

## 量子力学の基礎

北野正雄 (京都大学大学院工学研究科)

kitano@kuee.kyoto-u.ac.jp 2007 年 10 月 16 日

この内容は京都大学工学部電気電子工学科における授業「電気電子工学のための量子論」の補助的資料として準備されたものです。個人使用以外の目的で利用される場合には著者の許諾を得てください。

## 第 3 章

# ヒルベルト空間

複素数は振動を数学的に表すのに便利な道具であり、電気回路においても複素振幅 (フェーザ) が活躍する。量子系は振動子の集合としてよく表すことができる。したがって、系の自由度に対応する複素数の組、すなわち複素ベクトルが導入される。複素数を係数にもつベクトル空間 (線形空間) はヒルベルト空間とよばれる。また、便利な記法として、ディラックのブラケットを導入する。

### 3.1 振動の重ね合せと干渉

周波数 ( $\omega/2\pi$ ) の等しい 2 つの交流電源 (複素振幅:  $\tilde{V}_1, \tilde{V}_2$ ) を直列接続し、負荷抵抗  $R$  に繋いだ場合を考えよう\*1)。抵抗の両端の電圧は当然  $\tilde{V} = \tilde{V}_1 + \tilde{V}_2$  であるが、自明とも思えるこの式は見掛けよりも深い意味を担っている。簡単のために  $|\tilde{V}_1| = |\tilde{V}_2|$  であるとする。2 つの電源が同位相の場合、 $\arg \tilde{V}_1 = \arg \tilde{V}_2 + 2n\pi$  には、振幅  $|\tilde{V}|$  は 2 倍に、抵抗での消費パワー  $R|\tilde{V}|^2$  は 4 倍になる。逆位相の場合、 $\arg \tilde{V}_1 = \arg \tilde{V}_2 + (2n+1)\pi$  には、振幅もパワーも 0 になる。このように振動や波を重ね合せると、複素数で表した振幅は単純な和で表されるが、実際の振幅やパワーは相対位相に依存して大きく変化する。これを干渉という。干渉効果があらわになるためには位相差がある程度の時間、一定に保たれている

---

\*1) 量子論にいきなり電気の話が出てくると違和感があるかも知れないが、ディラックは学部時代 (1918–21) は電気工学を専攻していた。ブラケットによる量子論の定式化において、フェーザの考え方は何らかの影響を与えたことが想像される。

表 3.1 古典的波動と量子の対応

	古典波動	量子
基本量	複素振幅 (フェーザ)	確率振幅 (波動関数)
2乗量	パワー/エネルギー	見出す確率

必要がある。そうでなければ、強めあう場合 (パワー 4 倍) と打ち消しあう場合 (0 倍) が交互に起って平均的には 2 倍のパワーが抵抗に供給されることになる。(日常感覚に適合した  $1 + 1 = 2$  が実現されている。) 2 つの電源の周波数が異なる場合にも、一般に干渉は見られない。

干渉効果は振動や波動の最も本質的な特徴である。しかし、われわれの直観に合わない部分が多いので、さまざまな例を通して振動波動に関する感性を磨くことが重要な課題である\*2)。

電子や光子のような量子も波動として振る舞う側面があることは 2 重スリット、干渉計の実験や偏光において既に見たとおりである。古典振動波動のパワーあるいはエネルギーに相当するものが、量子を見出す確率である。たとえば、光のビームを 1:1 の半透鏡 (ビームスプリッタ) に通すと透過するパワーは  $1/2$  になる。量子描像では光子は  $1/2$  の確率で透過すると見ることができる。

このことから、表 3.2 に示すように、振動波動の振幅の絶対値の 2 乗を確率に対応させればよいことが分かる。そのためには全確率が 1 になるように正規化しておく必要がある。振動波動の干渉の様子を知るためには複素振幅 (振幅と位相) を知る必要がある。量子に対する複素振幅は確率振幅、あるいは波動関数とよばれる。

## 3.2 振動と複素数 (フェーザ)

角周波数  $\omega$  の単振動 (調和振動) の時間発展は微分方程式

$$\frac{dx}{dt} = \omega y, \quad \frac{dy}{dt} = -\omega x \quad (3.1)$$

で記述される。複素量  $\xi = x + iy$  を導入すると、微分方程式 (3.1) はより簡単に

$$\frac{d\xi}{dt} = -i\omega\xi \quad (3.2)$$

となり、その解は

$$\xi(t) = \xi(0)e^{-i\omega t} \quad (3.3)$$

と表される。複素数  $\xi(t)$  は振動系の状態を表しているが、ある時刻 (たとえば  $t = 0$ ) での状態  $\xi(0)$  を知れば、任意の時刻における状態  $\xi(t)$  を定めることが

\*2) 電磁波や量子力学におけるパラドックスの多くは、われわれが粒子描像に基づく日常感覚に囚われていて、波動の振舞を見誤っていることが原因である。

できる。つまり、振動系の状態は1つの複素数  $\xi(0)$  で決定され、振幅が絶対値  $|\xi(0)|$  に、振動の初期位相が位相  $\arg \xi(0)$  に対応する。

