \mathbb{C} のときには V を複素線形空間と呼ぶ. (以下, 任意の $x, y, z \in V, a, b \in \mathbb{K}$ について成り立つものとする)

1. V の任意の元を x, y とするとき, 和と呼ばれる写像 $+: V^2 \rightarrow V$ (これを $x+y$ などと表す) が存在し, 常に次の条件を満たす:

(a) $(x+y)+z = x+(y+z)$ (結合法則),

(b) $x+y = y+x$ (交換法則),

(c) 0 で表される零ベクトルと呼ばれる元が V に存在し, $0+x = x$ が成り立つ.

(d) V の任意の元 x に対して, $x+x' = 0$ となる V の元 x' が存在する. これを x の逆元または逆ベクトルと呼び, $-x$ で表す.

2. V の任意の元 x と \mathbb{K} の任意の元 a に対し, a 倍と呼ばれる写像 $a: V \rightarrow V$ (これを ax などと表す) が存在し, 常に次の条件を満たす:

(a) $(a+b)x = ax + bx$,

(b) $a(x+y) = ax + ay$,

(c) $(ab)x = a(bx)$,

(d) $1x = x$,

上の定義により直ちに次の定理が導かれる:

定理 1.2 (零ベクトルの一意性). 線形空間において, 零ベクトルはただ一つ存在する. 即ち, $0+x = x$, かつ $0'+x = x$ なら $0' = 0$ である.

証明. 仮定より, 任意の V の元, x, y について,

$$0+x = x,$$

$$0'+y = y,$$

だから特に $x = 0', y = 0$ ととると,

$$0+0' = 0',$$

$$0'+0 = 0$$

が成り立つ. よって交換法則 1.(b) により $0' = 0+0' = 0'+0 = 0$ だから $0' = 0$ が示せた. □

定理 1.3 (逆ベクトルの一意性). 線形空間において, 任意の元 x に対する逆ベクトルはただ一つ存在する. 即ち, $x+x' = 0$, かつ $x+x'' = 0$ なら $x'' = x'$ である.

証明. 仮定より,

$$x+x' = 0,$$

$$x+x'' = 0,$$

だから, 交換法則 1.(b) によって $0 = x+x'' = x''+x$ なのでこの両辺に右から x' を加えると,

$$x' = 0+x' = (x''+x)+x' = x''+(x+x') = x''+0 = 0+x' = x''$$

よって $x'' = x'$ が示された. □

1.2 ノルム空間の定義

定義 1.4. スカラー体 \mathbb{K} 上の線形空間 V が写像 $\|\cdot\| : V \rightarrow \mathbb{R}$ に対して次の条件を満たすとき、 $(V, \|\cdot\|)$ を \mathbb{K} 上のノルム空間と呼び、 $\|\mathbf{x}\|$ を \mathbf{x} のノルムという。(以下、任意の $\mathbf{x}, \mathbf{y} \in V, a \in \mathbb{K}$ について成り立つものとする)

1. (a) $\|\mathbf{x}\| \geq 0$, かつ $\|\mathbf{x}\| = 0 \Leftrightarrow \mathbf{x} = \mathbf{0}$,
- (b) $\|\mathbf{x} + \mathbf{y}\| \leq \|\mathbf{x}\| + \|\mathbf{y}\|$,
- (c) $\|a\mathbf{x}\| = |a| \|\mathbf{x}\|$,

このとき、

$$d(\mathbf{x}, \mathbf{y}) \stackrel{\text{def}}{=} \|\mathbf{x} - \mathbf{y}\| \quad (1.1)$$

を \mathbf{x} と \mathbf{y} の距離と呼ぶ。

1.3 バナッハ空間の定義

定義 1.5. ノルム空間 $(V, \|\cdot\|)$ が、(1.1) の距離で完備、即ち、 \mathbf{x}_n がコーシー列 ($\|\mathbf{x}_n - \mathbf{x}_m\| \rightarrow 0 (m, n \rightarrow \infty)$) ならば $\|\mathbf{x}_n - \mathbf{x}\| \rightarrow 0 (n \rightarrow \infty)$ なる $\mathbf{x} \in V$ が存在するとき、 $(V, \|\cdot\|)$ をバナッハ空間 (完備距離空間) と呼ぶ。

1.4 プレ (前) ヒルベルト空間 (内積空間, 計量線形空間) の定義

定義 1.6. \mathbb{K} 上の線形空間 V に対して、内積と呼ばれる演算 $\langle \cdot | \cdot \rangle : V^2 \rightarrow \mathbb{K}$ が存在し、任意の $\mathbf{x}, \mathbf{y}, \mathbf{z} \in V, a \in \mathbb{K}$ に対して、次が成り立つとき、プレヒルベルト空間或いは内積空間と呼ぶ¹。

1. (a) $\langle \mathbf{x} | \mathbf{x} \rangle \geq 0$, かつ $\langle \mathbf{x} | \mathbf{x} \rangle = 0 \Leftrightarrow \mathbf{x} = \mathbf{0}$,
- (b) $\langle \mathbf{x} | a\mathbf{y} \rangle = a \langle \mathbf{x} | \mathbf{y} \rangle$,
- (c) $\langle \mathbf{x} | \mathbf{y} + \mathbf{z} \rangle = \langle \mathbf{x} | \mathbf{y} \rangle + \langle \mathbf{x} | \mathbf{z} \rangle$,
- (d) $\langle \mathbf{x} | \mathbf{y} \rangle = \overline{\langle \mathbf{y} | \mathbf{x} \rangle}$,

特に $\mathbb{K} = \mathbb{R}$ のとき、 V をユークリッド (線形) 空間、 $\mathbb{K} = \mathbb{C}$ のとき、ユニタリ空間と呼ぶ。

ここで内積空間を含め簡単な命題の証明は省くが、 $\langle a\mathbf{x} | \mathbf{y} \rangle = \bar{a} \langle \mathbf{x} | \mathbf{y} \rangle$ などは大変よく使うので覚えておこう。

定義 1.7. \mathbf{x} と \mathbf{y} を内積空間の $\mathbf{0}$ でない二つの任意ベクトルとすると、

1. $\langle \mathbf{x} | \mathbf{x} \rangle = 1$ のとき \mathbf{x} は規格化されているという。
2. $\langle \mathbf{x} | \mathbf{y} \rangle = 0$ のとき \mathbf{x} と \mathbf{y} は直交するという。
3. $|\langle \mathbf{x} | \mathbf{y} \rangle|^2 = \langle \mathbf{x} | \mathbf{x} \rangle \langle \mathbf{y} | \mathbf{y} \rangle$ のとき \mathbf{x} と \mathbf{y} は平行であるという。

定理 1.8. V を内積空間とすると、任意の $\mathbf{x} \in V$ に対して、

$$\langle \mathbf{x} | \mathbf{0} \rangle = 0 \quad (1.2)$$

証明.

$$\langle \mathbf{x} | \mathbf{0} \rangle = \langle \mathbf{x} | \mathbf{0} \times \mathbf{x} \rangle = 0 \times \langle \mathbf{x} | \mathbf{x} \rangle = 0$$

□

定理 1.9. V を内積空間とすると、 $\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \dots, \mathbf{x}_n \in V$ が互いに直交するなら、 $\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \dots, \mathbf{x}_n$ は線形独立である。

¹この辺の記号の使用方法は書かれている書物によって異なる場合が多い。例えば $\langle \mathbf{x} | a\mathbf{y} \rangle = \bar{a} \langle \mathbf{x} | \mathbf{y} \rangle$ としている本も多い。ここでは量子力学のブラケット記法に準拠した記号法を用いた。

証明.

$$\sum_{k=1}^n c_k \mathbf{x}_k = \mathbf{0}, \quad (1.3)$$

とする. 任意の $m (1 \leq m \leq n)$ に対して, 定理 1.8 より,

$$0 = \langle \mathbf{x}_m | \sum_{k=1}^n c_k \mathbf{x}_k \rangle = \sum_{k=1}^n c_k \langle \mathbf{x}_m | \mathbf{x}_k \rangle = \sum_{k=1}^n c_k \delta_{mk} \langle \mathbf{x}_m | \mathbf{x}_m \rangle = c_m \langle \mathbf{x}_m | \mathbf{x}_m \rangle \quad (1.4)$$

ここで $\langle \mathbf{x}_m | \mathbf{x}_m \rangle \neq 0$ より, $c_m = 0$. m は任意だったから, 結局全ての c_1, c_2, \dots, c_n が 0 である. よって $\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \dots, \mathbf{x}_n$ が線形独立であることが示された. \square

定理 1.10 (シュバルツの不等式). V を内積空間とするとき, 任意の \mathbf{x}, \mathbf{y} に対して,

$$|\langle \mathbf{x} | \mathbf{y} \rangle|^2 \leq \langle \mathbf{x} | \mathbf{x} \rangle \langle \mathbf{y} | \mathbf{y} \rangle \quad (1.5)$$

が成り立つ. 特に等号成立は \mathbf{x} と \mathbf{y} が従属のときに限る.

この定理において, \mathbf{x} または \mathbf{y} のうちいずれかが $\mathbf{0}$ ベクトルのとき明らかに等号が成立する. 従って $\mathbf{x} \neq \mathbf{0}$ かつ $\mathbf{y} \neq \mathbf{0}$ としてよい. このときこの不等式の両辺を $\langle \mathbf{x} | \mathbf{x} \rangle \langle \mathbf{y} | \mathbf{y} \rangle$ で割ってやっても同値な変形となっているから, 結局次の補題が示せればよい.

