量子力学ノート

高柳　旋

2025 年 11 月 17 日

はじめに

このノートは、私が量子力学を学ぶ中で疑問に感じたことや行間が広いと思った部分を埋めて、その先に広がる物理学へ滑らかにつなげることを目的として書きました。

量子力学についてあまり詳しくない方がこのノートをテキスト代わりに使うことは、できるとは思いますがおすすめはしません。なぜなら私の好みのトピックしか載せていないからです。あくまで私の量子力学への理解の過程を眺めていただき、読者の方の新たな思考を生むものでありたいと思っています。

また、参考にした全ての文献を掲載することができていませんし、本当に正しい議論をしている自身が無いので、このノートをあなたの主張を強化するために引用することは控えてもらいたいです。色々な部分に対して懐疑的になりながら読み進めてもらうことをお勧めします。

前提知識として要求されるのは線形代数と微分積分、古典力学・古典電磁気学だと思っています。集合論における初歩的な記号の使い回しも知っていると読みやすいです。

また初学者にとって難しそうな部分には ★ の印をつけてあるので、飛ばして読んでも差し支えません。

目次

記号の意味

- $\mathbb{N} = \{0, 1, 2, ...\}$ =（自然数全体の集合）
- $\mathbb{Z}$ =（整数全体の集合）
- $\mathbb{R}$ =（実数全体の集合）
- $\mathbb{R}^3$ =（3 次元ユークリッド空間）
- $\mathbb{C}$ =（複素数全体の集合）
- $z \in \mathbb{C}$: z は $\mathbb{C}$ に属する
- $a \coloneqq b$: a を b で定義する
- $\boldsymbol{v}$ ：ベクトル（bold 表記）
- $\vec{\boldsymbol{v}}$ ：ベクトル（arrow 表記）（どちらの表記も 3 次元ベクトルを表すことにする）
- $\boldsymbol{v} \cdot \boldsymbol{v}$ ：ベクトルの内積
- $|\boldsymbol{v}| \coloneqq \sqrt{\boldsymbol{v} \cdot \boldsymbol{v}}$ ：ベクトルの絶対値
- $\mathrm{Re}\, c$ ：c の実部
- $\mathrm{Im}\, c$ ：c の虚部
- c^* ：c の複素共役
- $|c| \coloneqq \sqrt{c^* c}$ ：c の絶対値

コラム

これはコラムを書くときの箱です。
コラムには本文に書かれなかった発展的な内容および式の証明、もしくは私の体験談を載せます。

公式

これは定義・定理・公式を書くときの箱です。
式変形が苦手な人は、この箱だけを追って行けば大体の内容は掴めます。

要請

これは要請を書くときの箱です。
要請とは、物理の理論を構築する上で仮定する必要がある事柄で、自然現象から類推できるものを指します。

第 1 章

量子力学の基礎

この章では量子力学の理論構造についての最低限をまとめた。
1.1,1.2 は理論の土台となるヒルベルト空間について説明する。
ヒルベルト空間に物理的要請をいくつか足すことで量子力学の理論を展開する。1.3 で確率解釈と測定の原理を要請して、1.4 で位置・運動量演算子や波動関数が導入される。
1.5 では物理量の非可換性に由来する量子効果を説明する。
1.6 では複合系を導入し、ここで粒子の不可別弁性を要請する。
1.7 では粒子の内部自由度としてスピンを要請する。

1.1　ヒルベルト空間とブラケット

1.1.1　ヒルベルト空間の公理

量子力学では、粒子の状態をベクトルに対応させる。このような状態を表すベクトルを**ケット**と呼び、記号 $|\psi\rangle$ で表す。ケット全体の集合を**ヒルベルト空間**と呼び、記号 $\mathscr{H}$ と表す。$\mathscr{H}$ が満たすべき性質（公理）は次のようである。

ヒルベルト空間の公理

$\mathscr{H}$ がヒルベルト空間であるとは、$\mathscr{H}$ が

- $\mathbb{C}$ (or $\mathbb{R}$) 上のベクトル空間であり、
- 内積を有しており、
- 内積から定められるノルムについて完備である。

という性質を満たすということである。

各性質について詳しく説明する。$\mathscr{H}$ が $\mathbb{C}$ 上のベクトル空間であるというのは、線形代数における複素ベクトル空間の定義と同じである。それらを詳しく書き下すと以下のようになる。

$\mathbb{C}$ 上ベクトル空間の公理

$\mathscr{H}$ が $\mathbb{C}$ 上のベクトル空間であるとは、次の 1. と 2. を満たすということである。

1. $\mathscr{H}$ の任意の 2 元 $|\psi_1\rangle , |\psi_2\rangle$ に対して、和 $|\psi_1\rangle + |\psi_2\rangle \in \mathscr{H}$ が定まり、次の法則を満たす：
   (1) $(|\psi_1\rangle + |\psi_2\rangle) + |\psi_3\rangle = |\psi_1\rangle + (|\psi_2\rangle + |\psi_3\rangle)$
   (2) $|\psi_1\rangle + |\psi_2\rangle = |\psi_2\rangle + |\psi_1\rangle$
   (3) 零ケット $0 \in \mathscr{H}$ が存在して、任意の $|\psi\rangle \in \mathscr{H}$ に対して、
   $|\psi\rangle + 0 = 0 + |\psi\rangle = |\psi\rangle$
   が成り立つ。
   (4) 任意の $|\psi\rangle \in \mathscr{H}$ に対して、$|\psi'\rangle \in \mathscr{H}$ が存在して、
   $|\psi\rangle + |\psi'\rangle = |\psi'\rangle + |\psi\rangle = 0$
   が成り立つ。このような $|\psi'\rangle$ を $-|\psi\rangle$ と書く。
2. 任意の $|\psi\rangle \in \mathscr{H}$ と任意の $a \in \mathbb{C}$ に対して、スカラー倍 $a|\psi\rangle \in \mathscr{H}$ が定まり、次の法則を満たす：
   (5) $(a+b)|\psi\rangle = a|\psi\rangle + b|\psi\rangle$
   (6) $a(|\psi_1\rangle + |\psi_2\rangle) = a|\psi_1\rangle + a|\psi_2\rangle$
   (7) $(ab)|\psi\rangle = a(b|\psi\rangle)$
   (8) $1 \in \mathbb{C}$ に対して、$1|\psi\rangle = |\psi\rangle$

次は内積を定めて、それが満たすべき条件を書き下す。ヒルベルト空間の条件である「内積を有している」というのは、任意の $|\xi\rangle , |\psi\rangle \in \mathscr{H}$ に対して、

$$\langle\xi|\psi\rangle \in \mathbb{C}$$

を与えるような写像が存在して、以下に示す内積の公理を満たすということである。

内積の公理

任意の $|\xi\rangle , |\psi\rangle \in \mathscr{H}$ に対して、定められた内積 $\langle\xi|\psi\rangle$ は次の条件を満たす。

(1) $\langle\xi|(|\psi_1\rangle + |\psi_2\rangle) = \langle\xi|\psi_1\rangle + \langle\xi|\psi_2\rangle$（線形性）
(2) $\langle c\xi|\psi\rangle = c^* \langle\xi|\psi\rangle$
ただし $\langle c\xi| := (c|\xi\rangle)^\dagger$ とする。
(3) $\langle\xi|\psi\rangle = (\langle\psi|\xi\rangle)^*$
右辺は今後は $\langle\psi|\xi\rangle^*$ と表記する。
(4) $\langle\psi|\psi\rangle \geq 0$ であり、等号成立は $|\psi\rangle = 0$ に限る（正値性）

内積の公理 (4) で不等号が出てくるのは、(3) より

$$\langle\psi|\psi\rangle = \langle\psi|\psi\rangle^*$$

となり、$\langle\psi|\psi\rangle$ が実数となるためである。

最後にヒルベルト空間の公理の 3 つ目である完備性について説明する。この条件は状態ケットのノルムの良い収束性を与えるものである。しかし完備性は後の議論に直接的には効いてこないので簡潔に紹介する。

ケット $|\psi\rangle$ の**ノルム** $\||\psi\rangle\|$ を、

$$\||\psi\rangle\| \coloneqq \sqrt{\langle\psi|\psi\rangle}$$

で定義する。したがってノルムは 0 以上の実数となる。このノルムを用いて極限[*1] を定義できる。ケットの列、

$$\{|\psi_n\rangle\}_{n\in\mathbb{N}} \coloneqq \{|\psi_1\rangle, |\psi_2\rangle, |\psi_3\rangle, ...\}$$

が、$|\psi\rangle$ に収束することを、

$$\lim_{n\to\infty} \||\psi_n\rangle - |\psi\rangle\| = 0$$

と表す。このとき、$\{|\psi_n\rangle\}_{n\in\mathbb{N}}$ の極限は $|\psi\rangle$ であるという。また、収束する列のことを**収束列**という。

また、ケットの列 $\{|\psi_n\rangle\}_{n\in\mathbb{N}}$ が**コーシー列**であるとは、任意の $|\psi_k\rangle, |\psi_l\rangle \in \{|\psi_n\rangle\}_{n\in\mathbb{N}}$ に対して、

$$\lim_{k,l\to\infty} \||\psi_k\rangle - |\psi_l\rangle\| = 0$$

を満たすということである。コーシー列というのは、番号が大きくなるにつれて互いに近づきあうようなベクトルの列のことである。収束列は必ずコーシー列となることを示すことができる[*2]。以上の定義を用いて**完備性**は以下のように書ける。

完備性

> $\mathscr{H}$ が完備であるとは、$\mathscr{H}$ の任意のコーシー列 $\{|\psi_n\rangle\}_{n\in\mathbb{N}}$ に対して、極限値 $|\psi\rangle \in \mathscr{H}$ が存在するということである。