このような振動子が多数個 ( $n$  個) 存在する場合には複素数の集まりを考えればよい。形式的に  $n$ -次元の複素ベクトル

$$\boldsymbol{\xi} = (\xi_1, \xi_2, \dots, \xi_n) = \xi_1 \mathbf{e}_1 + \xi_2 \mathbf{e}_2 + \dots + \xi_n \mathbf{e}_n \quad (3.4)$$

を用いて、その系の状態を記述することができる。すなわち、複素数を成分としてもつベクトルで振動子の集合の状態を表すことができる。各振動子がそれぞれの周波数  $\omega_i$  で振動する場合には

$$\boldsymbol{\xi}(t) = \xi_1(0)e^{-i\omega_1 t} \mathbf{e}_1 + \xi_2(0)e^{-i\omega_2 t} \mathbf{e}_2 + \dots + \xi_n(0)e^{-i\omega_n t} \mathbf{e}_n \quad (3.5)$$

のようにベクトルが時間変化する。

### 3.3 フェーザと偏光

角周波数  $\omega$  で正弦振動する電圧  $v(t)$  は

$$\begin{aligned} v(t) &= V_0 \cos(\omega t + \phi) \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}} \left( \tilde{V} e^{-i\omega t} + \tilde{V}^* e^{i\omega t} \right) = \frac{1}{\sqrt{2}} \tilde{V} e^{-i\omega t} + \text{c.c.} \end{aligned} \quad (3.6)$$

のように複素数を用いて表現できる。ここで  $\tilde{V} = (V_0/\sqrt{2})e^{-i\phi}$  は複素振幅 (phasor) と呼ばれるものであり、(角周波数以外の) 正弦振動の情報 (振幅  $V_0$ , 位相  $\phi$ ) を含んでいる\*3)。ただし、c.c. は直前の項の複素共役 (complex conjugate) を示す。

振幅の2乗の時間平均値は

$$\begin{aligned} \langle v^2 \rangle &= \frac{1}{T} \int_0^T [v(t)]^2 dt \\ &= \frac{1}{2T} \int_0^T (\tilde{V} \tilde{V}^* + \tilde{V}^* \tilde{V} + \tilde{V}^2 e^{-2i\omega t} + \tilde{V}^{*2} e^{2i\omega t}) dt = \tilde{V}^* \tilde{V} \end{aligned} \quad (3.7)$$

でありパワーに比例する。ただし、 $T = 2\pi/\omega$  は周期である。

( $z$  方向に進行する) 光ビームの偏光状態は、式 (3.6) を参考にして、 $xy$  面内 ( $z = 0$ ) で振動する電場ベクトルを用いて

\*3) 通常、電気工学では  $v(t) = (1/\sqrt{2})\tilde{V}e^{j\omega t} + \text{c.c.}$  のように、式 (3.6) とは虚数単位の符号が異なる式でフェーザ  $\tilde{V}$  を定義することが多い。また、電流を表す  $i$  との衝突をさけて、虚数単位も  $i$  ではなく  $j$  を用いるのが慣習である。この2点の差異を一挙に解消するために、 $i = -j = \sqrt{-1}$  とおくのはよい考えである。数学では、添字  $i$  との衝突を恐れて、虚数単位を  $\sqrt{-1}$  と表す流儀もある。しかし、ISO にしたがって虚数単位をローマン体 (立体) で表記すれば、これらの衝突の心配はない。

$$\begin{aligned}\mathbf{E}(t) &= E_x \cos(\omega t + \phi_x) \mathbf{e}_x + E_y \cos(\omega t + \phi_y) \mathbf{e}_y \\ &= \frac{1}{2} \tilde{\mathbf{E}} e^{-i\omega t} + \text{c.c.}\end{aligned}\quad (3.8)$$

と表すことができ,  $E_x, E_y, \phi_x, \phi_y$  で決定される. ただし

$$\tilde{\mathbf{E}} = \tilde{E}_x \mathbf{e}_x + \tilde{E}_y \mathbf{e}_y, \quad \tilde{E}_x = E_x e^{-i\phi_x}, \quad \tilde{E}_y = E_y e^{-i\phi_y}.\quad (3.9)$$

2次元の複素ベクトル  $\tilde{\mathbf{E}}$  によって偏光状態が決定されている. 電場の2乗平均は

$$\langle |\mathbf{E}|^2 \rangle = \frac{1}{T} \int_0^T |\mathbf{E}(t)|^2 dt = \tilde{\mathbf{E}}^* \cdot \tilde{\mathbf{E}}\quad (3.10)$$

である.

このように偏光は2つのフェーズ  $\tilde{E}_x, \tilde{E}_y$  を成分にもつ2次元複素ベクトル  $\tilde{\mathbf{E}} \in \mathbb{C}^2$  で表され,  $\tilde{\mathbf{E}}$  の大きさ (の2乗) は式 (3.10) から  $\tilde{\mathbf{E}}^* \cdot \tilde{\mathbf{E}}$  と表すのが適当だと考えられる. さらに,  $\tilde{\mathbf{E}} = \tilde{\mathbf{E}}_1 + \tilde{\mathbf{E}}_2$  のとき

$$\tilde{\mathbf{E}}^* \cdot \tilde{\mathbf{E}} = \tilde{\mathbf{E}}_1^* \cdot \tilde{\mathbf{E}}_1 + \tilde{\mathbf{E}}_1^* \cdot \tilde{\mathbf{E}}_2 + \tilde{\mathbf{E}}_2^* \cdot \tilde{\mathbf{E}}_1 + \tilde{\mathbf{E}}_2^* \cdot \tilde{\mathbf{E}}_2\quad (3.11)$$

となることを考慮すると, 2つの複素ベクトルの内積を  $\tilde{\mathbf{E}}_1^* \cdot \tilde{\mathbf{E}}_2$  と定義するのがよいことが分る.