補題 1.11. V を内積空間とするとき, $\langle \mathbf{x} | \mathbf{x} \rangle = 1$ かつ $\langle \mathbf{y} | \mathbf{y} \rangle = 1$ なる任意の \mathbf{x}, \mathbf{y} に対して,

$$|\langle \mathbf{x} | \mathbf{y} \rangle|^2 \leq 1 \quad (1.6)$$

が成り立つ. 特に等号成立は \mathbf{x} と \mathbf{y} が従属のときに限る.

証明. この補題の主張する内容を幾何学的な言葉で説明すると, ベクトル \mathbf{y} のベクトル \mathbf{x} への射影の長さが必ず元の \mathbf{y} の長さである 1 以下になり, 等号が成立するのは \mathbf{x} と \mathbf{y} が平行であるときに限る. というものである. そこで \mathbf{y} から \mathbf{y} の \mathbf{x} に平行な成分, つまり \mathbf{y} の \mathbf{x} への射影を引いたもののベクトルの大きさが 0 以上であるということからこの補題を導こう.

$$\begin{aligned} 0 &\leq \langle \mathbf{y} - \langle \mathbf{x} | \mathbf{y} \rangle \mathbf{x} | \mathbf{y} - \langle \mathbf{x} | \mathbf{y} \rangle \mathbf{x} \rangle \\ &= \langle \mathbf{y} | \mathbf{y} \rangle + \langle \mathbf{y} | -\langle \mathbf{x} | \mathbf{y} \rangle \mathbf{x} \rangle + \langle -\langle \mathbf{x} | \mathbf{y} \rangle \mathbf{x} | \mathbf{y} \rangle + \langle -\langle \mathbf{x} | \mathbf{y} \rangle \mathbf{x} | -\langle \mathbf{x} | \mathbf{y} \rangle \mathbf{x} \rangle \\ &= \langle \mathbf{y} | \mathbf{y} \rangle - \langle \mathbf{x} | \mathbf{y} \rangle \langle \mathbf{y} | \mathbf{x} \rangle - \overline{\langle \mathbf{x} | \mathbf{y} \rangle} \langle \mathbf{x} | \mathbf{y} \rangle + \overline{\langle \mathbf{x} | \mathbf{y} \rangle} \langle \mathbf{x} | \mathbf{y} \rangle \langle \mathbf{x} | \mathbf{x} \rangle \\ &= 1 - \langle \mathbf{x} | \mathbf{y} \rangle \overline{\langle \mathbf{x} | \mathbf{y} \rangle} - \overline{\langle \mathbf{x} | \mathbf{y} \rangle} \langle \mathbf{x} | \mathbf{y} \rangle + \overline{\langle \mathbf{x} | \mathbf{y} \rangle} \langle \mathbf{x} | \mathbf{y} \rangle \\ &= 1 - |\langle \mathbf{x} | \mathbf{y} \rangle|^2 \end{aligned}$$

よって,

$$|\langle \mathbf{x} | \mathbf{y} \rangle|^2 \leq 1$$

が示された. ここで不等号は最初の行のみで発生しているから等号成立は

$$\langle \mathbf{y} - \langle \mathbf{x} | \mathbf{y} \rangle \mathbf{x} | \mathbf{y} - \langle \mathbf{x} | \mathbf{y} \rangle \mathbf{x} \rangle = 0$$

のとき, 即ち $\mathbf{y} = \langle \mathbf{x} | \mathbf{y} \rangle \mathbf{x}$ のときに限ることが分かる. 逆に \mathbf{y} が \mathbf{x} に従属のとき, 即ち $\mathbf{y} = \alpha \mathbf{x}$ のとき,

$$|\langle \mathbf{x} | \mathbf{y} \rangle|^2 = |\langle \mathbf{x} | \alpha \mathbf{x} \rangle|^2 = |\alpha|^2 |\langle \mathbf{x} | \mathbf{x} \rangle|^2 = |\alpha|^2 \quad (1.7)$$

であるが, いま,

$$1 = \langle \mathbf{y} | \mathbf{y} \rangle = \langle \alpha \mathbf{x} | \alpha \mathbf{x} \rangle = \bar{\alpha} \alpha \langle \mathbf{x} | \mathbf{x} \rangle = |\alpha|^2$$

であるから, 結局等号成立の必要充分条件は \mathbf{x} と \mathbf{y} が従属の場合に限られることが分かる. \square

定理 1.12 (三角不等式). V を内積空間とするとき, 任意の \mathbf{x}, \mathbf{y} に対して,

$$\left(\sqrt{\langle \mathbf{x} + \mathbf{y} | \mathbf{x} + \mathbf{y} \rangle} \right)^2 = \langle \mathbf{x} + \mathbf{y} | \mathbf{x} + \mathbf{y} \rangle \leq \left(\sqrt{\langle \mathbf{x} | \mathbf{x} \rangle} + \sqrt{\langle \mathbf{y} | \mathbf{y} \rangle} \right)^2 \quad (1.8)$$

が成り立つ.

証明.

$$\begin{aligned}\langle \mathbf{x} + \mathbf{y} | \mathbf{x} + \mathbf{y} \rangle &= \langle \mathbf{x} | \mathbf{x} \rangle + \langle \mathbf{y} | \mathbf{y} \rangle + \langle \mathbf{x} | \mathbf{y} \rangle + \langle \mathbf{y} | \mathbf{x} \rangle \\ &= \langle \mathbf{x} | \mathbf{x} \rangle + \langle \mathbf{y} | \mathbf{y} \rangle + 2\operatorname{Re}(\langle \mathbf{x} | \mathbf{y} \rangle) \\ &\leq \langle \mathbf{x} | \mathbf{x} \rangle + \langle \mathbf{y} | \mathbf{y} \rangle + 2|\langle \mathbf{x} | \mathbf{y} \rangle| \\ &\leq \langle \mathbf{x} | \mathbf{x} \rangle + \langle \mathbf{y} | \mathbf{y} \rangle + 2\sqrt{\langle \mathbf{x} | \mathbf{x} \rangle \langle \mathbf{y} | \mathbf{y} \rangle} \\ &= \left(\sqrt{\langle \mathbf{x} | \mathbf{x} \rangle} + \sqrt{\langle \mathbf{y} | \mathbf{y} \rangle} \right)^2\end{aligned}$$

なお、式の変形に $a = \operatorname{Re}(a + bi) \leq |a + bi| = \sqrt{a^2 + b^2}$ およびシュバルツの不等式を用いた。□

定理 1.13. V を内積空間とすると、任意の $\mathbf{x} \in V$ に対して、

$$\|\mathbf{x}\| \stackrel{\text{def}}{=} \sqrt{\langle \mathbf{x} | \mathbf{x} \rangle} \quad (1.9)$$

によって、写像 $\|\cdot\| : V \rightarrow \mathbb{R}$ を定義すると、 $\|\cdot\|$ はノルムになる。

証明. ノルムの定義 1.(a) は、内積の定義 1.(a) より、

$$\langle \mathbf{x} | \mathbf{x} \rangle \geq 0, \text{ かつ } \langle \mathbf{x} | \mathbf{x} \rangle = 0 \Leftrightarrow \mathbf{x} = \mathbf{0},$$

より

$$\|\mathbf{x}\| = \sqrt{\langle \mathbf{x} | \mathbf{x} \rangle} \geq 0, \text{ かつ } \|\mathbf{x}\| = \sqrt{\langle \mathbf{x} | \mathbf{x} \rangle} = 0 \Leftrightarrow \mathbf{x} = \mathbf{0},$$

だから明らか。

ノルムの定義 1.(b) は、定理 1.12 の三角不等式のルートをとれば、

$$\|\mathbf{x} + \mathbf{y}\| = \sqrt{\langle \mathbf{x} + \mathbf{y} | \mathbf{x} + \mathbf{y} \rangle} \leq \sqrt{\langle \mathbf{x} | \mathbf{x} \rangle} + \sqrt{\langle \mathbf{y} | \mathbf{y} \rangle} = \|\mathbf{x}\| + \|\mathbf{y}\| \quad (1.10)$$

より明らか。

最後にノルムの定義 1.(c) は、内積の定義 1.(b) 及び 1.(d) により、

$$\|a\mathbf{x}\| = \sqrt{\langle a\mathbf{x} | a\mathbf{x} \rangle} = \sqrt{\bar{a}a\langle \mathbf{x} | \mathbf{x} \rangle} = \sqrt{|a|^2\langle \mathbf{x} | \mathbf{x} \rangle} = |a|\sqrt{\langle \mathbf{x} | \mathbf{x} \rangle} = |a|\|\mathbf{x}\| \quad (1.11)$$

となるのでこれも示せた。□

1.5 ヒルベルト空間の定義

定義 1.14. スカラー体 \mathbb{K} 上の内積空間 V が定理 1.13 によるノルムについて完備のときヒルベルト空間と呼ぶ。特に $\mathbb{K} = \mathbb{R}$ のとき実ヒルベルト空間、 $\mathbb{K} = \mathbb{C}$ のとき複素ヒルベルト空間と呼ぶ。以下では、ヒルベルト空間を \mathcal{H} で表し、特に断らない限り $\mathbb{K} = \mathbb{C}$ の複素ヒルベルト空間を扱うものとする。