完備性の条件を簡潔に言えば、$\mathscr{H}$ 上の列がコーシー列ならば収束列となる、ということである。この条件により、互いに近づきあうケットの列の収束先がケットと同じ空間に存在することが保証される。

完備でない空間として有理数体 $\mathbb{Q}$ を挙げる。その理由は $\sqrt{2} \notin \mathbb{Q}$ に近づくようなコーシー列 $1.4, 1.41, 1.414, ...$ を $\mathbb{Q}$ 内で構成できてしまうためである。$\mathbb{Q}$ を完備性を満たすように拡張した空間が $\mathbb{R}$ である。従って $\mathbb{R}$ はヒルベルト空間である。$\mathbb{R}$ を成分にもつような d 次元ユークリッド空間 $\mathbb{R}^d$ は、その標準内積についてヒルベルト空間である。複素数を成分に持つ d 次元の数ベクトル空間 $\mathbb{C}^d$ もヒルベルト空間である。また、後に議論するが、良い収束性の条件（絶対二乗可積分）を有する関数の集合もヒルベルト空間である。こうして、色々な空間がヒルベルト空間として扱わ

[*1] ノルムから距離位相が定まるため、極限を定義できる。

[*2] 三角不等式を用いた以下の関係を使えば示せる。任意の $k, l \in \mathbb{N}$ について $\||\psi_k\rangle - |\psi\rangle\| < \epsilon, \||\psi_l\rangle - |\psi\rangle\| < \epsilon$ が成り立つならば、$\||\psi_k\rangle - |\psi_l\rangle\| < \||\psi_k\rangle - |\psi\rangle\| + \||\psi\rangle - |\psi_l\rangle\| < 2\epsilon$

れ、その上で量子力学が展開されることになる。その中で代表的な表記としてベクトルを $|\psi\rangle$、空間を $\mathscr{H}$ と書く表記を用いることにするが、適宜具体的な数ベクトル等に置き換えてもらいたい。

さて、ここで $\langle\xi|$ を任意の $|\psi\rangle \in \mathscr{H}$ を $\langle\xi|\psi\rangle \in \mathbb{C}$ へ移す写像と見なすことにする。内積の公理から $\langle\xi|$ は線形写像であることが分かり、$\langle\xi|$ の全体はベクトル空間を成すことが分かる。このベクトル空間は内積の公理によって自然に内積を備えているので、$\mathbb{C}$ 上の計量ベクトル空間であることも導き出せる。下で説明するが、この内積から定められるノルムによって $\mathscr{H}$ は完備であるので、$\langle\xi|$ を集めた集合も完備となり、ヒルベルト空間 $\mathscr{H}$ と同じ構造を持つ。また、$|\psi\rangle \in \mathscr{H}$ と $\langle\psi|$ は一対一の対応関係が付けられる[*3]ことも証明することができる。そのような一対一写像を、

$$\dagger : |\psi\rangle \to |\psi\rangle^\dagger \coloneqq \langle\psi|$$

と定めて、**エルミート共役**と呼ぶことにする。すなわち $|\psi\rangle$ のエルミート共役を $|\psi\rangle^\dagger$（または $\langle\psi|$）と書くことにする。$\langle\psi|$ は**ブラ**と呼ばれ、ブラ全体の集合は**ブラ空間**と呼ばれる。これに対応させてケット全体の集合を**ケット空間**と呼ぶこともある。ケット空間が $\mathscr{H}$ で表されている場合、対応するブラ空間は $\mathscr{H}^\dagger$ と書く。従って、内積が満たすべき公理というのは、エルミート共役という操作が満たすべき公理も与えている。

いくつか言葉の定義を述べる。$|\xi\rangle, |\psi\rangle \in \mathscr{H}$ が $\langle\xi|\psi\rangle = 0$ を満たすとき、$|\xi\rangle$ と $|\psi\rangle$ は**直交**しているという。$|\psi\rangle$ とその定数倍である $c\,|\psi\rangle$ は同じ向きを持つ、もしくは**平行**であるという。$\||\psi\rangle\| = 1$ を満たすケット $|\psi\rangle$ のことを規格化されたケットと呼ぶ。また、ノルムが 1 でないケット $|\xi\rangle$ は、

$$|\psi\rangle \coloneqq \frac{1}{\sqrt{\langle\xi|\xi\rangle}}\,|\xi\rangle$$

のように定数倍することで、

$$\begin{aligned}\||\psi\rangle\| &= \sqrt{\langle\psi|\psi\rangle} \\ &= \sqrt{\frac{1}{\sqrt{\langle\xi|\xi\rangle}}\,\langle\xi|\,\frac{1}{\sqrt{\langle\xi|\xi\rangle}}\,|\xi\rangle} \\ &= 1\end{aligned}$$

となりノルムを 1 にすることができる。このような操作を**規格化**といい、規格化のためにかけられた定数を規格化因子という。

1.1.2　双対対応

ケット $|\psi\rangle \in \mathscr{H}$ のエルミート共役を取ることで対応するブラ $\langle\psi| \in \mathscr{H}^\dagger$ が与えられるのだった。逆にブラのエルミート共役を取れば対応するケットが得られる。このような $\mathscr{H}$ の元と $\mathscr{H}^\dagger$の元 との対応関係を本ノートでは**双対対応**と呼び、記号 $\longleftrightarrow$ で表す。このとき $\mathscr{H}^\dagger$ は $\mathscr{H}$ の**双対空間**と呼ばれる。双対空間の数学的定義は以下のようである。

[*3] 有限次元においては一対一対応が付く。無限次元での扱いは勉強不足により分からない。

定義：双対空間

$\mathbb{C}$ 上ベクトル空間 V がある。双対空間 V^* とは、

$$V^* := \{ f : V \to \mathbb{C} \mid f \text{ は線形写像 } \}$$

のことである。

双対対応（すなわちエルミート共役）が満たすべき条件は内積の公理によって既に示されているが、少し書き方を変えて列挙してみる。

双対対応

$$\begin{aligned} \mathscr{H} &\longleftrightarrow \mathscr{H}^\dagger \\ |\psi\rangle &\longleftrightarrow \langle\psi| \\ |\psi\rangle + |\xi\rangle &\longleftrightarrow \langle\psi| + \langle\xi| \\ c\,|\psi\rangle &\longleftrightarrow \langle\psi|\, c^* \end{aligned}$$

左側に書いたケットは $\mathscr{H}$ の元であり、右側に書いたブラは $\mathscr{H}^\dagger$ の元である。

このようにケットの性質を知りたいときに双対対応で一旦ブラ空間に移して式変形し、再度ケット空間に戻すというようなことが可能である。あるケット同士の内積を知りたいときは、片方のケットの双対対応を取りもう片方のケットに掛けることで求められるのである。

ヒルベルト空間の公理に慣れてもらうために、公理からただちに導かれる**コーシー・シュワルツの不等式**の証明を行う。

$|\phi\rangle := |\psi\rangle - c\,|\xi\rangle$ とする。ここで $|\psi\rangle , |\xi\rangle$ は任意のケットであり、c は任意の複素数である。$|\phi\rangle$ の双対対応をとって、$\langle\phi|\phi\rangle$ を求めてみよう。

$$\langle\phi| = \langle\psi| - \langle\xi|\, c^*$$

であるから、内積の公理より、

$$\begin{aligned} \langle\phi|\phi\rangle &= (\langle\psi| - \langle\xi|\, c^*)(|\psi\rangle - c\,|\xi\rangle) \\ &= \langle\psi|\psi\rangle - c\,\langle\psi|\xi\rangle - c^*\,\langle\xi|\psi\rangle + |c|^2\,\langle\xi|\xi\rangle \\ &\geq 0 \end{aligned}$$

が成り立つ。等号は、$|\phi\rangle = 0$ すなわち $|\psi\rangle = c\,|\xi\rangle$ なる c が存在する時である。ここで、$c = \frac{\langle\xi|\psi\rangle}{\langle\xi|\xi\rangle}$ と置くと、任意の $|\psi\rangle , |\xi\rangle$ に対して、

$$\begin{aligned} \langle\phi|\phi\rangle &= \langle\psi|\psi\rangle - \frac{\langle\xi|\psi\rangle}{\langle\xi|\xi\rangle}\,\langle\psi|\xi\rangle - \frac{\langle\xi|\psi\rangle^*}{\langle\xi|\xi\rangle}\,\langle\xi|\psi\rangle + \left|\frac{\langle\xi|\psi\rangle}{\langle\xi|\xi\rangle}\right|^2\,\langle\xi|\xi\rangle \\ &= \langle\psi|\psi\rangle - \frac{|\langle\xi|\psi\rangle|^2}{\langle\xi|\xi\rangle} \\ &\geq 0 \end{aligned}$$

が成り立ち、したがって、

$$
\begin{aligned}
\langle\psi|\psi\rangle &\geq \frac{|\langle\xi|\psi\rangle|^2}{\langle\xi|\xi\rangle} \\
\langle\psi|\psi\rangle\langle\xi|\xi\rangle &\geq |\langle\xi|\psi\rangle|^2
\end{aligned}
$$

が成り立つことが分かる。等号は $|\psi\rangle, |\xi\rangle$ が平行となる時に成立する。

コーシー・シュワルツの不等式

任意の $|\psi\rangle, |\xi\rangle$ に対して、

$$\langle\psi|\psi\rangle\langle\xi|\xi\rangle \geq |\langle\xi|\psi\rangle|^2 \tag{1.1}$$