### 3.3.1 基底と基底変換

$x$  方向の偏光を水平 (H) 偏光,  $y$  方向の偏光を垂直 (V) 偏光と名付ける. 対応して, 基底ベクトル  $\{\mathbf{e}_H, \mathbf{e}_V\} := \{\mathbf{e}_x, \mathbf{e}_y\}$  とする.

具体的な偏光状態をいくつか考えてみよう.

$$\tilde{\mathbf{E}}_D = \frac{E_0}{\sqrt{2}} \mathbf{e}_H + \frac{E_0}{\sqrt{2}} \mathbf{e}_V = E_0 \mathbf{e}_D\quad (3.12)$$

は  $H$  偏光と  $V$  偏光を同じ重みで重ね合わせたものであり,  $45^\circ$  方向の偏光を表している. 同様に

$$\tilde{\mathbf{E}}_X = \frac{E_0}{\sqrt{2}} \mathbf{e}_H - \frac{E_0}{\sqrt{2}} \mathbf{e}_V = E_0 \mathbf{e}_X\quad (3.13)$$

は  $(-45^\circ)$  偏光である. ここで

$$\mathbf{e}_D = \frac{\mathbf{e}_H + \mathbf{e}_V}{\sqrt{2}}, \quad \mathbf{e}_X = \frac{\mathbf{e}_H - \mathbf{e}_V}{\sqrt{2}}\quad (3.14)$$

は  $\mathbf{e}_D \cdot \mathbf{e}_D = \mathbf{e}_X \cdot \mathbf{e}_X = 1$ ,  $\mathbf{e}_D \cdot \mathbf{e}_X = \mathbf{e}_X \cdot \mathbf{e}_D = 0$  を満しており正規直交基底になっている\*4). 式 (3.14) を逆に解けば

$$\mathbf{e}_H = \frac{\mathbf{e}_D + \mathbf{e}_X}{\sqrt{2}}, \quad \mathbf{e}_V = \frac{\mathbf{e}_D - \mathbf{e}_X}{\sqrt{2}}\quad (3.15)$$

\*4) 定義に忠実であるためには,  $\mathbf{e}_D^* \cdot \mathbf{e}_D$  などとすべきであるが, 今は  $\mathbf{e}_D^* = \mathbf{e}_D$  が成り立っている.

となる. 任意の偏光  $\tilde{\mathbf{E}}$  を

$$\tilde{\mathbf{E}} = \tilde{E}_H \mathbf{e}_H + \tilde{E}_V \mathbf{e}_V = \tilde{E}_D \mathbf{e}_D + \tilde{E}_X \mathbf{e}_X \quad (3.16)$$

のように両方の基底で表し, 式 (3.15) を代入すると, 成分の間には

$$\tilde{E}_D = \frac{\tilde{E}_H + \tilde{E}_V}{\sqrt{2}}, \quad \tilde{E}_X = \frac{\tilde{E}_H - \tilde{E}_V}{\sqrt{2}} \quad (3.17)$$

という関係が成り立っていることが分かる. 逆に解くと,

$$\tilde{E}_H = \frac{\tilde{E}_D + \tilde{E}_X}{\sqrt{2}}, \quad \tilde{E}_V = \frac{\tilde{E}_D - \tilde{E}_X}{\sqrt{2}}. \quad (3.18)$$

この例のように, 基底を変えると, それに応じて成分は変化する. 基底の選び方には任意性があるので, 成分も固定的に考えてはいけない. ベクトルは単に数の集まりではないので,  $\tilde{\mathbf{E}} = (\tilde{E}_H, \tilde{E}_V)$  と表すのは適切ではない. 式 (3.16) はたとえば,  $(\tilde{E}_H, \tilde{E}_V) = (\tilde{E}_D, \tilde{E}_X)$  となってしまうからである. 使用している基底が明らかな場合には,

$$\tilde{\mathbf{E}} \doteq (\tilde{E}_H, \tilde{E}_V) \quad (3.19)$$

のように, 等号 “=” の代わりに “ $\doteq$ ” を用いることにする.