1.6 量子力学における記号法についての約束について

いままでの説明においては、記号法はほぼ数学よりの記号法で表してきたが、ここからは量子力学に便利なブラケット記法の導入に向けて記号の使い方を少し変えよう。即ち、今まではヒルベルト空間の元として \mathbf{x} などと表したわけであるが、今後はヒルベルト空間の元として $|\Psi\rangle$ などと表すことにする。この記号は内積の記号の右側半分とよく似ているが、こうすると非常に便利であることが後に示されよう。また使われている文字が \mathbf{x} から Ψ に変えてあるのは波動関数に対応する量だからであるが、本質的にヒルベルト空間のどういう元に対応するかが分かればよいのでいろいろな記号の使い方が一般にはされる。

2 演算子と固有ベクトル

2.1 ヒルベルト空間上の線形作用素 (演算子)

定義 2.1. $\hat{A}: \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}$ が次の条件を満たすとき、 \hat{A} を \mathcal{H} 上の線形作用素または演算子と呼ぶ:

1. $\hat{A}(|\psi_1\rangle + |\psi_2\rangle) = \hat{A}|\psi_1\rangle + \hat{A}|\psi_2\rangle$
2. $\hat{A}(c|\psi\rangle) = c\hat{A}|\psi\rangle$

このように量子力学では演算子に $\hat{\cdot}$ (ハット) をつける習慣があるがこれは後に述べるように A と書けば物理量を表し、 \hat{A} はその物理量に対応する演算子を表すための両者の区別のために付けるのである。

定義 2.2. $|\psi_1\rangle$ と $\hat{A}|\psi_2\rangle$ の内積を $\langle\psi_1|\hat{A}|\psi_2\rangle$ と表す. 特にこの表記法が紛らわしい場合は、 $\hat{A}|\psi_2\rangle$ の部分を $\hat{A}\psi_2$ で表す. 即ち、 $\langle\psi_1|\hat{A}|\psi_2\rangle = \langle\psi_1|\hat{A}\psi_2\rangle$ とする. 又、 $|\psi\rangle$ に $\langle\psi|$ が対応するように、 $\hat{A}\psi \stackrel{\text{def}}{=} \hat{A}|\psi\rangle$ には $\langle\hat{A}\psi|$ が対応するものとする.

定理 2.3. 任意の $|\psi_1\rangle, |\psi_2\rangle \in \mathcal{H}$ に対して、

$$\langle\psi_1|\hat{A}\psi_2\rangle = 0$$

なら、 $\hat{A} = \hat{0}$ 即ち、 \hat{A} は零演算子である.

証明. 条件より、任意の $|\psi\rangle \in \mathcal{H}$ に対して、

$$\langle\hat{A}\psi|\hat{A}\psi\rangle = 0 \tag{2.1}$$

従って内積の定義 1.(a) より、任意の $|\psi\rangle \in \mathcal{H}$ に対して、

$$\hat{A}|\psi\rangle = \mathbf{0} \tag{2.2}$$

であるが、これは $\hat{A} = \hat{0}$ であることを意味する. □

系 2.4. 任意の $|\psi_1\rangle, |\psi_2\rangle \in \mathcal{H}$ に対して、

$$\langle\psi_1|\hat{A}\psi_2\rangle = \langle\psi_1|\hat{B}\psi_2\rangle$$

なら、 $\hat{A} = \hat{B}$ である.

証明.

$$\langle\psi_1|\hat{A}\psi_2\rangle = \langle\psi_1|\hat{B}\psi_2\rangle$$

より、

$$0 = \langle\psi_1|\hat{A}\psi_2\rangle - \langle\psi_1|\hat{B}\psi_2\rangle = \langle\psi_1|(\hat{A} - \hat{B})\psi_2\rangle$$

だから、定理 2.3 より $\hat{A} - \hat{B} = \hat{0}$ 即ち、 $\hat{A} = \hat{B}$ が示された. □

2.2 演算子の固有値, 固有ベクトル

定義 2.5. 演算子 \hat{A} に対してある複素数 a とベクトル $|\psi\rangle$ があって、

$$\hat{A}|\psi\rangle = a|\psi\rangle \tag{2.3}$$

が成り立つとき、 a を演算子 \hat{A} の固有値、 $|\psi\rangle$ を固有値 a の固有ベクトルと呼ぶ.

a が固有値のときその固有ベクトルは一般に無数にある. 例えば $\hat{A}|\psi\rangle = a|\psi\rangle$ のとき、 $\hat{A}(c|\psi\rangle) = c\hat{A}|\psi\rangle = ca|\psi\rangle = a(c|\psi\rangle)$ だから、任意の c について $c|\psi\rangle$ は a の固有ベクトルになる. 従ってそれを利用し、 $c = \frac{1}{\sqrt{\langle\psi|\psi\rangle}}$ と置けば、

$$\left\langle \frac{1}{\sqrt{\langle\psi|\psi\rangle}}\psi \middle| \frac{1}{\sqrt{\langle\psi|\psi\rangle}}\psi \right\rangle = \frac{1}{\sqrt{\langle\psi|\psi\rangle}} \frac{1}{\sqrt{\langle\psi|\psi\rangle}} \langle\psi|\psi\rangle = \frac{1}{|\langle\psi|\psi\rangle|} \langle\psi|\psi\rangle = 1 \tag{2.4}$$

となり、規格化された固有ベクトルになる. そこで今後はこの規格化された a の固有ベクトルを $|a\rangle$ などと表すことにする.

2.3 エルミート共役演算子の定義

定義 2.6. 任意の $|\Psi_1\rangle, |\Psi_2\rangle \in \mathcal{H}$ に対して,

$$\langle \hat{B}\Psi_1 | \Psi_2 \rangle = \langle \Psi_1 | \hat{A}\Psi_2 \rangle \quad (2.5)$$

を満たす演算子 \hat{B} を \hat{A} のエルミート共役演算子と呼び, $\hat{A}^\dagger = \hat{B}$ で表す.

定理 2.7. 任意の $|\Psi_1\rangle, |\Psi_2\rangle \in \mathcal{H}$ 及び, 任意の演算子 \hat{A} に対して,

$$\overline{\langle \Psi_2 | \hat{A}^\dagger \Psi_1 \rangle} = \langle \Psi_1 | \hat{A} \Psi_2 \rangle$$

証明.

$$\overline{\langle \Psi_2 | \hat{A}^\dagger \Psi_1 \rangle} = \langle \hat{A}^\dagger \Psi_1 | \Psi_2 \rangle = \langle \Psi_1 | \hat{A} \Psi_2 \rangle$$

□

定理 2.8.

$$(\hat{A}^\dagger)^\dagger = \hat{A}$$

証明. 任意の $|\Psi_1\rangle, |\Psi_2\rangle \in \mathcal{H}$ に対して, 定理 2.7 より,

$$\langle \Psi_1 | \hat{A} \Psi_2 \rangle = \overline{\langle \Psi_2 | \hat{A}^\dagger \Psi_1 \rangle} = \overline{\overline{\langle \Psi_1 | (\hat{A}^\dagger)^\dagger \Psi_2 \rangle}} = \langle \Psi_1 | (\hat{A}^\dagger)^\dagger \Psi_2 \rangle \quad (2.6)$$

よって系 2.4 より $(\hat{A}^\dagger)^\dagger = \hat{A}$ が示された.

□

2.4 エルミート (自己共役) 演算子の定義

定義 2.9. 演算子 \hat{A} が, $\hat{A}^\dagger = \hat{A}$ を満たすとき, \hat{A} をエルミート演算子, ないしは自己共役演算子と呼ぶ.

定理 2.10. エルミート演算子の固有値は全て実数である.

$\hat{A}^\dagger = \hat{A}$, $\hat{A}|a\rangle = a|a\rangle$ とすると,

$$\langle a | \hat{A} | a \rangle = \langle a | a \rangle = a \langle a | a \rangle = a \quad (2.7)$$

一方, 上の複素共役をとると,

$$\bar{a} = \overline{\langle a | \hat{A} | a \rangle} = \langle a | \hat{A}^\dagger | a \rangle = \langle a | \hat{A} | a \rangle = \langle a | a \rangle = a \langle a | a \rangle = a$$

よって $\bar{a} = a$ だから固有値 a は実数である.

定理 2.11. エルミート演算子の異なる固有値に対する固有ベクトルは, 互いに直交する.

証明.

$$\hat{A}^\dagger = \hat{A}, \hat{A}|a\rangle = a|a\rangle, \hat{A}|b\rangle = b|b\rangle, a \neq b$$

とする. すると,

$$\langle a | \hat{A} | b \rangle = \langle a | b \rangle = b \langle a | b \rangle,$$

一方, 上の複素共役をとると, 定理 2.7, 2.8 より,

$$\overline{b \langle a | b \rangle} = \overline{\langle a | \hat{A} | b \rangle} = \langle a | (\hat{A}^\dagger)^\dagger | b \rangle = \langle b | \hat{A}^\dagger | a \rangle = \langle b | \hat{A} | a \rangle = \langle b | a \rangle = a \langle b | a \rangle$$

ここで, 定理 2.10 より b は実数だから,

$$\overline{b \langle a | b \rangle} = \bar{b} \overline{\langle a | b \rangle} = b \langle b | a \rangle$$

従って,

$$(b - a) \langle b | a \rangle = 0$$

であるが, 今, $a \neq b$ なのだから, $\langle b | a \rangle = 0$ である. 従って $|a\rangle$ と $|b\rangle$ は直交する.