が成り立つ。等号成立はある複素数 c が存在して、$|\psi\rangle = c|\xi\rangle$ となる時である。

また、二つのケット $|\psi\rangle$ と $|\xi\rangle$ が等しいことは、任意の $|\chi\rangle \in \mathscr{H}$ において、

$$\langle\chi|\psi\rangle = \langle\chi|\xi\rangle$$

が成り立つことと同値である。十分条件だけを示す。次のように式変形して、

$$\langle\chi|(|\psi\rangle - |\xi\rangle) = 0$$

任意に選べる $|\chi\rangle$ を $|\psi\rangle - |\xi\rangle$ とおく。すると、

$$(\langle\psi| - \langle\xi|)(|\psi\rangle - |\xi\rangle) = 0$$

となり、内積の公理 (4) より、$|\psi\rangle - |\xi\rangle = 0$、すなわち $|\psi\rangle = |\xi\rangle$ がいえる。

1.1.3 基底

最後にヒルベルト空間 $\mathscr{H}$ の基底について説明する。$\mathscr{H}$ のケットの組

$$\{|\psi_n\rangle\} := \{|\psi_1\rangle, |\psi_2\rangle, ...\}$$

を考える。$\{|\psi_n\rangle\}$ の**線形結合**とは、

$$\sum_n c_n|\psi_n\rangle := c_1|\psi_1\rangle + c_2|\psi_2\rangle + \dots$$

のように、ケットを定数倍して足し合わせたもののことを指す。
$\{|\psi_n\rangle\}$ が**一次独立**であるとは、

$$\sum_n c_n|\psi_n\rangle = c_1|\psi_1\rangle + c_2|\psi_2\rangle + \cdots = 0$$

を満たすような複素数 $c_1, c_2, \ldots$ が、

$$c_1 = c_2 = \cdots = 0$$

に限られるということである。添字 n の範囲は有限でも無限でもよい。一次独立でないことを**一次従属**という。すなわち、0 でない複素数 c_k が存在して (1.2) の等式が成り立つことである。このとき、c_kを掛けられているケット $|\psi_k\rangle$ は、

$$0 = c_1 |\psi_1\rangle + c_2 |\psi_2\rangle + \cdots + c_k |\psi_k\rangle + \ldots$$

を満たす。$c_k \neq 0$ なので、$|\psi_k\rangle$ について解くことができて、

$$|\psi_k\rangle = -\sum_{n \neq k} \frac{c_n}{c_k} |\psi_n\rangle$$

と表すことができる[*4]。一次従属という言葉は、他のケットの線形結合で表せるようなケットが存在するとも言い換えることができる。そのため $\{|\psi_n\rangle\}$ から $|\psi_k\rangle$ を取り除いたものは一次独立となる。0 でない複素数がいくつかあるときも同様のことがいえる。

これらの概念を用いて、$\mathscr{H}$ の**基底**が定義できる。$\{|\psi_n\rangle\}$ が一次独立かつ、任意の $|\psi\rangle \in \mathscr{H}$ が $\{|\psi_n\rangle\}$ の線形結合で表せるとき、ケットの組 $\{|\psi_n\rangle\}$ は $\mathscr{H}$ の基底であるという。「任意の $|\psi\rangle \in \mathscr{H}$ が $\{|\psi_n\rangle\}$ の線形結合で表せる」という条件を**完全性**ともいう。

さらに、$\mathscr{H}$ の基底 $\{|\psi_n\rangle\}$ が各々規格化されており、互いに直交している場合は**正規直交基底**と呼ばれる。正規直交基底は線形代数でよく用いられる呼び名で、量子力学では**完全規格直交系**、**完全正規直交系**など様々な名前で呼ばれる。

$\{|\psi_n\rangle\}$ の各々が規格化されているというのは、式で書くと、

$$\langle\psi_1|\psi_1\rangle = \langle\psi_2|\psi_2\rangle = \cdots = 1$$

であり、$\{|\psi_n\rangle\}$ が互いに直交しているというのは、

$$\langle\psi_k|\psi_l\rangle = 0 \quad (k \neq l)$$

である。この 2 式をまとめて表すと、

$$\langle\psi_k|\psi_l\rangle = \delta_{kl} \tag{1.2}$$

と書ける。ここで δ_{kl} は**クロネッカーのデルタ**と呼ばれ、

$$\delta_{kl} = \begin{cases} 1 & (k = l) \\ 0 & (k \neq l) \end{cases}$$

を意味する。(1.2) を**規格直交条件**と呼ぶ。

---

*4 $\sum_{n \neq k}$ は k でない添字 n について和を取るという意味である。

さて、完全規格直交系の定義によるとヒルベルト空間の任意のケット $|\psi\rangle$ は完全規格直交系 $\{|\psi_n\rangle\}$ の線形結合で書けるのであった。

$$|\psi\rangle = \sum_n c_n |\psi_n\rangle \tag{1.3}$$

この式を $\{|\psi_n\rangle\}$ による $|\psi\rangle$ の**展開式**と呼び、係数 c_n のことを**展開係数**という。$n = k$ の時の展開係数 c_k はここまでに述べた公理・定義から求めることができる。$\langle\psi_k|$ を、$|\psi\rangle$ の左から作用させてみよう。

$$\begin{aligned}
\langle\psi_k|\psi\rangle &= \langle\psi_k| \left(\sum_n c_n |\psi_n\rangle\right) \\
&= \sum_n c_n \langle\psi_k|\psi_n\rangle \\
&= \sum_n c_n \delta_{kn} = c_k
\end{aligned}$$

したがって $c_k = \langle\psi_k|\psi\rangle$ と書けるので、$|\psi\rangle$ の展開式は、

$$\begin{aligned}
|\psi\rangle &= \sum_n \langle\psi_n|\psi\rangle |\psi_n\rangle \\
&= \sum_n |\psi_n\rangle \langle\psi_n|\psi\rangle
\end{aligned}$$

とも書けることが分かった。

展開式 (1.3) の $|\psi\rangle$ に零ケットを入れてみよう。

$$0 = \sum_n c_n |\psi_n\rangle$$

この式の左から $\langle\psi_k|$ を作用させることで、

$$\langle\psi_k| 0 = \langle\psi_k| \left(\sum_n c_n |\psi_n\rangle\right)$$

直交性を用いると、$c_k \langle\psi_k|\psi_k\rangle = 0$ を得る。ここで $|\psi_k\rangle \neq 0$ であれば、$c_k = 0$ が導かれる。したがって、0 でなく互いに直交するケットの組は一次独立であることが示された。つまりケットの組が完全規格直交系を成す条件は、「完全性・一次独立性・規格直交性」ではなく「完全性・規格直交性」のみで良いということである。また今後は特に断らなければ「任意の 0 でないケット」のことを「任意のケット」と書く。

完全規格直交系

$\mathscr{H}$ の 0 でないケットの組 $\{|\psi_n\rangle\}$ が完全規格直交系であるとは、以下の 2 条件を満たすことである。

- 完全性
  任意のケット $|\psi\rangle \in \mathscr{H}$ に対して、
  $$|\psi\rangle = \sum_n |\psi_n\rangle \langle\psi_n|\psi\rangle$$
  と展開できる。
- 規格直交性
  $$\langle\psi_n|\psi_k\rangle = \delta_{nk}$$
  を満たす。ただし δ_{nk} はクロネッカーのデルタであり、
  $$\delta_{nk} = \begin{cases} 1 & (n = k) \\ 0 & (n \neq k) \end{cases}$$
  を意味する。

コラム：双対空間

内積も完備性も仮定していない複素ベクトル空間 $\mathscr{H}$ を用意しよう。
先入観をなくすために $a, b \in \mathscr{H}, c \in \mathbb{C}$ と表記する。
ここで $\mathscr{H} \to \mathbb{C}$ への写像 f が、

$$\begin{aligned} f(a+b) &= f(a) + f(b) \\ f(ca) &= cf(a) \end{aligned}$$

を満たすとき、f を $\mathscr{H}$ 上の**一次形式**と呼ぶ。
$\mathscr{H}$ 上の一次形式全体の集合を $\mathscr{H}^\dagger$ と書くことにする。$f, g \in \mathscr{H}^\dagger$ のとき、$\mathscr{H} \to \mathbb{C}$ の写像 $f+g$ と cf を、

$$\begin{aligned} (f+g)(a) &= f(a) + g(a) \\ (cf)(a) &= cf(a) \end{aligned}$$

と定義すると、$f+g$ と cf は $\mathscr{H}$ 上の一次形式となる（一次形式の定義に代入して確かめてみて欲しい）。これにより、$\mathscr{H}^\dagger$ 上に加法とスカラー倍が定まり、$\mathscr{H}^\dagger$ は複素ベクトル空間となる。このように作られた複素ベクトル空間 $\mathscr{H}^\dagger$ を $\mathscr{H}$ の双対空間と改めて定義する。
ここで次の定理が成立する（証明略）。
$\mathscr{H}$ の基底を $\{a_1, a_2, ..., a_n\}$ とするとき、それに対応する $\mathscr{H}^\dagger$ の基底 $\{f_1, f_2, ..., f_n\}$ が一

意に定まり、

$$f_i(a_j) = \delta_{ij}$$

を満たす。このような基底 $\{f_1, f_2, ..., f_n\}$ は $\{a_1, a_2, ..., a_n\}$ の**双対基底**と呼ばれる。
また、$a \in \mathscr{H}$ が $\mathscr{H}^\dagger$ 上の一次形式となることを示せて、そこから $\mathscr{H}^\dagger$ の双対空間 $\left(\mathscr{H}^\dagger\right)^\dagger$ が元々の $\mathscr{H}$ に等しくなる（同型となる）ことも示せる。
話をヒルベルト空間に戻そう。$\mathscr{H}$ の完全規格直交系を $\{|\psi_n\rangle\}$ とすると、それに対応する双対基は $\{\langle\psi_n|\}$ に限られる。したがって、任意の $|\psi\rangle \in \mathscr{H}$ に対して $\langle\psi| \in \mathscr{H}^\dagger$ が一意に定まる。この対応付けを双対対応と呼ぶことにしているのである。
また、$|\psi\rangle$ が $\mathscr{H}^\dagger \to \mathbb{C}$ の写像を与え、一方で $\langle\psi|$ は $\mathscr{H} \to \mathbb{C}$ の写像を与える。その点で $\langle\psi|\psi\rangle$ という表記法は、ケットとブラが相互に作用し合う関係を巧妙に表しているといえる。

$$\begin{tikzcd}
\mathscr{H} \arrow[rr, leftrightarrow] \arrow[dr, "\langle\psi|"'] & & \mathscr{H}^\dagger \arrow[dl, "|\psi\rangle"] \\
& \mathbb{C} &
\end{tikzcd}$$