### 3.3.2 複素基底

複素数としての性質があらわになる基底を考えよう. 偏光

$$\tilde{\mathbf{E}}_R = \frac{E_0}{\sqrt{2}} \mathbf{e}_H + \frac{iE_0}{\sqrt{2}} \mathbf{e}_V = E_0 \mathbf{e}_R \quad (3.20)$$

は  $x$  偏光と  $y$  偏光を位相を  $90^\circ$  ずらして, 同じ重みで重ね合わせたものであり, 右円偏光を表している. 同様に

$$\tilde{\mathbf{E}}_L = \frac{E_0}{\sqrt{2}} \mathbf{e}_H - \frac{iE_0}{\sqrt{2}} \mathbf{e}_V = E_0 \mathbf{e}_L \quad (3.21)$$

は左円偏光である. ベクトル

$$\mathbf{e}_R = \frac{\mathbf{e}_H + i\mathbf{e}_V}{\sqrt{2}}, \quad \mathbf{e}_L = \frac{\mathbf{e}_H - i\mathbf{e}_V}{\sqrt{2}} \quad (3.22)$$

はこれらの偏光に対応し,  $\mathbf{e}_R^* \cdot \mathbf{e}_R = \mathbf{e}_L^* \cdot \mathbf{e}_L = 1$ ,  $\mathbf{e}_R^* \cdot \mathbf{e}_L = \mathbf{e}_L^* \cdot \mathbf{e}_R = 0$  が成り立っている. すなわち,  $(\mathbf{e}_R, \mathbf{e}_L)$  は正規直交基底になっている. 式 (3.22) を逆に解けば

$$\mathbf{e}_H = \frac{\mathbf{e}_R + \mathbf{e}_L}{\sqrt{2}}, \quad \mathbf{e}_V = \frac{\mathbf{e}_R - \mathbf{e}_L}{\sqrt{2}i} \quad (3.23)$$

となる. 任意の偏光を

$$\tilde{\mathbf{E}} = \tilde{E}_H \mathbf{e}_H + \tilde{E}_V \mathbf{e}_V = \tilde{E}_R \mathbf{e}_R + \tilde{E}_L \mathbf{e}_L \quad (3.24)$$

表 3.2 波動/量子力学におけるヒルベルト空間の役割

ヒルベルト空間	波動/量子力学
線型性	波動の重ね合わせ
複素係数	波動の振幅と位相 (フェーズ)
多次元性	波動の自由度
基底の自由度 (変換性)	物理量の多様性, 非可換性
直交性	振動の独立性

のように両方の基底で表すと, 成分の間には

$$\tilde{E}_R = \frac{\tilde{E}_H + i\tilde{E}_V}{\sqrt{2}}, \quad \tilde{E}_L = \frac{\tilde{E}_H - i\tilde{E}_V}{\sqrt{2}} \quad (3.25)$$

という関係が成り立っている. さらに,

$$\tilde{E}_x = \frac{\tilde{E}_R + \tilde{E}_L}{\sqrt{2}}, \quad \tilde{E}_L = \frac{\tilde{E}_R - i\tilde{E}_L}{\sqrt{2}i} \quad (3.26)$$

**問題 3.1**  $\tilde{E}_R, \tilde{E}_L$  に対応する電場を実数で表現せよ.

### 3.4 ヒルベルト空間

これまで見てきたように,  $n$ -自由度の振動系を取り扱う場合, 複素振幅 (phasor) の一般化である複素ベクトルを用いるのが便利である (表 3.2).  $n$ -次元複素ベクトルの集合を  $\mathbb{C}^n$  で表す. ベクトル  $\mathbf{x}, \mathbf{y} \in \mathbb{C}^n$  の内積は  $\mathbf{x}^* \cdot \mathbf{y}$  のように定義するのが適当であることも理解できたであろう.

量子系も振動子の集まりとみなすことができ, 複素ベクトルで記述される. 量子力学の場合には, 関数がつくる線型空間のように自由度が無限大の場合も扱う必要があるので,  $\mathbb{C}^n$  を一般化したヒルベルト空間 (Hilbert space) という概念が用いられる. おおまかにいえば, ヒルベルト空間は複素数を係数にもつ (無限次元の場合を含む) 線形空間のことであり, 記号  $\mathcal{H}$  で表す.

複素線型空間のもつ最も基本的な性質は (複素数を係数として) 重ね合わせが成立することである. すなわち,

$$\psi_1, \psi_2 \in \mathcal{H}, \quad \xi_1, \xi_2 \in \mathbb{C} \quad \Rightarrow \quad \xi_1\psi_1 + \xi_2\psi_2 \in \mathcal{H} \quad (3.27)$$

が成り立つ.

複素線形空間では内積も複素数になる. これまで複素ベクトルの内積を  $\phi^* \cdot \psi$  のように表してきた. 一方, 関数空間に対する内積は  $\int_{-\infty}^{\infty} \phi^*(x)\psi(x)dx$  と定義される. ここではこれらを含む内積の一般記法として  $(\phi, \psi)$  を導入する. すなわち,

$$(\phi, \psi) = \phi^* \cdot \psi \quad (3.28)$$

この記法 (左辺) には複素共役が陽に現れないので注意する.

内積は次のような性質を満すものとする.

$$(\phi, \xi_1 \psi_1 + \xi_2 \psi_2) = \xi_1 (\phi, \psi_1) + \xi_2 (\phi, \psi_2) \quad (\text{線形性}) \quad (3.29)$$

$$(\psi, \phi) = (\phi, \psi)^* \quad (\text{対称性}) \quad (3.30)$$

線型性と対称性から,

$$(\eta_1 \phi_1 + \eta_2 \phi, \psi) = \eta_1^* (\phi_1, \psi) + \eta_2^* (\phi, \psi) \quad (3.31)$$

が導ける. 前半の引数  $\phi$  に対するこの性質を反線形性とよぶ場合がある.