□

2.5 完全正規直交系と波動関数

定義 2.12. エルミート演算子 \hat{A} の一つの固有値 a に対して, m_a 個の線形独立な固有ベクトルがあるとき, 「固有値 a は m_a 重に縮退している」といい, m_a を縮退度と呼ぶ.

一般に, 一つのエルミート演算子の固有ベクトルを縮退しているものまで全て集めれば, それは \mathcal{H} の完全系をなすことが知られている. いま, 異なる固有値に属する固有ベクトルは互いに直交するので, 同じ固有値に属する固有ベクトルをシュミットの直交化法などにより直交化して規格化すれば, それは完全正規直交系をなす. そこで以後, そのように規格化及び直交化した \hat{A} の固有値 a の l 番目の固有ベクトルを $|a, l\rangle$ と表すことにする. このとき, 次の関係式が成り立つ:

$$\langle a, l | a', l' \rangle = \delta_{aa'} \delta_{ll'}$$

定義 2.13. \hat{A} をエルミート演算子, $|a, l\rangle$ をその固有ベクトルとする. このとき, $\{|a, l\rangle\}$ は完全正規直交系だから, 任意の (状態) ベクトル $|\Psi\rangle$ に対し,

$$|\Psi\rangle = \sum_a \sum_{l=1}^{m_a} \Psi(a, l) |a, l\rangle \quad (2.8)$$

の形に展開できる. そこでこのときの展開係数は固有値と縮退度に応じた変数から複素数値をとる関数とみなせる. この関数 $\Psi(a, l)$ を \hat{A} 表示の波動関数と呼ぶ.

定理 2.14. $\{|b\rangle\}$ を完全正規直交系とすると, 任意の $|\mathbf{x}\rangle \in \mathcal{H}$ に対し,

$$|\mathbf{x}\rangle = \sum_b \langle b | \mathbf{x} \rangle |b\rangle \quad (2.9)$$

が成り立つ. 特に基底がエルミート演算子 \hat{A} の固有ベクトルからなる正規直交系 $\{|a, l\rangle\}$ の場合,

$$\Psi(a, l) = \langle a, l | \Psi \rangle, \quad (2.10)$$

$$|\Psi\rangle = \sum_a \sum_{l=1}^{m_a} \langle a, l | \Psi \rangle |a, l\rangle, \quad (2.11)$$

が成り立つ.

証明. $\{|b\rangle\}$ は完全正規直交系なので, 任意のベクトル $|\mathbf{x}\rangle \in \mathcal{H}$ に対して,

$$|\mathbf{x}\rangle = \sum_{b'} x_{b'} |b'\rangle$$

のように展開できる. ここでこれに左から $\langle b|$ を作用させると,

$$\langle b | \mathbf{x} \rangle = \langle b | \sum_{b'} x_{b'} |b'\rangle = \sum_{b'} x_{b'} \langle b | b' \rangle = \sum_{b'} x_{b'} \delta_{bb'} = x_b$$

が成り立つ. 従って,

$$|\mathbf{x}\rangle = \sum_b \langle b | \mathbf{x} \rangle |b\rangle$$

が示された. 残りの証明は, $|a, l\rangle \equiv |b\rangle$, $\langle a, l | \Psi \rangle \equiv x_b$ とおけば明らか. □

定理 2.15.

$$\langle \Psi | \Psi \rangle = \sum_a \sum_{l=1}^{m_a} |\Psi(a, l)|^2$$

証明.

$$\begin{aligned}
\langle \Psi | \Psi \rangle &= \left\langle \sum_a \sum_{l=1}^{m_a} \Psi(a, l) |a, l\rangle \sum_{a'} \sum_{l'=1}^{m_{a'}} \Psi(a', l') |a', l'\rangle \right\rangle \\
&= \sum_a \sum_{l=1}^{m_a} \sum_{a'} \sum_{l'=1}^{m_{a'}} \overline{\Psi(a, l)} \Psi(a', l') \langle a, l | a', l' \rangle \\
&= \sum_a \sum_{l=1}^{m_a} \sum_{a'} \sum_{l'=1}^{m_{a'}} \overline{\Psi(a, l)} \Psi(a', l') \delta_{aa'} \delta_{ll'} \\
&= \sum_a \sum_{l=1}^{m_a} \overline{\Psi(a, l)} \Psi(a, l) \\
&= \sum_a \sum_{l=1}^{m_a} |\Psi(a, l)|^2
\end{aligned}$$

□

ここで特に $\Psi(a, l)$ が波動関数のとき、規格化条件より $\langle \Psi | \Psi \rangle = 1$ でなければならないから、

$$\sum_a \sum_{l=1}^{m_a} |\Psi(a, l)|^2 = 1 \tag{2.12}$$

である.

注意 この \hat{A} 表示の波動関数は一般に \hat{A} を固定しても一意ではない. 何故なら, 固有値 a の固有ベクトルは縮退がある場合, 一般に一意に決まらないからである. そんな場合でも, その基底で表した波動関数と一対一に対応するし, 相互に変換することも出来る. 例えば, より一般に \hat{B} の固有ベクトルを $|b, k\rangle$ とし, その表示の波動関数を $\Psi_B(b, l)$ とすると,

$$\begin{aligned}
|\Psi_A\rangle &= \sum_a \sum_{l=1}^{m_a} \Psi_A(a, l) |a, l\rangle, \\
|\Psi_B\rangle &= \sum_b \sum_{k=1}^{m_b} \Psi_B(b, k) |b, k\rangle,
\end{aligned}$$

であるから,

$$\Psi_B(b, k) = \langle b, k | \Psi_B \rangle = \langle b, k | \sum_a \sum_{l=1}^{m_a} \Psi_A(a, l) |a, l\rangle = \sum_a \sum_{l=1}^{m_a} \Psi_A(a, l) \langle b, k | a, l \rangle$$

と, Ψ_A から Ψ_B を求めることが出来る. 逆も全く同様にすればよい.

2.6 ブラケット記法と双対空間

定義 2.16. 任意のベクトル $|\Psi\rangle, |\Psi'\rangle \in \mathcal{H}$ に対して, 内積 $\langle \Psi | \Psi' \rangle \in \mathbb{C}$ より, 内積の左半分を,

$$\langle \Psi | : \mathcal{H} \rightarrow \mathbb{C}$$

となる演算子とみなして,

$$\langle \Psi | \Psi' \rangle \stackrel{\text{def}}{=} \langle \Psi | | \Psi' \rangle$$

とすれば, 内積 $\langle \Psi | \Psi' \rangle$ は $|\Psi'\rangle$ (これを特にケットベクトルと呼ぶ) に $\langle \Psi |$ (これを特にブラベクトルと呼ぶ) を左から作用させたものとみなすことが出来便利である. このブラベクトル $\langle \Psi |$ を $|\Psi\rangle$ に共役なブラベクトルといい, 逆にケットベクトル $|\Psi\rangle$ をこのブラベクトル $\langle \Psi |$ に共役なケットベクトルと呼ぶ.

ブラベクトル全体も線形空間になり双対空間と呼ぶ. \mathcal{H} の双対空間を \mathcal{H}^* で表すことにする.

定理 2.17.

$$c_1|\Psi_1\rangle + c_2|\Psi_2\rangle \xleftrightarrow{\text{共役}} \overline{c_1}\langle\Psi_1| + \overline{c_2}\langle\Psi_2|$$

証明.

$$c_1|\Psi_1\rangle + c_2|\Psi_2\rangle = |c_1\Psi_1 + c_2\Psi_2\rangle \xleftrightarrow{\text{共役}} \langle c_1\Psi_1 + c_2\Psi_2| = \overline{c_1}\langle\Psi_1| + \overline{c_2}\langle\Psi_2|$$

□

定理 2.18.

$$\hat{A}^\dagger|\Psi\rangle \xleftrightarrow{\text{共役}} \langle\Psi|\hat{A}$$

証明. $\hat{A}^\dagger|\Psi\rangle = |\hat{A}^\dagger\Psi\rangle$ より, この共役は, $\langle\hat{A}^\dagger\Psi|$. 従って \hat{A}^\dagger の定義より,

$$\langle\hat{A}^\dagger\Psi|\Psi'\rangle = \langle\Psi|\hat{A}\Psi'\rangle$$

だから, $\hat{A}^\dagger|\Psi\rangle \xleftrightarrow{\text{共役}} \langle\Psi|\hat{A}$ である. □

定理 2.18 より, 任意のブラベクトル $\langle\Psi| \in \mathcal{H}^*$ に対して, $\langle\Psi|\hat{A} = \langle\hat{A}^\dagger\Psi| \in \mathcal{H}^*$ だから, \hat{A} は右から作用させると, ブラベクトルに対する演算子とみなせる. よって \hat{A} は左からケットベクトルに作用させることも右からブラベクトルに作用させることも出来るようになったことになる.