1.2 物理量と固有状態

1.2.1 演算子の性質

量子力学における系の状態は $\mathscr{H}$ 上の $|\psi\rangle$ で表されるのだった。この $|\psi\rangle$ を別の状態 $\hat{A}\,|\psi\rangle$ へ移す写像 $\hat{A} : \mathscr{H} \to \mathscr{H}$ を演算子といい、量子力学における物理量は演算子として扱われる。このことについて詳しく議論する。

$|\psi\rangle$ を $\hat{A}\,|\psi\rangle$ へ移す写像 $\hat{A} : \mathscr{H} \to \mathscr{H}$ が、任意の $|\psi_1\rangle, |\psi_2\rangle \in \mathscr{H}$ に対して、

$$\hat{A}(|\psi_1\rangle + |\psi_2\rangle) = \hat{A}\,|\psi_1\rangle + \hat{A}\,|\psi_2\rangle$$
$$\hat{A}(c\,|\psi_1\rangle) = c\hat{A}\,|\psi_1\rangle$$

を満たすとき、$\hat{A}$ を $\mathscr{H}$ 上の**線形演算子**という。今後、$\hat{}$ の付くものは全て線形演算子であるとする。線形演算子の中でも特に、任意の $|\psi\rangle \in \mathscr{H}$ に対して、

$$\hat{I}\,|\psi\rangle = |\psi\rangle$$

を満たす $\hat{I}$ のことを**恒等演算子**という。

演算子 $\hat{A}, \hat{B}$ は、任意の $|\psi\rangle \in \mathscr{H}$ に対して、

$$\hat{A}\,|\psi\rangle = \hat{B}\,|\psi\rangle$$

を満たすとき、$\hat{A} = \hat{B}$ であると書く。

また、演算子同士の和・スカラー倍・積から定まる演算子はそれぞれ、

$$
\begin{gathered}
(\hat{A}+\hat{B})\,|\psi\rangle := \hat{A}\,|\psi\rangle + \hat{B}\,|\psi\rangle \\
(c\hat{A})\,|\psi\rangle := c(\hat{A}\,|\psi\rangle) \\
(\hat{A}\hat{B})\,|\psi\rangle := \hat{A}(\hat{B}\,|\psi\rangle)
\end{gathered}
$$

のように定義される。

一般に演算子の積について、**結合則**

$$
(\hat{A}\hat{B})\hat{C} = \hat{A}(\hat{B}\hat{C})
$$

は常に成り立つが、**交換則** $\hat{A}\hat{B} = \hat{B}\hat{A}$ は常に成り立つとは限らない。すなわち、

$$
\hat{A}\hat{B} \neq \hat{B}\hat{A}
$$

なる $\hat{A}$と$\hat{B}$ が存在する。このとき、$\hat{A}$と$\hat{B}$ は**非可換**であるという。非可換な演算子 $\hat{A}$と$\hat{B}$ において、$\hat{A}\hat{B}$ と $\hat{B}\hat{A}$ がどれだけ異なるかの尺度として、**交換子** $[\hat{A},\hat{B}]$ を次のように定義する。

$$
[\hat{A},\hat{B}] := \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}
$$

定義から分かるように交換子も演算子となることに注意する。交換則 $\hat{A}\hat{B} = \hat{B}\hat{A}$ が成り立つとき、$\hat{A}$と$\hat{B}$ は**可換**であるという。このことは、

$$
[\hat{A},\hat{B}] = 0
$$

と書かれることが多い。

$\mathscr{H}$ 上の演算子 $\hat{A}$ はブラに対しても作用することができる。しかしこのときは、$\langle\psi|\,\hat{A}$ のように右から作用させるものとする。またケットとブラの積 $|\alpha\rangle\langle\beta|$ を、

$$
(|\alpha\rangle\langle\beta|)\,|\psi\rangle := |\alpha\rangle\,(\langle\beta|\psi\rangle)
$$

を満たすような演算子と定義しよう。つまり積 $|\alpha\rangle\langle\beta|$ を、$|\psi\rangle$ を $|\alpha\rangle$ へ移し複素数 $\langle\beta|\psi\rangle$ 倍するような演算子とみなすということである。このように定めた演算子が線形演算子になることは内積の公理からすぐに導ける。

これを用いて面白い性質を導いてみよう。完全規格直交系 $\{|a_n\rangle\}$ を用いると、任意のケット $|\psi\rangle \in \mathscr{H}$ は、

$$
|\psi\rangle = \sum_n |a_n\rangle\,\langle a_n|\psi\rangle
$$

と展開できるのだった。この式は、

$$
\hat{I}\,|\psi\rangle = \left(\sum_n |a_n\rangle\langle a_n|\right)|\psi\rangle
$$

と変形できるので、

$$\hat{I} = \sum_n |a_n\rangle\langle a_n|$$

となることが分かる。したがって、完全規格直交系 $\{|a_n\rangle\}$ における完全性の式は今後は、

$$\sum_n |a_n\rangle\langle a_n| = \hat{I}$$

と書くことにする。

1.2.2 固有値と固有ケット

演算子 $\hat{A}$ を 0 でないケット $|a\rangle$ に作用させたとき、$\hat{A}|a\rangle$ の向きが元の $|a\rangle$ と同じであるような状況を考える。この関係は、

$$\hat{A}|a\rangle = a|a\rangle \tag{1.4}$$

と表される。この式を $\hat{A}$ の**固有方程式**と呼び、$|a\rangle$ を$\hat{A}$ の**固有ケット**、掛けられた複素数 a のことを$\hat{A}$ の**固有値**という。また、ブラ $\langle a|$ が$\hat{A}$ の固有ブラであるときは、

$$\langle a|\hat{A} = \langle a|a \tag{1.5}$$

という式で表す。一般に $\hat{A}|a\rangle$ の双対対応は $\langle a|\hat{A}$ とはならない。これを背理的に示す。式 (1.5) の右辺の双対対応をとると、

$$\langle a|a \longleftrightarrow a^*|a\rangle$$

また、左辺の双対対応は

$$\langle a|\hat{A} \longleftrightarrow \hat{A}|a\rangle$$

と仮定する。これを式 (1.4) と比較すると、双対対応の一対一性[*5]より

$$a^*|a\rangle = a|a\rangle$$

が成立し、$a^* = a$ が結論付けられるが、a は複素数であるので、この関係は一般には成り立たず矛盾する。そこで演算子 $\hat{A}$ のエルミート共役 $\hat{A}^\dagger$ を、任意のケット $|\psi\rangle \in \mathscr{H}$ に対して、

$$\hat{A}|\psi\rangle \longleftrightarrow \langle\psi|\hat{A}^\dagger$$

を満たすようなものと定義する。この定義式を内積を用いて書き換えると、$\hat{A}^\dagger$ は任意のケット $|\psi\rangle, |\xi\rangle \in \mathscr{H}$ に対して、

$$\langle\xi|\hat{A}|\psi\rangle^* = \langle\psi|\hat{A}^\dagger|\xi\rangle$$

[*5] 1.1 節のコラム：双対空間にて説明した。

を満たすようなものと書ける。また、$\hat{A}^\dagger \ket{a} = a^* \ket{a}$ となることも容易に確かめられる。ここで、もし $a = a^*$、すなわち a が実数ならば、矛盾することなく $\hat{A}\ket{a} \longleftrightarrow \bra{a}\hat{A}$ とできるのではないか？と予想できる。その予想はおおむね正しく[*6]、次の小節で $\hat{A}^\dagger = A$ を満たす演算子としてエルミート演算子という概念が導入される。エルミート演算子の固有値は実数である。

エルミート共役の性質をいくつか示す。ケットの双対対応の規則と演算子のエルミート共役の定義を順次用いるだけで、

$$
\begin{aligned}
(\hat{A} + \hat{B})^\dagger &= \hat{A}^\dagger + \hat{B}^\dagger \\
(c\hat{A})^\dagger &= c^* \hat{A}^\dagger
\end{aligned}
$$

はただちに示せる。また、$(\hat{A}^\dagger)^\dagger = \hat{A}$ は、

$$
\begin{aligned}
\hat{A}\ket{\psi} &\longleftrightarrow \bra{\psi}\hat{A}^\dagger \\
&\longleftrightarrow (\hat{A}^\dagger)^\dagger \ket{\psi}
\end{aligned}
$$

ここで双対対応の一対一性を用いて、

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

とすることで示せる。[*7]

最後に $(\hat{A}\hat{B})^\dagger = \hat{B}^\dagger \hat{A}^\dagger$ を示す。積の演算子の定義より、

$$
\begin{aligned}
(\hat{A}\hat{B})\ket{\psi} &= \hat{A}(\hat{B}\ket{\psi}) \\
&= \hat{A}\ket{\xi} \\
&\longleftrightarrow \bra{\xi}\hat{A}^\dagger
\end{aligned}
$$

ただし、$\ket{\xi} \coloneqq \hat{B}\ket{\psi}$ とおいた。ここで、

$$
\bra{\xi} = \bra{\psi}\hat{B}^\dagger
$$

であるので、

$$
(\hat{A}\hat{B})\ket{\psi} \longleftrightarrow \bra{\psi}\hat{B}^\dagger \hat{A}^\dagger
$$