$(\psi, \psi)$  は実であり,

$$(\psi, \psi) \geq 0 \quad (\text{正值性}) \quad (3.32)$$

が成り立つ. ただし, 等号は  $\psi = 0$  の場合に限る. ベクトルの長さ

$$\|\psi\| = \sqrt{(\psi, \psi)} \quad (3.33)$$

で定義される.

$(\phi, \psi) = 0$  の場合, これらのベクトルは直交していると考える.

### 3.5 ヒルベルト空間の次元と基底

与えられたヒルベルト空間  $\mathcal{H}$  において, まずゼロでないベクトルを 1 つ選び,  $\mathbf{a}_1$  とする. つぎに  $\mathbf{a}_1$  のスカラー倍で表せないようなベクトルを選び  $\mathbf{a}_2$  とする. つまり,  $\mathbf{a}_2 \neq c\mathbf{a}_1$  であるとする. さらに,  $c_1\mathbf{a}_1 + c_2\mathbf{a}_2$  の形で表せないベクトルを選び  $\mathbf{a}_3$  とおく. この手続きを繰り返して,  $\mathbf{a}_n$  を最後に, それ以上ベクトルが選べなくなったとする.  $n$  を  $\mathcal{H}$  の次元とよび,  $\dim \mathcal{H} = n$  と表す. 次元が無限になる場合もある. そのような場合にこそヒルベルト空間という数学的構造が活躍するのであるが, ここでは当面有限の場合だけを扱うことにする.  $n$ -次元のヒルベルト空間は  $\mathbb{C}^n$  のことだと思ってよい.

$n$  次元のヒルベルト空間内の任意のベクトル  $\psi$  は

$$\psi = c_1 \mathbf{a}_1 + c_2 \mathbf{a}_2 + \dots + c_n \mathbf{a}_n \quad (3.34)$$

のように表すことができる.

$n$  個の互いに直交する単位ベクトル  $\mathbf{e}_1, \dots, \mathbf{e}_n \in \mathcal{H}$  を考える.  $(\mathbf{e}_i, \mathbf{e}_j) = \delta_{ij}$ . これを正規直交基底という. ただし,

$$\delta_{ij} = \begin{cases} 1 & (i = j) \\ 0 & (i \neq j) \end{cases} \quad (3.35)$$

はクロネッカのデルタである.

**問題 3.2** 線形代数で習った, シュミットの直交化法を思い出して,  $\{\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2, \dots, \mathbf{a}_n\}$  から, 正規直交基底を作る手順を考えよ.

任意のベクトル  $\boldsymbol{\psi} \in \mathcal{H}$  は,

$$\boldsymbol{\psi} = \xi_1 \mathbf{e}_1 + \xi_2 \mathbf{e}_2 + \dots + \xi_n \mathbf{e}_n \quad (3.36)$$

のように展開できる. この性質を基底の完全性 (completeness) という. 展開係数は, 正規直交性を利用して

$$\xi_i = (\mathbf{e}_i, \boldsymbol{\psi}) \quad (3.37)$$

のように簡単に求めることができる. 実際,  $\boldsymbol{\psi} = \sum_{j=1}^n \xi_j \mathbf{e}_j$  に対して

$$(\mathbf{e}_i, \boldsymbol{\psi}) = \left( \mathbf{e}_i, \sum_{j=1}^n \xi_j \mathbf{e}_j \right) = \sum_{j=1}^n \xi_j (\mathbf{e}_i, \mathbf{e}_j) = \sum_{j=1}^n \xi_j \delta_{ij} = \xi_i \quad (3.38)$$

である.

### 3.6 成分と行列表示

2つのベクトル  $\boldsymbol{\psi}, \boldsymbol{\phi} \in \mathcal{H}$  が基底  $(\mathbf{e}_i)$  によって,

$$\boldsymbol{\psi} = \xi_1 \mathbf{e}_1 + \xi_2 \mathbf{e}_2 + \dots + \xi_n \mathbf{e}_n, \quad \xi_i = (\mathbf{e}_i, \boldsymbol{\psi}), \quad (3.39)$$

$$\boldsymbol{\phi} = \eta_1 \mathbf{e}_1 + \eta_2 \mathbf{e}_2 + \dots + \eta_n \mathbf{e}_n, \quad \eta_j = (\mathbf{e}_j, \boldsymbol{\phi}) \quad (3.40)$$

のように展開されているとする. 内積を計算すると,

$$\begin{aligned} (\boldsymbol{\phi}, \boldsymbol{\psi}) &= \left( \sum_{i=1}^n \eta_i \mathbf{e}_i, \sum_{j=1}^n \xi_j \mathbf{e}_j \right) = \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n \eta_i^* \xi_j (\mathbf{e}_i, \mathbf{e}_j) \\ &= \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n \eta_i^* \xi_j \delta_{ij} = \sum_{i=1}^n \eta_i^* \xi_i \end{aligned} \quad (3.41)$$

となる. 行列表記によって

$$(\boldsymbol{\phi}, \boldsymbol{\psi}) = [\eta_1^*, \eta_2^*, \dots, \eta_n^*] \begin{bmatrix} \xi_1 \\ \xi_2 \\ \vdots \\ \xi_n \end{bmatrix} \quad (3.42)$$