2.7 射影演算子

定義 2.19 (射影演算子の定義). 適当な 2 つのケットベクトル, $|\mathbf{x}\rangle, |\mathbf{y}\rangle \in \mathcal{H}$ をとる. このとき任意の $|\Psi\rangle \in \mathcal{H}$ に対して, $\langle\mathbf{x}|\Psi\rangle|\mathbf{y}\rangle \in \mathcal{H}$ だから,

$$\langle\mathbf{x}|\Psi\rangle|\mathbf{y}\rangle = |\mathbf{y}\rangle\langle\mathbf{x}|\Psi\rangle$$

と変形すると, $|\mathbf{y}\rangle\langle\mathbf{x}|$ は $\mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}$ の演算子とみなせる. これは任意のケットベクトル $|\Psi\rangle \in \mathcal{H}$ を

$$|\mathbf{y}\rangle\langle\mathbf{x}|\Psi\rangle = \langle\mathbf{x}|\Psi\rangle|\mathbf{y}\rangle$$

に移すが, $\langle\mathbf{x}|\Psi\rangle$ はただの複素数だから, 結局 $|\mathbf{y}\rangle$ に平行なベクトルに変える演算子ということになる. 特に, $|\mathbf{x}\rangle$ が規格化されているとき,

$$\hat{P}(\mathbf{x}) \stackrel{\text{def}}{=} |\mathbf{x}\rangle\langle\mathbf{x}|$$

は任意のケットベクトルを $|\mathbf{x}\rangle$ に平行な成分だけを抜き出す演算子になる. これは幾何学的には $|\Psi\rangle$ の $|\mathbf{x}\rangle$ 方向の射影を与える演算子なので, $\hat{P}(\mathbf{x})$ を $|\mathbf{x}\rangle$ への射影演算子と呼ぶ.

$|a, l\rangle$ がエルミート演算子 \hat{A} の固有ベクトルなら, $\hat{P}(a, l)|\Psi\rangle$ は $|a, l\rangle$ に平行な固有ベクトルになるが, これは固有値 a に縮退があるとき, 当然 l に依存する固有ベクトルである. 一方,

$$\hat{P}(a) \stackrel{\text{def}}{=} \sum_{l=1}^{m_a} \hat{P}(a, l) = \sum_{l=1}^{m_a} |a, l\rangle\langle a, l|$$

は縮退しているもの全てを集めているので l に無関係になる. 実際,

$$\begin{aligned} \hat{A}\hat{P}(a)|\Psi\rangle &= \hat{A}\left(\sum_{l=1}^{m_a} |a, l\rangle\langle a, l|\right)|\Psi\rangle \\ &= \sum_{l=1}^{m_a} \hat{A}|a, l\rangle\langle a, l|\Psi\rangle \\ &= \sum_{l=1}^{m_a} a|a, l\rangle\langle a, l|\Psi\rangle \\ &= a\sum_{l=1}^{m_a} |a, l\rangle\langle a, l|\Psi\rangle \\ &= a\hat{P}(a)|\Psi\rangle \end{aligned}$$

より, $\hat{P}(a)|\Psi\rangle$ も固有ベクトル (か $\mathbf{0}$ ベクトル) になる. ここで, 定理 2.14 より,

$$|\Psi\rangle = \sum_a \sum_{l=1}^{m_a} \Psi(a, l)|a, l\rangle = \sum_a \sum_{l=1}^{m_a} \langle a, l|\Psi\rangle|a, l\rangle = \sum_a \sum_{l=1}^{m_a} |a, l\rangle\langle a, l|\Psi\rangle = \sum_a \hat{P}(a)|\Psi\rangle$$

が成り立つから, $\hat{P}(a)|\Psi\rangle$ は $|\Psi\rangle$ の固有値 a に属する固有空間への射影になっている. この $\hat{P}(a)$ を $\hat{P}(a, l)$ と区別して, 「固有値 a に属する固有空間への射影演算子」と呼ぶことにする.

定理 2.20. $\{|b\rangle\}$ を完全正規直交系とすると,

$$\sum_b |b\rangle\langle b| = \hat{1} \quad (2.13)$$

が成り立つ.

証明. $|\mathbf{x}\rangle \in \mathcal{H}$ を任意にとるとき, 定理 2.14 より,

$$|\mathbf{x}\rangle = \sum_b \langle b|\mathbf{x}\rangle|b\rangle = \sum_b |b\rangle\langle b|\mathbf{x}\rangle = \left(\sum_b |b\rangle\langle b| \right) |\mathbf{x}\rangle$$

が成り立つ. $|\mathbf{x}\rangle \in \mathcal{H}$ は任意だったから, これは,

$$\sum_b |b\rangle\langle b| = \hat{1}$$

を示している. □

系 2.21. エルミート演算子の任意の固有ベクトルからなる完全正規直交系を $\{|a, l\rangle\}$ とするとき (基底 $\{|a, l\rangle\}$ の選び方によらず),

$$\sum_a \sum_{l=1}^{m_a} |a, l\rangle\langle a, l| = \hat{1}$$

が成り立つ.

上の定理とは逆に,

$$\sum_{\mathbf{x}} |\mathbf{x}\rangle\langle \mathbf{x}| = \hat{1} \quad (2.14)$$

が成り立つとすると, 任意の $|\Psi\rangle \in \mathcal{H}$ に対して,

$$|\Psi\rangle = \hat{1} \cdot |\Psi\rangle = \sum_{\mathbf{x}} |\mathbf{x}\rangle\langle \mathbf{x}|\Psi\rangle = \sum_{\mathbf{x}} \langle \mathbf{x}|\Psi\rangle|\mathbf{x}\rangle$$

より, $\{|\mathbf{x}\rangle\}$ で展開できるので $\{|\mathbf{x}\rangle\}$ は完全系になる.

定理 2.22. $|a'\rangle$ が \hat{A} の固有値 a' の任意の固有ベクトルとすると, 次が成り立つ:

$$\hat{P}(a)|a'\rangle = \delta_{aa'}|a'\rangle$$

証明. $\hat{P}(a)$ は, 固有値 a 方向の射影だからもともと固有値 a の固有ベクトルなら何もしないし, 固有値が異なれば, その成分がないのだから $\mathbf{0}$ になるという自明な定理である. 実際, 定理 2.14 より,

$$\begin{aligned} \hat{P}(a)|a'\rangle &= \sum_{l=1}^{m_a} |a, l\rangle\langle a, l|a'\rangle \\ &= \sum_{l=1}^{m_a} |a, l\rangle\delta_{aa'}\langle a, l|a'\rangle \\ &= \delta_{aa'} \sum_{l=1}^{m_a} |a, l\rangle\langle a, l|a'\rangle \\ &= \delta_{aa'} \sum_{a''} \sum_{l=1}^{m_{a''}} |a'', l\rangle\langle a'', l|a'\rangle \\ &= \delta_{aa'}|a'\rangle \end{aligned}$$

となる. なお, 異なる固有値に属する固有ベクトルは直交するという定理 2.11 を用いた. □

定理 2.23. $\hat{P}(a)$ は完全正規直交系 $\{|a, l\rangle\}$ の選び方によらず一意に決まる.

証明. $\{|a, l\rangle\}$ と $\{|a, l'\rangle\}$ を異なる完全正規直交系とする. (即ち, 同じ固有値 a に対する固有ベクトルに対して $|a, l\rangle \neq |a, l'\rangle$ とする) このとき, 同じ固有値に対する固有空間の次元は等しいから m_a は一意に決まるので,

$$\hat{P}(a) = \sum_{l=1}^{m_a} |a, l\rangle \langle a, l|,$$

$$\tilde{P}(a) = \sum_{l=1}^{m_a} |a, l'\rangle \langle a, l'|,$$

とすると, $\hat{P}(a) = \tilde{P}(a)$ となることを示せばよい. 系 2.21 と定理 2.22 を用いると,

$$\begin{aligned} \hat{P}(a) &= \tilde{P}(a) \cdot \hat{1} \\ &= \tilde{P}(a) \sum_{a'} \sum_{l=1}^{m_{a'}} |a', l\rangle \langle a', l| \\ &= \sum_{a'} \sum_{l=1}^{m_{a'}} \tilde{P}(a) |a', l\rangle \langle a', l| \\ &= \sum_{a'} \sum_{l=1}^{m_{a'}} \delta_{aa'} |a', l\rangle \langle a', l| \\ &= \sum_{l=1}^{m_a} |a, l\rangle \langle a, l| \\ &= \hat{P}(a) \end{aligned}$$

よって, $\hat{P}(a) = \tilde{P}(a)$ が示せた. □

今まで, 縮退している場合の固有ベクトルを $|a, l\rangle$ などと表したが, 煩雑なので, 紛らわしくないときには, 固有値 a が縮退している場合は, $|\mathbf{a}\rangle = |a, l\rangle$, 縮退していない場合は $|\mathbf{a}\rangle = |a\rangle$ などと表すことにする. この記号法は和をとるときにも用い, $\sum_{\mathbf{a}} = \sum_a \sum_{l=1}^{m_a}$ などとすることにしよう.