が導かれる。この結果を用いれば、

$$
(\ket{\psi}\!\bra{\xi})^\dagger = \ket{\xi}\!\bra{\psi}
$$

もいえる。

[*6] 厳密には、$\hat{A} = \hat{A}^\dagger$ であるための必要十分条件を「全ての固有値 a が実数である」とするためには、**正規性** $[\hat{A}, \hat{A}^\dagger] = 0$ を前提とする必要がある。ただエルミート演算子やユニタリー演算子は常に正規性を満たすので、逆の命題を考えようとしない限り正規性を持ち出す必要はない。

[*7] この証明については内積を用いた方が分かりやすいかもしれない。

1.2.3 エルミート演算子

$\hat{A} = \hat{A}^\dagger$ を満たすような演算子 $\hat{A}$ のことを、**エルミート演算子**という。エルミート演算子の固有値 a は全て実数であるので、エルミート演算子で表される物理量を**観測可能物理量**もしくは**オブザーバブル**と呼ぶこともある。以下は固有値が離散的となる場合について説明する。

エルミート演算子 $\hat{A}$ についての固有方程式を、

$$\hat{A}\,|a_n\rangle = a_n\,|a_n\rangle \quad (n = 1, 2, ...) \tag{1.6}$$

とする。ここで添え字 n は自然数であり、ある範囲（状況によって異なる）を動くとする。$\{|a_n\rangle\}$ は固有ケット、$\{a_n\}$ は固有値の組である。$|a_n\rangle$ は $|a\rangle$ と書いて添え字を省略したり、$|n\rangle$ と書いて添え字だけを明示したりと様々な書き方がある。まずは、全ての a_n が実数であることを再度確認しよう。式 (1.6) は任意の添え字 n で成立するので、n を固定して示せば良い。$\langle a_n|$ に $\hat{A}$ を左から作用させることで、

$$\langle a_n|\,\hat{A} = \langle a_n|\,a_n$$

が成り立つ。この式の両辺について双対対応を取れば、

$$\hat{A}\,|a_n\rangle = a_n^*\,|a_n\rangle$$

となり、式 (1.6) と比較することで、

$$\begin{aligned} a_n\,|a_n\rangle &= a_n^*\,|a_n\rangle \\ \therefore\quad (a_n - a_n^*)\,|a_n\rangle &= 0 \\ \therefore\quad (a_n - a_n^*)\,\langle a_n|a_n\rangle &= 0 \end{aligned}$$

を得る。固有ケットは 0 でないので、$a_n = a_n^*$ であると分かる。

次に、異なる固有値に属する固有ケットは直交することを示す。式 (1.6) に $\langle a_k|$ を作用させると、

$$\begin{aligned} \langle a_k|\hat{A}|a_n\rangle &= \langle a_k|a_n|a_n\rangle \\ \therefore\quad a_k\,\langle a_k|a_n\rangle &= a_n\,\langle a_k|a_n\rangle \\ \therefore\quad (a_k - a_n)\,\langle a_k|a_n\rangle &= 0 \end{aligned}$$

となり、$a_k \neq a_n$ とすれば、$\langle a_k|a_n\rangle = 0$ となることが分かる。また、証明は省略するがエルミート演算子の固有ケットの組はヒルベルト空間 $\mathscr{H}$ の基底を成す[*8]。規格化を行っても直交性や基底であることは変わらないので、今後は規格化された固有ケットの組を $\{|a_n\rangle\}$ と書くことにする（これで $\{|a_n\rangle\}$ が完全規格直交系となる）。以上の議論をまとめよう。

[*8] 固有値が縮退しているときは、固有ケットの組をグラムシュミットの直交化法によって互いに直交するよう再構成する。縮退している場合については追って説明するため、今は縮退が無いものとする。

エルミート演算子の固有ケット

$\mathscr{H}$ 上のエルミート演算子 $\hat{A}$ に対して、規格化された固有ケット $\{|a_n\rangle\}$ は完全規格直交系を成す。（ただし縮退が無い場合）

$$\sum_n |a_n\rangle\langle a_n| = \hat{I} \tag{1.7}$$

$$\langle a_k|a_n\rangle = \delta_{kn} \tag{1.8}$$

また、$\hat{A}$ の全ての固有値 $\{a_n\}$ は実数である。

1.2.4　ユニタリー演算子

$\hat{U}$ が $|\psi\rangle$ に作用することで得られるケットを $\hat{U}|\psi\rangle$ と書くのだった。このとき、逆に $\hat{U}|\psi\rangle$ を $|\psi\rangle$ へ戻すような演算子 $\hat{U}^{-1}$ のことを**逆演算子**という。逆演算子について、

$$\hat{U}^{-1}\hat{U}|\psi\rangle = \hat{U}\hat{U}^{-1}|\psi\rangle = |\psi\rangle$$

もしくは、

$$\hat{U}^{-1}\hat{U} = \hat{U}\hat{U}^{-1} = \hat{I}$$

が成り立つ。$\hat{U}^{\dagger} = \hat{U}^{-1}$ を満たすような演算子 $\hat{U}$ のことを**ユニタリー演算子**と呼ぶ。つまりユニタリー演算子は、

$$\hat{U}^{\dagger}\hat{U} = \hat{U}\hat{U}^{\dagger} = \hat{I}$$

をみたす。

1.2.5　射影演算子

エルミートかつ冪等な演算子のことを**射影演算子**という。すなわち、

$$\hat{\Pi}^{\dagger} = \hat{\Pi}, \quad \hat{\Pi}\hat{\Pi} = \hat{\Pi}$$

を満たすような演算子 $\hat{\Pi}$ のことを射影演算子という。たとえばケットが規格化されているかによらず、任意のケット $|\psi\rangle$ について、

$$\hat{\Pi} = \frac{|\psi\rangle\langle\psi|}{\langle\psi|\psi\rangle}$$

は射影演算子である。規格化されているならば、$\hat{\Pi} = |\psi\rangle\langle\psi|$ と書ける。また、完全規格直交系 $\{|a\rangle\}$ によって作られる、

$$\hat{I} = \sum_a |a\rangle\langle a|$$

も射影演算子である。それぞれの $|a\rangle\langle a|$ も射影演算子であり、$\hat{\Pi}_a$ と書くことにする。

1.3　測定と遷移確率

ここからは量子力学の現象から仮定される要請が登場する。要請は数学的に導かれるものではなく、実験結果をうまく説明するために予め仮定しておくものである。

1.3.1　状態と物理量についての要請

量子力学の議論のおおまかな流れとして、まず系の状態をケットで表し、その系について観測可能物理量（オブザーバブル）を測定し、その遷移確率や期待値を評価することがある。そこで、それらの用語の定義を物理的な仮定と合わせて要請することにする。

要請 1：純粋状態

量子力学における純粋状態とは、ヒルベルト空間 $\mathscr{H}$ において、そのノルムが 1 であって、

$$|\psi\rangle \sim e^{i\delta} |\psi\rangle$$

という同一視を行った上での、$|\psi\rangle$ のことを指す。これは射線とも呼ばれる。
ただし、$\delta \in \mathbb{R}$ は無次元量の定数とし、$e^{i\delta}$ は位相因子と呼ばれる。このように定めた $|\psi\rangle$ を (純粋状態を表す) **状態ケット** (もしくは状態ベクトル) と呼ぶことにする。

純粋状態という言葉は、後に登場する混合状態との対比の文脈では意味を持つ。混合状態が登場するまでは、状態と言われれば単に純粋状態を指すことにする[*9]。

次に量子力学での観測の対称となる物理量についての要請を行う。

要請 2：オブザーバブル

ある古典物理量 A に対応する量子力学的な物理量を $\hat{A}$ と書きオブザーバブル（観測可能物理量, 単に物理量）と呼ぶことにする。$\hat{A}$ はエルミート演算子であり、その固有値が古典物理量 A と同じ次元を持つことを要請する。
ただし、時刻 t に関してはこの限りではなく、観測者側が自由に決定するパラメータであるとする。

この仮定より、オブザーバブル $\hat{A}$ のの固有ケットがヒルベルト空間を生成すること分かる。ヒルベルト空間の次元が無限の場合、演算子のエルミート性と自己共役性は異なる概念を表すが、有限次元では一致するので、有限次元を考えるうちはエルミート演算子をオブザーバブルと考える。

[*9] 純粋状態は極低温で実現するような理想的な状態であり、温度を増加させるにつれて熱による励起の項が混合されて混合状態となる。純粋状態を扱う量子力学で温度が登場しないのはこのためである。

1.3.2

量子力学における物理量の観測結果が確率的に与えられることを反映させるために次のことを要請する。

要請３：確率解釈

始めに状態 $|\psi\rangle$ にある系についてオブザーバブル $\hat{A}$ を測定する。その時 $\hat{A}$ の固有ケット $|a\rangle$ を見出す確率 $\Pr(a \leftarrow \psi)$ は、

$$\Pr(a \leftarrow \psi) \coloneqq |\langle a|\psi\rangle|^2$$

で与えられる。$\langle a|\psi\rangle$ は確率振幅と呼ばれる。

規格化されたケット $|\psi\rangle$ の物理的意味を考える。オブザーバブル $\hat{A}$ の固有ケット $|a\rangle$ は完全性を持つので、

$$|\psi\rangle = \sum_a |a\rangle \langle a|\psi\rangle$$

と展開できる。ここに $\langle\psi|$ を作用すると、

$$1 = \langle\psi|\psi\rangle = \sum_a \langle\psi|a\rangle \langle a|\psi\rangle = \sum_a |\langle a|\psi\rangle|^2 = \sum_a \Pr(a \leftarrow \psi)$$