と表すこともできる. このことから, 式 (3.39), (3.40) を

$$\boldsymbol{\psi} \doteq \begin{bmatrix} \xi_1 \\ \xi_2 \\ \vdots \\ \xi_n \end{bmatrix}, \quad \boldsymbol{\phi} \doteq \begin{bmatrix} \eta_1 \\ \eta_2 \\ \vdots \\ \eta_n \end{bmatrix} \quad (3.43)$$

のように成分を用いたベクトル表示で書くこともできるが, 基底の情報が消えてしまうので注意が必要である. 注意を喚起するために, “=” の代わりに “ $\doteq$ ” を用いることにする. 行列の転置  $^T$  を用いて, 行列記法によって

$$(\boldsymbol{\phi}, \boldsymbol{\psi}) = \boldsymbol{\phi}^{*T} \boldsymbol{\psi} \quad (3.44)$$

と表すこともできる.

### 3.7 ブラとケット

ここで新しい記法を導入する. 内積を

$$(\boldsymbol{\phi}, \boldsymbol{\psi}) = \langle \boldsymbol{\phi} | \boldsymbol{\psi} \rangle \quad (3.45)$$

と表すことにする. ここで, 右辺の前半と後半部分を切り分けて, 前半部分を  $\langle \boldsymbol{\phi} |$  をブラ (bra), 後半部分を  $|\boldsymbol{\psi}\rangle$  をケット (ket) と呼ぶことにする. これは「かぎかっこ」(bracket) “ $\langle, \rangle$ ” を “bra”, “c”, “ket” に分解するという言葉の遊びである<sup>\*5)</sup>. ケット  $|\boldsymbol{\psi}\rangle$  はそれ自体でベクトル  $\boldsymbol{\psi}$  を表すものとする. したがって, 中身の  $\boldsymbol{\psi}$  は太文字で書くことはしない. ディラックによって考えだされたこの記法は大変便利なものであるが, あまりに洗練されているために, 慣れるのに少し時間がかかると思われる. ここでは, これまでの記法を混在させ, 徐々にブラケットに馴染むようにする. (ブラだけを独立に  $\langle \boldsymbol{\psi} |$  のように用いたり, 逆向きの対  $|\boldsymbol{\psi}\rangle \langle \boldsymbol{\phi} |$  を用いたりするが, これらについては後ほど述べる.) ケットを用いると, 式 (3.36), (3.37) は

$$|\boldsymbol{\psi}\rangle = \xi_1 |e_1\rangle + \xi_2 |e_2\rangle + \dots + \xi_n |e_n\rangle, \quad \xi_i = \langle e_i | \boldsymbol{\psi} \rangle \quad (3.46)$$

式 (3.41) は

$$\langle \boldsymbol{\phi} | \boldsymbol{\psi} \rangle = \sum_{i=1}^n \eta_i^* \xi_i \quad \xi_i = \langle e_i | \boldsymbol{\psi} \rangle \quad (3.47)$$

と表すことができる. ただし,  $\eta_i = \langle e_i | \boldsymbol{\psi} \rangle$  である.

一般の偏光状態は

$$\tilde{\boldsymbol{E}} = \tilde{E}_H \boldsymbol{e}_H + \tilde{E}_V \boldsymbol{e}_V \quad (3.48)$$

\*5) 有名なシュレディンガー音頭はブラとケットの使いかたを体感するのに有効である.

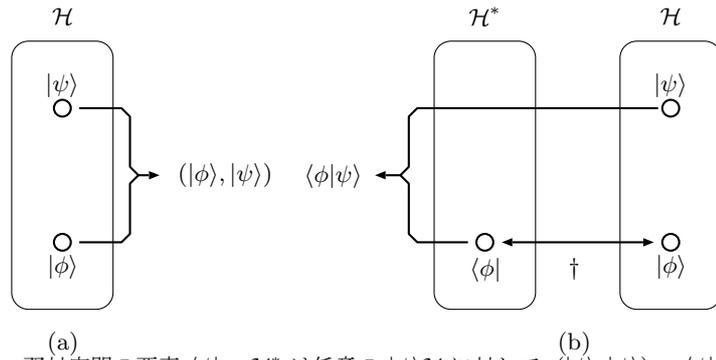


図 3.1 双対空間の要素  $\langle \phi | \in \mathcal{H}^*$  は任意の  $|\psi\rangle \in \mathcal{H}$  に対して、 $(|\phi\rangle, |\psi\rangle) = \langle \phi | \psi \rangle$  が成り立つものとして定義されている。

と表せるが、ケットを用いて、

$$|E\rangle = \tilde{E}_H |H\rangle + \tilde{E}_V |V\rangle \quad (3.49)$$

と表すことができる。  $|H\rangle, |V\rangle$  は水平、垂直偏光に対応する基底ケットである\*6)。  $45^\circ$  偏光、  $(-45^\circ)$  偏光に対する基底は

$$|D\rangle = \frac{|H\rangle + |V\rangle}{\sqrt{2}}, \quad |X\rangle = \frac{|H\rangle - |V\rangle}{\sqrt{2}} \quad (3.50)$$