定理 2.24.

$$\hat{P}(\mathbf{a}) \cdot \hat{P}(\mathbf{a}') = \delta_{\mathbf{a}\mathbf{a}'} \hat{P}(\mathbf{a}), \quad (2.15)$$

$$\hat{P}(\mathbf{a}) \cdot \hat{P}(\mathbf{a}') = \delta_{\mathbf{a}\mathbf{a}'} \hat{P}(\mathbf{a}), \quad (2.16)$$

証明.

$$\hat{P}(\mathbf{a}) \cdot \hat{P}(\mathbf{a}') = |\mathbf{a}\rangle \langle \mathbf{a} | \mathbf{a}'\rangle \langle \mathbf{a}'| = \delta_{\mathbf{a}\mathbf{a}'} |\mathbf{a}\rangle \langle \mathbf{a}'| = \delta_{\mathbf{a}\mathbf{a}'} |\mathbf{a}\rangle \langle \mathbf{a}| = \delta_{\mathbf{a}\mathbf{a}'} \hat{P}(\mathbf{a})$$

故に, (2.15) が示された. (2.16) は,

$$\begin{aligned} \hat{P}(\mathbf{a}) \cdot \hat{P}(\mathbf{a}') &= \sum_{l=1}^{m_a} |a, l\rangle \langle a, l| \sum_{l'=1}^{m_{a'}} |a', l'\rangle \langle a', l'| \\ &= \sum_{l=1}^{m_a} \sum_{l'=1}^{m_{a'}} |a, l\rangle \langle a, l | a', l'\rangle \langle a', l'| \\ &= \sum_{l=1}^{m_a} \sum_{l'=1}^{m_{a'}} |a, l\rangle \delta_{aa'} \delta_{ll'} \langle a', l'| \\ &= \delta_{aa'} \sum_{l=1}^{m_a} |a, l\rangle \langle a, l| \\ &= \delta_{aa'} \hat{P}(a) \end{aligned}$$

□

より示せた.

定理 2.25. \mathcal{H} が有限次元のとき, \mathcal{H} の二つの完全正規直交系はユニタリ行列で相互に変換される.

証明. $\{|a\rangle\}$ と $\{|b\rangle\}$ を \mathcal{H} の二つの完全正規直交系とする. すると定理 2.14 より,

$$|a\rangle = \sum_b \langle b|a\rangle |b\rangle, \quad (2.17)$$

$$|b\rangle = \sum_a \langle a|b\rangle |a\rangle, \quad (2.18)$$

と展開できる. そこで (2.17) に左から, $\langle a'|$ を作用させると,

$$\delta_{aa'} = \langle a'|a\rangle = \langle a'| \sum_b \langle b|a\rangle |b\rangle = \sum_b \langle b|a\rangle \langle a'|b\rangle = \sum_b \langle b|a\rangle \overline{\langle b|a'\rangle},$$

これより, $u_{ab} \equiv \langle b|a\rangle$ とでもおけば,

$$\sum_b u_{ab} \bar{u}_{a'b} = \delta_{aa'}, \quad (2.19)$$

$$(2.20)$$

かつ,

$$|a\rangle = \sum_b \langle b|a\rangle |b\rangle = \sum_b u_{ab} |b\rangle, \quad (2.21)$$

$$|b\rangle = \sum_a \langle a|b\rangle |a\rangle = \sum_a \overline{\langle b|a\rangle} |a\rangle = \sum_a \bar{u}_{ab} |a\rangle, \quad (2.22)$$

となりユニタリ一行列で相互に変換できることが分かる. \square

定理 2.26 (スペクトル分解). \hat{A} をエルミート演算子とする. このとき, \hat{A} は次の形で表せる:

$$\hat{A} = \sum_a a \hat{P}(a) \quad (2.23)$$

これをスペクトル分解と呼ぶ.

証明.

$$\begin{aligned} \hat{A} &= \hat{1} \cdot \hat{A} \cdot \hat{1} \\ &= \sum_{\mathbf{a}} |\mathbf{a}\rangle \langle \mathbf{a}| \hat{A} \sum_{\mathbf{a}'} |\mathbf{a}'\rangle \langle \mathbf{a}'| \\ &= \sum_{\mathbf{a}} \sum_{\mathbf{a}'} |\mathbf{a}\rangle \langle \mathbf{a}| \hat{A} |\mathbf{a}'\rangle \langle \mathbf{a}'| \\ &= \sum_{\mathbf{a}} \sum_{\mathbf{a}'} |\mathbf{a}\rangle \langle \mathbf{a}| \mathbf{a}' \langle \mathbf{a}'| \langle \mathbf{a}'| \\ &= \sum_{\mathbf{a}} \sum_{\mathbf{a}'} \mathbf{a}' |\mathbf{a}\rangle \langle \mathbf{a}| \mathbf{a}' \langle \mathbf{a}'| \\ &= \sum_{\mathbf{a}} \sum_{\mathbf{a}'} \mathbf{a}' |\mathbf{a}\rangle \delta_{\mathbf{a}\mathbf{a}'} \langle \mathbf{a}'| \\ &= \sum_{\mathbf{a}} \mathbf{a} |\mathbf{a}\rangle \langle \mathbf{a}| \\ &= \sum_{\mathbf{a}} \sum_l \mathbf{a} |a, l\rangle \langle a, l| \\ &= \sum_{\mathbf{a}} \mathbf{a} \sum_l |a, l\rangle \langle a, l| \\ &= \sum_{\mathbf{a}} \mathbf{a} \hat{P}(a) \end{aligned}$$

よって (2.23) が示せた. \square

定理 2.27. \hat{A} をエルミート演算子とするとき, 任意の $|\Psi\rangle \in \mathcal{H}$ に対して,

$$\langle \Psi | \hat{A} | \Psi \rangle = \sum_{\mathbf{a}} \mathbf{a} \sum_{l=1}^{m_{\mathbf{a}}} |\langle a, l | \Psi \rangle|^2 = \sum_{\mathbf{a}} \mathbf{a} \sum_{l=1}^{m_{\mathbf{a}}} |\Psi(a, l)|^2 \quad (2.24)$$

が成り立つ. 従って $\langle \Psi | \hat{A} | \Psi \rangle$ は実数になる.

証明. スペクトル分解定理 2.23 より,

$$\begin{aligned}
\langle \Psi | \hat{A} | \Psi \rangle &= \langle \Psi | \sum_a a \hat{\mathcal{P}}(a) | \Psi \rangle \\
&= \sum_a a \langle \Psi | \hat{\mathcal{P}}(a) | \Psi \rangle \\
&= \sum_a a \langle \Psi | \sum_{l=1}^{m_a} |a, l\rangle \langle a, l | \Psi \rangle \\
&= \sum_a a \sum_{l=1}^{m_a} \langle \Psi | a, l \rangle \langle a, l | \Psi \rangle \\
&= \sum_a a \sum_{l=1}^{m_a} \overline{\langle a, l | \Psi \rangle} \langle a, l | \Psi \rangle \\
&= \sum_a a \sum_{l=1}^{m_a} |\langle a, l | \Psi \rangle|^2 \\
&= \sum_a a \sum_{l=1}^{m_a} |\Psi(a, l)|^2
\end{aligned}$$

ここでエルミート演算子の固有値は全て実数だったから, 最後の式は明らかに実数になる. □

定理 2.28. \hat{A} をエルミート演算子, a をその固有値とすると, 任意の自然数 k について,

$$\hat{A}^k = \sum_a a^k \hat{\mathcal{P}}(a) \tag{2.25}$$

証明. $k = 0$ のとき, 系 2.21 より成立する. $k > 0$ とすると,

$$\begin{aligned}
\hat{A}^k &= \hat{A}^{k-1} \hat{A} \\
&= \left(\sum_a a^{k-1} \hat{\mathcal{P}}(a) \right) \left(\sum_{a'} a' \hat{\mathcal{P}}(a') \right) \\
&= \sum_a \sum_{a'} a^{k-1} a' \hat{\mathcal{P}}(a) \hat{\mathcal{P}}(a')
\end{aligned}$$

ここで定理 2.24 式 (2.16) より $\hat{\mathcal{P}}(a) \hat{\mathcal{P}}(a') = \delta_{aa'} \hat{\mathcal{P}}(a)$ だから,

$$\begin{aligned}
\hat{A}^k &= \sum_a \sum_{a'} a^{k-1} a' \hat{\mathcal{P}}(a) \hat{\mathcal{P}}(a') \\
&= \sum_a \sum_{a'} a^{k-1} a' \delta_{aa'} \hat{\mathcal{P}}(a) \\
&= \sum_a a^{k-1} a \hat{\mathcal{P}}(a) \\
&= \sum_a a^k \hat{\mathcal{P}}(a)
\end{aligned}$$

よって, (2.25) が示された. □

この定理により, 任意の多項式関数,

$$f(x) = \sum_{k=0}^n c_k x^k \tag{2.26}$$

に対し,

$$f(\hat{A}) = \sum_{k=0}^n c_k \hat{A}^k \tag{2.27}$$

は自然に定義できる. これはスペクトル分解を利用した定理 2.28 を用いると,

$$f(\hat{A}) = \sum_{k=0}^n c_k \hat{A}^k = \sum_{k=0}^n c_k \sum_a a^k \hat{\mathcal{P}}(a) = \sum_a \sum_{k=0}^n c_k a^k \hat{\mathcal{P}}(a) = \sum_a f(a) \hat{\mathcal{P}}(a)$$

となり,

$$f(\hat{A}) = \sum_a f(a) \hat{P}(a) \quad (2.28)$$

が任意の多項式関数について成り立つことが分かる. ここで極限を考え, 任意の関数をテイラー展開して出来る多項式についてもこの関係は成り立ちそうである. そこで逆に, 任意の関数 $f(x)$ が与えられたとき, 関係式 (2.28) によって $f(\hat{A})$ を定義するのは自然であろう. このように考えると, 例えば次のような関数が”上手く”定義できる:

$$\begin{aligned} \sqrt{\hat{A}} &\stackrel{\text{def}}{=} \sum_a \sqrt{a} \hat{P}(a) \quad (a \geq 0), \\ \ln \hat{A} &\stackrel{\text{def}}{=} \sum_a \ln a \hat{P}(a) \quad (a > 0), \end{aligned}$$

なお, この例の場合, 固有値に括弧の中身の条件が課せられるため, \hat{A} の全ての固有値がこの条件を満たさねばきちんと定義出来ないことは言うまでもない.