と変形できる。この式は、全ての確率の和が１になっているということを意味している。すなわち状態 $|\psi\rangle$ から $\hat{A}$ の固有状態のいずれかが必ず見出せるという意味である。今後、規格化という言葉は、全確率を１にするというニュアンスを含むことにする。

次は、$|\psi\rangle$ の $|a\rangle$ による展開式に $\hat{A}$ を作用させる。

$$\hat{A}|\psi\rangle = \sum_a \hat{A}|a\rangle \langle a|\psi\rangle = \sum_a a|a\rangle \langle a|\psi\rangle \tag{1.9}$$

ここに $\langle\psi|$ を作用させると、

$$\langle\psi|\hat{A}|\psi\rangle = \sum_a a\langle\psi|a\rangle \langle a|\psi\rangle = \sum_a a|\langle a|\psi\rangle|^2 = \sum_a a\Pr(a \leftarrow \psi)$$

と変形できる。この式は、$\hat{A}$ の測定値の期待値を意味していることが分かる。したがって今後は、$\langle\psi|\hat{A}|\psi\rangle$ のことを $\hat{A}$ の**期待値**と呼ぶ。期待値を取る状態ケットが明白なときはケットの引数を省略して、$\langle\hat{A}\rangle$ と書くこともある。量子力学での期待値について誤解してはいけないのは、$\langle\psi|\hat{A}|\psi\rangle$ とは、状態 $|\psi\rangle$ の系を沢山用意してその１つ１つに対して物理量 $\hat{A}$ を測定し、算出した期待値（の理想値）であるということである。

また、状態において位相因子の同一視が必要な理由は確率解釈による。仮に状態 $|\psi\rangle$ が $e^{i\delta}$ 倍されていたとしても、観測される遷移確率は $|\langle a|\psi\rangle|^2$ であるので、$e^{i\delta}$ の項は相殺される。そのため

位相因子の違いによる状態の区別をすることができないからである。しかしながら、

$$|\xi\rangle + |\psi\rangle\,, \quad |\xi\rangle + e^{i\delta}\,|\psi\rangle$$

のような二つの状態は区別される。あくまでケット全体にかけられた位相因子の違いのみを同一視するという意味である。

1.3.3 スペクトル分解と対角化

また、式 (1.9) をもう一度書き直すと、

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

であるが、ここで $|\psi\rangle$ は任意にとっているので、

$$\begin{aligned}\hat{A} &= \sum_a a\,|a\rangle\!\langle a| \\ &= \sum_a a\hat{\Pi}_a\end{aligned}$$

が得られる。これはオブザーバブル $\hat{A}$ の**スペクトル分解**と呼ばれる。

次は $\hat{A}$ の固有値の組を $\{a_1, a_2, ...\}$、固有ケットの組を $\{|a_1\rangle\,, |a_2\rangle\,, ...\}$ とする。ここで、

$$\langle a_n|\,\hat{A}\,|a_m\rangle = a_m\delta_{nm}$$

が成り立つ。$a_m\delta_{nm}$ は n 行 m 列成分が a_m である行列に対応させることができる。分かりやすく言えば、n 行 n 列成分は a_n でその他は 0 の行列のことである。したがって、$\langle a_n|\,\hat{A}\,|a_m\rangle$ は $\hat{A}$ を行列で書き換えた[*10]ときの行列要素と見なせて、今回の場合は対角成分以外は 0 である。そのような行列は**対角行列**と呼ばれる。したがって $\hat{A}$の固有ケットの組 $\{|a_1\rangle\,, |a_2\rangle\,, ...\}$ が完全規格直交系を成していれば、固有ケットの組は $\hat{A}$ を対角行列にすることができる。このとき、$\hat{A}$ は**対角化可能**であるという。$\hat{A}$ に対して、$\hat{I} = \sum_n |a_n\rangle\!\langle a_n|$ と $\hat{I} = \sum_m |a_m\rangle\!\langle a_m|$ を左右から作用させよう。

$$\begin{aligned}\hat{A} &= \hat{I}\hat{A}\hat{I} \\ &= \sum_n\sum_m |a_n\rangle\,\langle a_n|\hat{A}|a_m\rangle\,\langle a_m| \\ &= \sum_n\sum_m a_m\delta_{nm}\,|a_n\rangle\!\langle a_m| \\ &= \sum_n a_n\,|a_n\rangle\!\langle a_n|\end{aligned}$$

したがって $\hat{A}$ の対角化とはスペクトル分解そのものである。

[*10] 行列表示の一般論は第 2 章で行う。

1.3.4 測定の公理

要請 4：射影仮説

始めに状態 $|\psi\rangle$ にある系についてオブザーバブル $\hat{A}$ を測定する。その時 $\hat{A}$ の固有ケット $|a\rangle$ が見出されたとする。
このとき測定後の系の状態 $|\psi'\rangle$ は、

$$|\psi'\rangle = \frac{\hat{\Pi}_a |\psi\rangle}{\left\| \hat{\Pi}_a |\psi\rangle \right\|}$$

と表される[*11]。ここで $\hat{\Pi}_a$ とは、

$$\hat{\Pi}_a \coloneqq |a\rangle\langle a|$$

で表される射影演算子である。$|a\rangle$ が規格化されていることを考慮すれば $|\psi'\rangle$ は、

$$|\psi'\rangle = \frac{|a\rangle \langle a|\psi\rangle}{|\langle a|\psi\rangle|}$$

と書ける。

射影演算子 $\hat{\Pi}_a$ を用いれば、$|a\rangle$ を見出す確率 $\Pr(a \leftarrow \psi)$ は、

$$\Pr(a \leftarrow \psi) = \left\| \hat{\Pi}_a |\psi\rangle \right\|^2$$

とも書ける。

以上の要請をまとめて、量子力学の測定の議論の流れについて説明する。量子測定の議論は次のような順で行われる。ある状態ケット $|\psi\rangle$ においてオブザーバブル $\hat{A}$ を測定する。すると $\hat{A}$ の固有値 a が確率 $|\langle a|\psi\rangle|^2$ で見出される。このとき測定後の系の状態は $|\theta\rangle = \frac{|a\rangle\langle a|\psi\rangle}{|\langle a|\psi\rangle|}$ へ変化する。ここで状態 $|\theta\rangle$ においてもう一度 $\hat{A}$ を測定してみよう。固有値 a が見出される確率は、

$$|\langle a|\theta\rangle|^2 = \left| \frac{\langle a|a\rangle \langle a|\psi\rangle}{|\langle a|\psi\rangle|} \right|^2 = 1$$

であり、$\hat{A}$ の期待値は、$\langle\theta|\hat{A}|\theta\rangle = a$ となる。そのため一度 a を見出した系において $\hat{A}$ を測定すると必ず a が測定される。このように系の測定は状態の不可逆な変化をもたらす。これを**波束の収縮**という。

次は、状態 $|\theta\rangle$ において別のオブザーバブル $\hat{B}$ を測定しよう。このとき、$\hat{B}$ が $\hat{A}$ と可換であるか非可換であるかで状況が大きく異なる。まずは $\hat{A}$ と $\hat{B}$ が可換な場合、すなわち $[\hat{A}, \hat{B}] = 0$ の場合について議論する。非可換な場合については、後のセクションで詳しく述べる。

[*11] ただしこれは理想的な測定の場合で射影測定と呼ばれている。

可換物理量の測定

オブザーバブル $\hat{A}, \hat{B}$ について $[\hat{A}, \hat{B}] = 0$ の場合、$\hat{A}$ と $\hat{B}$ を同時に対角化する固有ケット $|n\rangle$ を取ることができる。この固有ケットのことを**同時固有ケット**と呼ぶ。さて、$\{|n\rangle\}$ がオブザーバブル $\hat{A}$ の固有ケットの組であることだけを仮定しよう。このとき可換な $\hat{A}, \hat{B}$ に対して、

$$
\begin{aligned}
\langle m|\,\hat{A}\hat{B}\,|n\rangle &= \langle m|\,\hat{B}\hat{A}\,|n\rangle \\
\therefore \quad \sum_k \langle m|\,\hat{A}\,|k\rangle\langle k|\,\hat{B}\,|n\rangle &= \sum_k \langle m|\,\hat{B}\,|k\rangle\langle k|\,\hat{A}\,|n\rangle \\
\therefore \quad \sum_k \delta_{mk} a_k \,\langle k|\,\hat{B}\,|n\rangle &= \sum_k \langle m|\,\hat{B}\,|k\rangle\,\delta_{kn} a_n \\
\therefore \quad a_m \,\langle m|\,\hat{B}\,|n\rangle &= \langle m|\,\hat{B}\,|n\rangle\, a_n
\end{aligned}
$$

したがって、

$$
(a_m - a_n)\,\langle m|\,\hat{B}\,|n\rangle = 0
$$

ここで、$m \neq n$ とする。$\hat{A}$ に縮退が無いとすると、$a_m \neq a_n$ であるので、$\langle m|\,\hat{B}\,|n\rangle = 0$ が導かれる。$\hat{A}$ の固有ケットの組から作られる演算子 $\hat{I} = \sum_n |n\rangle\langle n|$ と $\hat{I} = \sum_m |m\rangle\langle m|$ を $\hat{B}$ の左右から作用させると、

$$
\begin{aligned}
\hat{B} &= \hat{I}\hat{B}\hat{I} \\
&= \sum_n \sum_m |n\rangle\ \langle n|\hat{B}|m\rangle\ \langle m| \\
&= \sum_n |n\rangle\ \langle n|\hat{B}|n\rangle\ \langle n| \qquad (1.10)
\end{aligned}
$$