さらに、右偏光、左偏光の基底は

$$|R\rangle = \frac{|H\rangle + i|V\rangle}{\sqrt{2}}, \quad |L\rangle = \frac{|H\rangle - i|V\rangle}{\sqrt{2}} \quad (3.51)$$

**問題 3.3** 基底  $(|D\rangle, |X\rangle), (|R\rangle, |L\rangle)$  がそれぞれ正規直交であることを示せ。

式 (3.49) における、  $\tilde{E}_H, \tilde{E}_V$  などの電場フェーズを確率振幅に置き換えると、光子の偏光を表すケットと解釈することができる：

$$|\psi\rangle = \xi_H |H\rangle + \xi_V |V\rangle, \quad |\xi_H|^2 + |\xi_V|^2 = 1. \quad (3.52)$$

$|\xi_H|^2, |\xi_V|^2$  は光子をそれぞれの状態に見出す確率を与える。

### 3.8 線形汎関数, 双対空間, ブラ

ブラケット記法  $\langle \phi | \psi \rangle$  は、もともと内積の記号  $(\phi, \psi)$  あるいは  $(\phi, \psi)$  から派生したものであるが、後半部分  $|\psi\rangle$  を独立させて、ベクトルの意味で使うことにしている。ここでは、さらに、前半部  $\langle \phi |$  に独立の意味を付与する。

まず、ベクトル  $|\psi\rangle \in \mathcal{H}$  にたいして、複素数  $\phi(|\psi\rangle) \in \mathbb{C}$  を線形的に対応さ

\*6) ケットやブラの中身を自由に工夫できるのも、この記法のメリットである：

$$|\text{シュレディンガーの猫}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\heartsuit\rangle + |\spadesuit\rangle).$$

せることを考える. すなわち, 任意の  $|\psi_1\rangle, |\psi_2\rangle \in \mathcal{H}$ ,  $c_1, c_2 \in \mathbb{C}$  に対して

$$\phi(c_1|\psi_1\rangle + c_2|\psi_2\rangle) = c_1\phi(|\psi_1\rangle) + c_2\phi(|\psi_2\rangle) \quad (3.53)$$

が成り立つとする. このような,  $\mathcal{H}$  から  $\mathbb{C}$  への写像  $\phi(\square)$  を線形汎関数という\*7). 線形性より,  $|\psi\rangle = \sum_i \xi_i |e_i\rangle$  に対して  $\phi(|\psi\rangle) = \sum_i \xi_i \phi(|e_i\rangle)$  が成り立つので,  $n$  個の複素数  $\zeta_i = \phi(|e_i\rangle)$  ( $i = 1, 2, \dots, n$ ) によって,  $\phi(\square)$  の作用はきまる. また,

$$\phi(|\psi\rangle) = \sum_{i=1}^n \zeta_i \xi_i = [\zeta_1, \zeta_2, \dots, \zeta_n] \begin{bmatrix} \xi_1 \\ \xi_2 \\ \vdots \\ \xi_n \end{bmatrix} \quad (3.54)$$

と表すこともできるので,  $|\psi\rangle$  を列ベクトル,  $\phi(\square)$  を行ベクトルと考えてもよい. すなわち,

$$|\psi\rangle \doteq \begin{bmatrix} \xi_1 \\ \xi_2 \\ \vdots \\ \xi_n \end{bmatrix}, \quad \xi_i = (|e_i\rangle, |\psi\rangle) = \langle e_i | \psi \rangle,$$

$$\phi(\square) \doteq [\zeta_1, \zeta_2, \dots, \zeta_n], \quad \zeta_i = \phi(|e_i\rangle). \quad (3.55)$$

線形汎関数の和とスカラー倍を

$$(\phi_1 + \phi_2)(|\psi\rangle) = \phi_1(|\psi\rangle) + \phi_2(|\psi\rangle),$$

$$(c\phi)(|\psi\rangle) = c\phi(|\psi\rangle) \quad (3.56)$$

で定義することができる. ただし,  $c \in \mathbb{C}$ . このように定義される和とスカラー倍によって  $\mathcal{H}$  上の線形汎関数全体は線形空間をつくる. これを  $\mathcal{H}$  の双対空間といい,  $\mathcal{H}^*$  と表す.  $\mathcal{H}$  が有限次元の場合は,  $\mathcal{H}^*$  も同じ次元をもつ. さらに,  $(\mathcal{H}^*)^* = \mathcal{H}$  である.

任意の  $|\phi\rangle \in \mathcal{H}$  は

$$\phi(\square) = (|\phi\rangle, \square) \quad (3.57)$$

によって線形汎関数  $\phi(\square) \in \mathcal{H}^*$  を定義する. つまり, 内積の一方の要素を固定することで, 汎関数が得られる.

逆に任意の  $\phi(\square) \in \mathcal{H}^*$  について,  $|\phi\rangle \in \mathcal{H}$  がただひとつ存在して

$$\phi(|\psi\rangle) = (|\phi\rangle, |\psi\rangle) \quad (3.58)$$

\*7)  $\mathcal{H}$  から  $\mathcal{H}$  への写像が演算子,  $\mathcal{H}$  から  $\mathbb{C}$  への写像が汎関数である.