3 連続固有値の場合について

エルミート演算子 \hat{A} が連続固有値を持つ場合, 当然今まで使ってきたように, $\sum_a \sum_{l=1}^{m_a}$ などとは出来なくなる. しかし, 幸いにして量子力学は離散固有値の場合も連続固有値の場合もほぼ同じ数学的道具立てで展開できる数学的一般性があることが分かっている. そこでここからは連続固有値の場合について, 今まで離散固有値に対して示してきた定理等を, 離散固有値の場合の定義と類似の定義と, ごくわずかの条件から導けることを示したい. これにより, 離散固有値に対する有用な性質がほぼそのままの形で連続固有値の場合についても利用することが出来ることになり, 今後の理論展開がよりはっきりと, そしてスムーズになるであろう.

その前に, まず最初に \hat{A} が離散固有値しか持たない場合について復習しよう. \hat{A} の固有ベクトル $|a, l\rangle$ からなる完全正規直交系を $\{|a, l\rangle\}$ とするとき, 任意の状態ベクトル $|\Psi\rangle$ に対する \hat{A} 表示の波動関数を対応させる関係式は定義 2.13 より次のものであった:

$$|\Psi\rangle = \sum_{\mathbf{a}} \Psi(\mathbf{a}) |\mathbf{a}\rangle = \sum_a \sum_{l=1}^{m_a} \Psi(a, l) |a, l\rangle, \quad (3.1)$$

またこのとき, 定理 2.14 より,

$$\Psi(a, l) = \langle a, l | \Psi \rangle, \quad (3.2)$$

が成り立つのであった. そこで我々は, 連続固有値の場合についてもこの式の \sum を \int に変えたものを定義として要請する. 即ち, 連続固有値の場合の \hat{A} 表示の波動関数を対応させる関係式は, $\sum_{\mathbf{a}}$ を $\int d\mathbf{a}$ に置き換えたものとする. ここで,

$$\int d\mathbf{a} = \begin{cases} \int da \sum_{l=1}^{m_a} & (l \text{ の縮退が離散の場合}), \\ \int da \int dl & (l \text{ の縮退が連続の場合}), \end{cases} \quad (3.3)$$

とする. この条件から, l が離散の場合は,

$$|\Psi\rangle = \int d\mathbf{a} \Psi(\mathbf{a}) |\mathbf{a}\rangle = \int da \sum_{l=1}^{m_a} \Psi(a, l) |a, l\rangle \quad (3.4)$$

となり, 連続の場合には,

$$|\Psi\rangle = \int d\mathbf{a} \Psi(\mathbf{a}) |\mathbf{a}\rangle = \int da \int dl \Psi(a, l) |a, l\rangle \quad (3.5)$$

が成り立つものとする.² また, (3.2) 式については離散固有値の場合はこれは定理であったが, ここでは同じ形のもの連続固有値の場合においては”条件”として仮定することにする. 後に述べるとおり, この仮定は必ず

²ここで式 (3.4), (3.5) の意味はそれぞれ,

$$\int da \sum_{l=1}^{m_a} \Psi(a, l) |a, l\rangle = \int \sum_{l=1}^{m_a} \Psi(a, l) |a, l\rangle da, \quad \int da \int dl \Psi(a, l) |a, l\rangle = \iint \Psi(a, l) |a, l\rangle dlda,$$

なのは言うまでもない. \sum と同じ形式になり便利なので今後もこの記法を使用することにする.

しも必要ではない。しかし、これを仮定として認めることにより、離散固有値の場合のクロネッカーのデルタに対して、連続固有値の場合にはディラックのデルタ関数が対応することの数学的必然性が明確になる。

ここで連続固有値の場合の $\{|a, l\rangle\}$ はどのように規格化されるべきかについて考えてみよう。お互いが直交するように基底の成分を選ぶのは当然離散固有値の場合と一緒にである。しかし、規格化については単に、 $|a, l\rangle = \frac{1}{\sqrt{\langle a|\alpha\rangle}}|\alpha\rangle$ などとするわけにもいかななくなる。

まず最初に連続固有値が縮退していない場合を考える。これは、式 (3.3) において \sum が無い場合だから、

$$|\Psi\rangle = \int da' \Psi(a')|a'\rangle \quad (3.6)$$

となる。ここで $a \rightarrow a'$ としたが積分してしまえば一緒だから問題はない。この両辺に左から $\langle a|$ を作用させると、

$$\langle a|\Psi\rangle = \langle a| \int da' \Psi(a')|a'\rangle = \int \Psi(a')\langle a|a'\rangle da'$$

ここで (3.2) 式より、 $\langle a|\Psi\rangle = \Psi(a)$ だったから、結局、

$$\Psi(a) = \int \Psi(a')\langle a|a'\rangle da' \quad (3.7)$$

が成り立つことになる。さてここで固有値の取る範囲は一般には分からないが、仮に $\alpha < a' < \beta$ としよう。すると、

$$\Psi(a) = \int_{\alpha}^{\beta} \Psi(a')\langle a|a'\rangle da' \quad (3.8)$$

が成り立つことになるが、今、左辺が a のみの関数になっているのであるから、この等式が一般に成り立つためには $\langle a|a'\rangle$ は a' が a の付近のみで値を持たなければならないだろう。この条件を満たすものとして、数学的にはデルタ関数と呼ばれる、“超”関数が知られている：

定義 3.1 (デルタ関数の定義). 任意の連続関数 $f(x)$ に対して、

$$\int_{-\infty}^{\infty} f(x')\delta(x' - x)dx' = f(x) \quad (3.9)$$

となるような $\delta(x)$ をディラックのデルタ関数と呼ぶ。

定理 3.2. $a < x < b$ のとき、

$$f(x) = \int_a^b f(x')\delta(x' - x)dx' \quad (3.10)$$

証明.

$$F(x) = \begin{cases} f(x) & a < x < b, \\ 0 & \text{上記以外,} \end{cases}$$

とおくと、 $a < x < b$ のとき、

$$f(x) = F(x) = \int_{-\infty}^{\infty} F(x')\delta(x' - x)dx' = \int_a^b f(x')\delta(x' - x)dx'$$

□

この定理より、

$$\Psi(a) = \int_{\alpha}^{\beta} \Psi(a')\delta(a' - a)da' \quad (3.11)$$

が成り立つのであるから、(3.8) 式と比較すれば、

$$\langle a|a'\rangle = \delta(a' - a) \quad (3.12)$$

が得られる。これで縮退がない場合について基底が満たすべき条件が求まった。

次に l が離散の縮退を持つ場合についてであるが, (3.4) 式より,

$$\langle a, l | \Psi \rangle = \int \sum_{l'=1}^{m_{a'}} \Psi(a', l') \langle a, l | a', l' \rangle da' \quad (3.13)$$

が得られるが, 縮退がない場合からの類推により, 適当な関数 $F(l, l')$ により,

$$\langle a, l | a', l' \rangle = F(l, l') \delta(a' - a) \quad (3.14)$$

の形となりそうである. そこでこれを (3.13) 式に代入すると,

$$\langle a, l | \Psi \rangle = \int \sum_{l'=1}^{m_{a'}} \Psi(a', l') F(l, l') \delta(a' - a) da' \quad (3.15)$$

が得られるが, ここで,

$$S(a', l) \equiv \sum_{l'=1}^{m_{a'}} \Psi(a', l') F(l, l') \quad (3.16)$$

とおくと, 定理 3.2 より,

$$\int \sum_{l'=1}^{m_{a'}} \Psi(a', l') F(l, l') \delta(a' - a) da' = \int S(a', l) \delta(a' - a) da' = S(a, l) = \sum_{l'=1}^{m_a} \Psi(a, l') F(l, l') \quad (3.17)$$

が成り立つから結局 (3.2) 式より,

$$\Psi(a, l) = \sum_{l'=1}^{m_a} \Psi(a, l') F(l, l') \quad (3.18)$$

が成り立つことになる. この式は明らかに,

$$F(l, l') = \delta_{ll'} \quad (3.19)$$

のときに恒等式になる. これより,

$$\langle a, l | a', l' \rangle = \delta(a' - a) \delta_{ll'} \quad (3.20)$$

が離散の縮退を持つ場合の規格化条件が求まったことになる.

最後に縮退が連続の場合であるが, (3.5) 式より得られる

$$\langle a, l | \Psi \rangle = \iint \Psi(a', l') \langle a, l | a', l' \rangle dl' da' \quad (3.21)$$

に,

$$\langle a, l | a', l' \rangle \equiv \delta(a' - a) \delta(l' - l)$$

と仮定して代入してみると,

$$\iint \Psi(a', l') \delta(a' - a) \delta(l' - l) dl' da' = \int \left(\int \Psi(a', l') \delta(l' - l) dl' \right) \delta(a' - a) da' = \int \Psi(a, l') \delta(l' - l) dl' = \Psi(a, l)$$

が得られ, $\Psi(a, l) = \langle a, l | \Psi \rangle$ より (60) 式と一致するので,

$$\langle a, l | a', l' \rangle = \delta(a' - a) \delta(l' - l) \quad (3.22)$$

の置き換えは正しかったことが分かる. これが連続な縮退を持つ場合の規格化条件である.