が成り立つ。$\langle n|\hat{B}|n\rangle$ は一般に 0 ではないので b_n とおけば、式 (1.10) は $\hat{B}$ のスペクトル分解である。$\langle n|\hat{B}|n\rangle$ は $\hat{B}$ の対角要素であることが分かった。したがって、$\hat{A}$ の固有ケット $\{|n\rangle\}$ は可換な物理量 $\hat{B}$ も対角化することができる[*12]。この意味で可換な物理量 $\hat{A}$ と $\hat{B}$ は**同時対角化可能**であるという。

ある状態 $|\psi\rangle$ について $\hat{A}$ を測定し固有値 a_n を得たとすると、測定後の状態が a_n の固有ケット $|n\rangle$ と同じ向きの $\frac{|n\rangle\langle n|\psi\rangle}{|\langle n|\psi\rangle|}$ へと変化するのだった。この状態について、さらに可換物理量 $\hat{B}$ を測定しよう。$\hat{A}$ と $\hat{B}$ は同時対角化可能であるので、この測定では必ず $\hat{B}$ の固有値 b_n が得られる。したがって同時対角化可能は**同時観測可能**とも言われる。

状態 $|\psi\rangle$ で表される系について $\hat{A}$ を測定し、その後 $\hat{B}$ を測定するとする。このとき、$\hat{A}$ の測定値が a_n である確率は

$$
\Pr(n \leftarrow \psi) = |\langle n|\psi\rangle|^2
$$

[*12] 縮退している場合は、同じ固有値に属するケット組の線形結合を作ることで $\hat{B}$ を対角化するようなケットの組を構成できる。

で与えられる。測定後は状態は $|n\rangle$ と同じ状態になる。$|n\rangle$ は $\hat{A},\hat{B}$ の同時固有ケットであるので $\hat{B}$ の固有値 b_n を与える。したがってその後の測定で $\hat{B}$ の測定値が b_n である確率は 1 であり、$\hat{B}$ の測定後の状態は $|n\rangle$ のままである。つまり一度状態 $|n\rangle$ が見出されたなら、その後何回 $\hat{A}$や$\hat{B}$ を測定しても、確率 1 で測定値 a や b を得ることができる。この状況は $\hat{A},\hat{B}$ が非可換のときは成り立たないのである。

1.4　位置と運動量

この節では連続スペクトルについて説明する。まず一次元での場合について述べ、次に一般的な多次元・多粒子の場合について議論する。

1.4.1　位置演算子と運動量演算子

古典的な観測量の位置 x に対応するオブザーバブルとして**位置演算子**を $\hat{x}$ と書くことにする。その固有ケットを**位置固有ケット**と呼び、

$$\hat{x}\,|x'\rangle = x'\,|x'\rangle$$

を満たすとする。位置固有ケットは完全規格直交系を成すが、連続的なのでその表記には積分を用いる。ここでは連続スペクトルの数学的に厳密な議論は避けるが、基本的に離散スペクトルの場合のアナロジーで先に進むことができる。離散スペクトルの場合、オブザーバブルの固有ケットは離散的な添え字で指定されており、その組は完全規格直交性 (1.7)(1.8) を満たすのであった。これのアナロジーとして、位置固有ケットの完全規格直交性は以下のように書ける。積分区間は特に断りのない限り $-\infty$ から $+\infty$ までとする。

位置固有ケットの性質

位置固有ケットは、

$$\int \mathrm{d}x\,|x\rangle\langle x| = \hat{I} \tag{1.11}$$

$$\langle x'|x\rangle = \delta(x'-x) \tag{1.12}$$

という完全性 (1.11) と規格直交性 (1.12) を満たす。ただし $\delta(x'-x)$ は**ディラックのデルタ関数**と呼ばれる関数である[*13]。

状態ケット $|\psi\rangle$ を位置固有ケット $|x\rangle$ で展開してみよう。

$$\begin{aligned}|\psi\rangle &= \int \mathrm{d}x\,|x\rangle\,\langle x|\psi\rangle \\ &= \int \mathrm{d}x\,|x\rangle\,\psi(x)\end{aligned}$$

[*13] 今後は略してデルタ関数と呼ぶ。デルタ関数には定義の仕方や満たす性質が複数あるがそれらは付録に示す。

ここで、$\psi(x) \coloneqq \langle x|\psi\rangle$ とおいた。$\psi(x)$ を波動関数と呼ぶ。波動関数とはすなわち、状態 $|\psi\rangle$ を $|x\rangle$ で展開したときの展開係数である。$\langle x|\psi\rangle$ において ψ を固定すると、$\psi(x)$ は $\mathbb{R} \to \mathbb{C}$ の関数と見なせる。

デルタ関数についての有用な式を一つ紹介する。クロネッカーのデルタについて成り立つ関係式、

$$\sum_{n'} f(n')\delta_{nn'} = f(n)$$

の連続スペクトル版はデルタ関数によって与えられる。すなわち、

$$\int \mathrm{d}x'\, f(x')\delta(x'-x) = f(x)$$

が成り立つ。これをデルタ関数の定義とする本もある。デルタ関数 $\delta(x'-x)$ は $f(x')$ にかけて積分したときに一点 $x' = x$ 以外の寄与をなくすような重み付けであるという理解でしばらくは先に進める。

$|\psi\rangle$ の規格化条件 $1 = \langle\psi|\psi\rangle$ は、波動関数を用いると、

$$\begin{aligned}
1 &= \iint \mathrm{d}x'\,\mathrm{d}x\,\langle x'|x\rangle\,\psi^*(x')\psi(x) \\
&= \iint \mathrm{d}x'\,\mathrm{d}x\,\delta(x'-x)\psi^*(x')\psi(x) \\
&= \int \mathrm{d}x\,\psi^*(x)\psi(x) \\
&= \int \mathrm{d}x\,|\psi(x)|^2
\end{aligned}$$

と書き換えられる。$|\psi(x)|^2$ を考えている x の範囲で積分することで確率を得られるので、$|\psi(x)|^2$ は確率密度と呼ばれる。確率論における確率密度関数は一点における確率は与えることはできず、多少の幅を持つ確率を与えるのだった。このことは量子力学の $|\psi(x)|^2$ にも言えることで、一般に区間 $a \leq x \leq b$ に粒子を見出す確率 $P(a \leq x \leq b)$ は、

$$P(a \leq x \leq b) \coloneqq \int_a^b \mathrm{d}x\,|\psi(x)|^2$$

で与えることにする。これはボルンの確率解釈の連続スペクトル版である。非常に小さな区間 $x \leq x' \leq x + \mathit{\Delta}x$ であれば一次近似で、

$$\begin{aligned}
P(x \leq x' \leq x + \mathit{\Delta}x) &= \int_x^{x+\mathit{\Delta}x} \mathrm{d}x'\,|\psi(x')|^2 \\
&\simeq |\psi(x)|^2 \mathit{\Delta}x
\end{aligned}$$

と表すこともできる。

波動関数を用いると、オブザーバブル $\hat{A}$ の期待値 $\langle\psi|\hat{A}|\psi\rangle$ は、

$$\begin{aligned}\langle\psi|\hat{A}|\psi\rangle &= \iint \mathrm{d}x'\,\mathrm{d}x\,\langle x'|x\rangle\,\psi^*(x')\hat{A}\psi(x)\\ &= \int \mathrm{d}x\,\psi^*(x)\hat{A}\psi(x)\end{aligned}$$

と書き換えられる。また、$\hat{A}$ の固有ケット $|\psi_n\rangle\,,|\psi_m\rangle$ の規格直交性は、

$$\begin{aligned}\delta_{mn} &= \langle\psi_m|\psi_n\rangle\\ &= \int \mathrm{d}x\,\langle\psi_m|x\rangle\,\langle x|\psi_n\rangle\\ &= \int \mathrm{d}x\,\psi_m^*(x)\psi_n(x)\end{aligned}$$

と書き換えられる。$\psi_m(x), \psi_n(x)$ を $\hat{A}$ の**固有関数**と呼ぶ。ここまでの議論から、波動関数を基本として内積や固有方程式を考えられるのではないかと気づく人もいるだろう。そのような形式の量子力学は波動力学と呼ばれる。ブラケット形式から波動力学への完全な移行は第 2 章で詳しく述べるが、基本的な部分はこの節の内容で尽きている。

一方、古典的な運動量 p に対応するオブザーバブルとして**運動量演算子**を $\hat{p}$ と書くことにする。その固有ケットは**運動量固有ケット**と呼び、

$$\hat{p}\,|p'\rangle = p'\,|p'\rangle$$

を満たす。運動量固有ケットも完全規格直交系を成すので、

$$\begin{gathered}\int \mathrm{d}p\,|p\rangle\langle p| = \hat{I}\\ \langle p'|p\rangle = \delta(p'-p)\end{gathered}$$

が成り立つ。$|\psi\rangle$ を運動量固有ケットで展開すると、

$$\begin{aligned}|\psi\rangle &= \int \mathrm{d}p\,|p\rangle\,\langle p|\psi\rangle\\ &= \int \mathrm{d}p\,|p\rangle\,\tilde{\psi}(p)\end{aligned}$$

となる。$\tilde{\psi}(p) \coloneqq \langle p|\psi\rangle$ は運動量表示での波動関数と呼ばれる。

1.4.2 正準交換関係

ここで、位置演算子と運動量演算子が非可換でその交換子が $i\hbar\hat{I}$ であることを要請する。この関係を**正準交換関係**という。恒等演算子 $\hat{I}$ は省略されることもあるが、交換子自体が演算子であるということに注意しておく。