が成り立つ. これは有限次元の場合には容易に示すことができる.  $f_i := \phi(|e_i\rangle)$  とし,  $|\phi\rangle := \sum_i f_i^* |e_i\rangle$  と定義すればよい. すると, 式 (3.58) の左辺は  $\phi(|\psi\rangle) = \phi(\sum_i \xi_i |e_i\rangle) = \sum_i \xi_i f_i$ , 右辺は  $(\sum_i f_i^* |e_i\rangle, |\psi\rangle) = \sum_i f_i (|e_i\rangle, |\psi\rangle) = \sum_i f_i \xi_i$  となり, 任意の  $|\psi\rangle$  について互いに等しくなる. 結局,  $\mathcal{H}$  の要素  $|\phi\rangle$  と  $\mathcal{H}^*$  の要素の  $\phi(\sqcup)$  間には 1 対 1 の対応が成り立っている. これを,

$$\phi(\sqcup) \overset{\dagger}{\leftrightarrow} |\phi\rangle \quad (3.59)$$

と書くことにする.

$\phi_1(\sqcup) \overset{\dagger}{\leftrightarrow} |\phi_1\rangle, \phi_2(\sqcup) \overset{\dagger}{\leftrightarrow} |\phi_2\rangle$  が成り立っている場合,

$$c_1\phi_1(\sqcup) + c_2\phi_2(\sqcup) \overset{\dagger}{\leftrightarrow} c_1^*|\phi_1\rangle + c_2^*|\phi_2\rangle \quad (3.60)$$

であることに注意する.

ここで,  $\phi(|\psi\rangle) = (|\phi\rangle, |\psi\rangle) = \langle\phi|\psi\rangle$  の両辺を見比べることによって,

$$\langle\phi| = \phi(\sqcup) \in \mathcal{H}^* \quad (3.61)$$

と定義する. つまり, ブラ  $\langle\phi|$  を双対空間  $\mathcal{H}^*$  の要素であると考えるのである.

任意の  $|\psi\rangle \in \mathcal{H}$  に対して  $\langle\phi_1|\psi\rangle = \langle\phi_2|\psi\rangle$  が成り立てば,  $\langle\phi_1| = \langle\phi_2|$  であるとする.

ブラとケットの対応  $|\phi\rangle \overset{\dagger}{\leftrightarrow} \langle\phi|$  を

$$(|\phi\rangle)^\dagger = \langle\phi|, \quad \text{あるいは,} \quad (\langle\phi|)^\dagger = |\phi\rangle \quad (3.62)$$

と表す.

$$\begin{aligned} (c_1|\phi_1\rangle + c_2|\phi_2\rangle)^\dagger &= c_1^*\langle\phi_1| + c_2^*\langle\phi_2|, \\ (c_1\langle\phi_1| + c_2\langle\phi_2|)^\dagger &= c_1^*|\phi_1\rangle + c_2^*|\phi_2\rangle \end{aligned} \quad (3.63)$$

が成り立つことに注意する. 行列表示での対応は

$$[\eta_1^*, \dots, \eta_m^*] \overset{\dagger}{\leftrightarrow} \begin{bmatrix} \eta_1 \\ \vdots \\ \eta_m \end{bmatrix} \quad (3.64)$$

となる. 複素数の内積に対する関係  $(|\phi\rangle, |\psi\rangle) = (|\psi\rangle, |\phi\rangle)^*$ , すなわち,  $\langle\phi|\psi\rangle = \langle\psi|\phi\rangle^*$  は

$$(\langle\phi|\psi\rangle)^\dagger = (|\psi\rangle)^\dagger (\langle\phi|)^\dagger = \langle\psi|\phi\rangle \quad (3.65)$$

と表すことができる. 数  $c$  に対する作用を  $c^\dagger = c^*$  と定義しておけばよいことが分かる.

### 3.9 双対基底

$\mathcal{H}$  の基底  $\{|e_i\rangle\}$  の各ケットに対して

$$\langle e_i| = e_i(\sqcup) = (|e_i\rangle, \sqcup) \in \mathcal{H}^* \quad (3.66)$$

を定義できる.  $\langle e_i|e_j\rangle = \delta_{ij}$  であることはすぐ分かる. ブラを集まり  $\{\langle e_i|\}$  を双対基底という. 任意の  $\langle\phi| \in \mathcal{H}^*$  は双対基底で展開できる:

$$\langle\phi| = \zeta_1\langle e_1| + \zeta_2\langle e_2| + \cdots + \zeta_n\langle e_n|, \quad \zeta_i = \langle\phi|e_i\rangle. \quad (3.67)$$

### 3.10 比較

内積  $(|\phi\rangle, |\psi\rangle)$  は2つのケット  $|\phi\rangle \in \mathcal{H}$  と  $|\psi\rangle \in \mathcal{H}$  に対して定義されるものである [図 3.1(a)]. 一方, ブラケット  $\langle\phi|\psi\rangle$  は,  $\langle\phi| \in \mathcal{H}^*$  と  $|\psi\rangle \in \mathcal{H}$  の間の演算である [図 3.1(b)]. この2つのスカラーが任意の  $|\psi\rangle$  に対して等しくなるように,  $\langle\phi|$  と  $|\phi\rangle$  が対応づけられている.

一見すると, 双対空間やブラの導入は事態を複雑化しているように思えるが, 実際には, 計算を簡単化するのに非常に役立っている.