まだこれだけでは, (3.2), (3.4), (3.5) を満たすという条件だけで話をしていたので, 連続固有値の場合のどんな展開も, (3.3) の置き換えとデルタ関数の使用によって離散固有値の場合の各定理等がそのまま流用できるかどうかは確認してはいない. しかし, これらの結果をまとめると, 固有値であろうがその縮退であろうが, 離散であれば $\delta_{\alpha\alpha'}$ を用い, 連続であれば $\delta(\alpha' - \alpha)$ を用いればよいということが想像できる. そこで,

$$\delta(\alpha' - \alpha) = \begin{cases} \delta_{\alpha\alpha'} \delta_{ll'} & (\text{固有値もその縮退もどちらも離散の場合}), \\ \delta(a' - a) \delta_{ll'} & (\text{連続固有値離散縮退の場合}), \\ \delta(a' - a) \delta(l' - l) & (\text{固有値もその縮退もどちらも連続の場合}), \end{cases} \quad (3.23)$$

という記法を用いることにする。この記法を用いて、まず最初に \hat{A} の固有ベクトル達から完全正規直交系 $\{|a, l\rangle\}$ をどのようにすれば求められるのか、ということについて示したい。そうでないと、常に完全正規直交系を用いて展開してきた離散固有値の場合の有用な成果を連続固有値の場合に利用することが出来なくなってしまうからだ。

しかし、連続固有値の場合に一般的に任意の線形独立な固有ベクトルからなる完全系が与えられたときに、それら全てを直交化する一般的な方法は無いように思われる。幸いにして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自然に直交するという定理 2.11 があるが、縮退が有限次元でない一般の場合にこれら全てを直交化させる方法は筆者は知らない。恥ずかしながら筆者の知っている、一般的に与えられたどんな線形独立なベクトルでも直交化できる方法というのはシュミットの直交化法のみであるが、これは一般に \mathcal{H} が有限次元の場合にしか全てのベクトルを直交化できないからだ。一方、このことは個別のケースにおいて固有ベクトル達で全て直交化するものを作れない、或いは見つけられないことを意味しない。多くの場合、直交する基底が(シュミットの直交化法などによらずに)見つかる場合もあるだろう。いずれにしろ筆者にとって一般の場合について固有ベクトル達を全て直交化させる問題は悩ましく、残念ながらまとまった考えを述べることは出来ない。ここでは有限個のサンプルとなる固有ベクトルたちが与えられた場合については常にシュミットの直交化法で直交化できるし、そこからそれらを規格化も出来ることは触れておく。数値計算をする場合においてはどのみち有限個のサンプルに頼らざるを得ないのであるから、数値計算においてはこの方法は充分実用的であることは触れておく。

さて、どのように直交化させるのかは取り敢えず解決したものとしてそこから規格化するのは、簡単である。規格化条件、

$$\langle \mathbf{a}' | \mathbf{a} \rangle = \delta(\mathbf{a}' - \mathbf{a}) \quad (3.24)$$

を用いればよい。まず、一般に

$$\langle \mathbf{a}' | \mathbf{a} \rangle = F(\mathbf{a}, \mathbf{a}') \delta(\mathbf{a}' - \mathbf{a}) \quad (3.25)$$

の形に表せるが、この右辺は $\mathbf{a}' = \mathbf{a}$ の点以外ではどうせ 0 になってしまう。従って (3.25) は、

$$\langle \mathbf{a}' | \mathbf{a} \rangle = F(\mathbf{a}') \delta(\mathbf{a}' - \mathbf{a}) = F(\mathbf{a}) \delta(\mathbf{a}' - \mathbf{a}) \quad (3.26)$$

の形で表されているとしてよい。ここで (3.26) の両辺を \mathbf{a}' で積分すると、

$$\int \langle \mathbf{a}' | \mathbf{a} \rangle d\mathbf{a}' = \int F(\mathbf{a}') \delta(\mathbf{a}' - \mathbf{a}) d\mathbf{a}' = F(\mathbf{a}) \quad (3.27)$$

従って、

$$|\mathbf{a}\rangle \rightarrow \frac{1}{\sqrt{F(\mathbf{a})}} |\mathbf{a}\rangle = \frac{1}{\sqrt{\int \langle \mathbf{a}' | \mathbf{a} \rangle d\mathbf{a}'}} |\mathbf{a}\rangle \quad (3.28)$$

とすれば、(3.24) が成り立ち、従ってキチンと規格化されたことになる。

以後、連続固有値の場合についても、 $\{|a, l\rangle\}$ と表したら、規格化された完全直交系とする。筆者の力量では一般的に完全規格直交系を構成する方法についてこれ以上の説明が難しいからでもある。

さて、我々は、定理 2.14 の連続固有値版の (3.2) 式を”条件”として仮定して議論を進め、

$$\langle \mathbf{a} | \mathbf{a}' \rangle = \delta(\mathbf{a}' - \mathbf{a}) \quad (3.29)$$

を導いたわけだが、実は逆にこの (3.29) を規格化条件として話を進めれば、離散固有値の場合の各定理等がほぼ同じ証明によって示すことが出来ることに気づくであろう。例えば、

$$|\Psi\rangle = \int d\mathbf{a}\Psi(\mathbf{a})|\mathbf{a}\rangle = \int d\mathbf{a}\langle\mathbf{a}|\Psi\rangle|\mathbf{a}\rangle, \quad (3.30)$$

$$\langle\Psi|\Psi\rangle = \int d\mathbf{a}|\Psi(\mathbf{a})|^2, \quad (3.31)$$

特に, Ψ が波動関数のとき, (3.32)

$$\langle\Psi|\Psi\rangle = \int d\mathbf{a}|\Psi(\mathbf{a})|^2 = 1, \quad (3.33)$$

$$\hat{\mathcal{P}}(x) = |x\rangle\langle x|, \quad (3.34)$$

$$\hat{\mathcal{P}}(a) = \begin{cases} \sum_{l=1}^{m_a} |a, l\rangle\langle a, l| & (\text{縮退が離散の場合}), \\ \int dl |a, l\rangle\langle a, l| & (\text{縮退が連続の場合}), \end{cases} \quad (3.35)$$

$$\int d\mathbf{a}|\mathbf{a}\rangle\langle\mathbf{a}| = \hat{1}, \quad (3.36)$$

$$\hat{\mathcal{P}}(\mathbf{a}) \cdot \hat{\mathcal{P}}(\mathbf{a}') = \delta(\mathbf{a}' - \mathbf{a})\hat{\mathcal{P}}(\mathbf{a}), \quad (3.37)$$

$$\hat{\mathcal{P}}(a) \cdot \hat{\mathcal{P}}(a') = \delta(a' - a)\hat{\mathcal{P}}(a), \quad (3.38)$$

$$\hat{A} = \int a\hat{\mathcal{P}}(\mathbf{a})d\mathbf{a} = \int a\hat{\mathcal{P}}(a)da \quad (\text{但し, } \hat{A}|\mathbf{a}\rangle = a|\mathbf{a}\rangle), \quad (3.39)$$

$$\hat{A}^k = \int a^k\hat{\mathcal{P}}(a)da, \quad (3.40)$$

$$f(\hat{A}) = \int f(a)\hat{\mathcal{P}}(a)da, \quad (3.41)$$

などが成り立つ. なおデルタ関数の諸性質については付録にしてあるので気になる方は参考にしてみるとよいかもしれない. なお, 答えにデルタ関数があるまま出てくる (3.37), (3.38) については縮退が連続の場合について念のため次に証明を記す:

$\hat{\mathcal{P}}(\mathbf{a}) \cdot \hat{\mathcal{P}}(\mathbf{a}') = \delta(\mathbf{a}' - \mathbf{a})\hat{\mathcal{P}}(\mathbf{a})$ の証明.

$$\hat{\mathcal{P}}(\mathbf{a}) \cdot \hat{\mathcal{P}}(\mathbf{a}') = |a, l\rangle\langle a, l|a', l'\rangle\langle a', l'| = |a, l\rangle\delta(\mathbf{a}' - \mathbf{a})\langle a', l'| = \delta(\mathbf{a}' - \mathbf{a})|a, l\rangle\langle a, l| = \delta(\mathbf{a}' - \mathbf{a})\hat{\mathcal{P}}(\mathbf{a})$$

□

$\hat{\mathcal{P}}(a) \cdot \hat{\mathcal{P}}(a') = \delta(a' - a)\hat{\mathcal{P}}(a)$ の証明.

$$\begin{aligned} \hat{\mathcal{P}}(a) \cdot \hat{\mathcal{P}}(a') &= \int |a, l\rangle\langle a, l|dl \int |a', l'\rangle\langle a', l'|dl' \\ &= \int dl \int |a, l\rangle\langle a, l|a', l'\rangle\langle a', l'|dl' \\ &= \int dl \int |a, l\rangle\delta(a' - a)\delta(l' - l)\langle a', l'|dl' \\ &= \delta(a' - a) \int dl \int |a, l\rangle\langle a', l'|\delta(l' - l)dl' \\ &= \delta(a' - a) \int dl |a, l\rangle\langle a', l| \\ &= \delta(a' - a) \int dl |a, l\rangle\langle a, l| \\ &= \delta(a' - a)\hat{\mathcal{P}}(a) \end{aligned}$$

□