要請：正準交換関係

位置演算子 $\hat{x}$ と運動量演算子 $\hat{p}$ に対して、

$$[\hat{x}, \hat{p}] = i\hbar\hat{I} \tag{1.13}$$

が成り立つ。

(1.13) の右辺に出てくる $\hbar$ はディラック定数と呼ばれる。$\hbar := \frac{h}{2\pi}$ である。h はプランク定数と呼ばれ、

$$h \simeq 6.626 \times 10^{-34}\mathrm{Js}$$

程度の値を持つ。h の次元は Js であり作用量の次元と呼ばれる。正準交換関係は、$\hat{x}$ と $\hat{p}$ の交換子は h 程度のオーダーであるということを要請している。これは古典力学からみれば無視できるほど微小な量であるので、古典的な物理量は実質的に可換である。量子力学における非可換性は、扱う物理量のオーダーを小さくしていったときに無視できなくなるのだと理解できる。

正準交換関係から導かれる最も重要な帰結を説明する。まずは位置 x についての**偏微分演算子** $\hat{\partial}_x$ を、

$$\hat{\partial}_x |\psi\rangle := \int \mathrm{d}x\, |x\rangle \frac{\partial}{\partial x} \langle x|\psi\rangle$$

で定義する。$|\psi\rangle$ は位置に依らないのだが、$\langle x|\psi\rangle$ すなわち$\psi(x)$ は $\mathbb{R} \to \mathbb{C}$ の写像なので偏微分が定義されている。つまり $\hat{\partial}_x$ は $|\psi\rangle$ の $|x\rangle$ での展開係数を偏微分せよという意味の演算子である。上式の両辺に $\langle x|$ を作用させれば、

$$\langle x| \hat{\partial}_x |\psi\rangle = \frac{\partial}{\partial x} \langle x|\psi\rangle$$

となる。これを定義式と考えてもよい。ここで、$\hat{x}$ と $\hat{\partial}_x$ の交換子を計算しよう。$\hat{\partial}_x$ は $|\psi\rangle$ に作用させて初めて意味を持つから、交換子の計算も $|\psi\rangle$ に作用させた状態で行う。

$$\begin{aligned}
[\hat{x}, \hat{\partial}_x] |\psi\rangle &= \hat{x}\hat{\partial}_x |\psi\rangle - \hat{\partial}_x\hat{x} |\psi\rangle \\
&= \hat{x} \int \mathrm{d}x\, |x\rangle \frac{\partial}{\partial x} \langle x|\psi\rangle - \int \mathrm{d}x\, |x\rangle \frac{\partial}{\partial x} \langle x| \hat{x} |\psi\rangle \\
&= \int \mathrm{d}x\, |x\rangle \left(x\frac{\partial}{\partial x}\psi(x) - \frac{\partial}{\partial x}(x\psi(x)) \right) \\
&= \int \mathrm{d}x\, |x\rangle (-\psi(x)) \\
&= -|\psi\rangle
\end{aligned}$$

したがって、

$$[\hat{x}, \hat{\partial}_x] = -\hat{I}$$

であることが分かる。この式を $i\hbar$ 倍したものと式 (1.13) とを辺々足し合わせると、

$$[\hat{x}, \hat{p} + i\hbar\hat{\partial}_x] = 0$$

となる。ここで一次元系で $\hat{x}$ と交換するのは、$\hat{x}$ の関数 $A(\hat{x})$ であるため、

$$\hat{p} + i\hbar\hat{\partial}_x = A(\hat{x})$$

とおける。移項すれば、$\hat{p} = -i\hbar\hat{\partial}_x + A(\hat{x})$ が結論付けられる。したがって、正準交換関係を満たすような $\hat{p}$ の表し方には不定性がある[*14]。以後 $A(\hat{x}) = 0$ すなわち $\hat{p} = -i\hbar\hat{\partial}_x$ として話を進める。$\hat{p}$ を $\langle x|\,,|\psi\rangle$ で挟めば、

$$\langle x|\,\hat{p}\,|\psi\rangle = -i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\langle x|\psi\rangle$$

が得られる。古典的なハミルトニアン H は、運動エネルギーとポテンシャルエネルギーの和で $H = \frac{p^2}{2m} + V(x)$ で表せられる。この x, p を正準交換関係を満たすような非可換なオブザーバブル $\hat{x}, \hat{p}$ で置き換えたものが、量子力学でのハミルトニアン $\hat{H}$ である。$\hat{x}, \hat{p}$ はエルミート演算子であるので、ハミルトニアン $\hat{H}$ もエルミート演算子である。ハミルトニアンの固有方程式は、

$$\hat{H}\,|\psi_n\rangle = E_n\,|\psi_n\rangle$$

で書かれる。ここに、$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + V(\hat{x})$ を代入すると、

$$\left(\frac{\hat{p}^2}{2m} + V(\hat{x})\right)|\psi_n\rangle = E_n\,|\psi_n\rangle$$

$\hat{p} = -i\hbar\hat{\partial}_x$ を代入して、$\langle x|$ を作用させると、

$$\begin{aligned}
&\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\hat{\partial}_x^2 + V(\hat{x})\right)|\psi_n\rangle = E_n\,|\psi_n\rangle \\
\therefore\quad &\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x)\right)\psi_n(x) = E_n\psi_n(x)
\end{aligned}$$

となる。最後の式は波動力学において**定常シュレーディンガー方程式**と呼ばれる。この式は、n 個の波動関数 $\psi_n(x)$ とエネルギー固有値 E_n を未知量とした固有方程式であり、二階微分方程式でもある。

位置表示と運動量表示

$\hat{p}$ の対応式、

$$\langle x|\,\hat{p}\,|\psi\rangle = -i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\langle x|\psi\rangle$$

[*14] この項はゲージ自由度と呼ばれ、磁場との相互作用を扱う上で重要となる。

において $|\psi\rangle = |p\rangle$ を代入してみよう。$|p\rangle$ は運動量固有ケットなので、

$$
\begin{aligned}
\langle x|\,\hat{p}\,|p\rangle &= -i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\langle x|p\rangle \\
p\,\langle x|p\rangle &= -i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\langle x|p\rangle
\end{aligned}
$$

と変形できる。$\langle x|p\rangle$ は p を固定すれば x の関数とみれる。したがって変数分離により、

$$
\langle x|p\rangle = Ce^{\frac{ipx}{\hbar}}
$$

と求めることができる。規格化定数 C は、

$$
\begin{aligned}
\delta(p'-p) &= \langle p'|p\rangle \\
&= \int \mathrm{d}x\,\langle p'|x\rangle\,\langle x|p\rangle \\
&= |C|^2\int \mathrm{d}x\,e^{\frac{i(p-p')x}{\hbar}} \\
&= |C|^2 2\pi\hbar\delta(p'-p)
\end{aligned}
$$

より、$C = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}$ と求まる。最後の等式ではデルタ関数の指数関数による表現（付録で解説する）を用いた。したがって、

$$
\langle x|p\rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}e^{\frac{ipx}{\hbar}}
$$

が得られる。これを用いれば、位置表示の波動関数 $\psi(x)$ と運動量表示の波動関数 $\tilde{\psi}(p)$ との対応関係が得られる。

$$
\begin{aligned}
\psi(x) &= \langle x|\psi\rangle \\
&= \int \mathrm{d}p\,\langle x|p\rangle\,\langle p|\psi\rangle \\
&= \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\int \mathrm{d}p\,e^{\frac{ipx}{\hbar}}\,\tilde{\psi}(p)
\end{aligned}
$$

$$
\begin{aligned}
\tilde{\psi}(p) &= \langle p|\psi\rangle \\
&= \int \mathrm{d}x\,\langle p|x\rangle\,\langle x|\psi\rangle \\
&= \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\int \mathrm{d}x\,e^{-\frac{ipx}{\hbar}}\,\psi(x)
\end{aligned}
$$

これらの関係式は、位置表示と運動量表示をつなぐ**フーリエ変換**である。

1.4.3　掛け算演算子

位置演算子の n 乗が掛けられたケット $\hat{x}^n |\psi\rangle$ を $|x\rangle$ で展開してみよう。

$$\begin{aligned}\hat{x}^n |\psi\rangle &= \int \mathrm{d}x\, |x\rangle\langle x| \, \hat{x}^n \, |\psi\rangle \\ &= \int \mathrm{d}x\, |x\rangle \, x^n \, \langle x|\psi\rangle \\ &= \int \mathrm{d}x\, |x\rangle \, x^n \psi(x)\end{aligned}$$

したがって、一般に $\hat{x}$ の解析的な（つまりテイラー展開可能な）関数 $V(\hat{x})$ について、

$$V(\hat{x})\, |\psi\rangle = \int \mathrm{d}x\, |x\rangle \, V(x)\psi(x)$$

が成り立つ。$|x\rangle$ を基底に展開すれば、演算子 $\hat{x}$ は単に実数 x と見ることができる。同様にして、$\hat{p}$ の解析的な関数 $G(\hat{p})$ について、

$$G(\hat{p})\, |\psi\rangle = \int \mathrm{d}p\, |p\rangle \, G(p)\tilde{\psi}(p)$$

が成り立つ。よって $|p\rangle$ で展開すれば、演算子 $\hat{p}$ の方を実数 p と見ることができる。

1.4.4　多変数の場合

今までの議論を多変数系について拡張しよう。例えば三次元の粒子ならば、位置は $\boldsymbol{x} = (x_1, x_2, x_3)$ であり運動量は $\boldsymbol{p} = (p_1, p_2, p_3)$ である。その添え字を一般化して x_i, p_j などと書く。n 変数でも同じ議論ができる（例えば三次元の粒子が 2 つあれば）が、三次元の場合について述べるだけで十分である。

三次元の場合に要請される正準交換関係は、

$$\begin{aligned}[\hat{x}_i, \hat{p}_j] &= i\hbar\delta_{ij}\hat{I} \\ [\hat{x}_i, \hat{x}_j] &= 0 \\ [\hat{p}_i, \hat{p}_j] &= 0\end{aligned}$$

である。さて、位置 $\hat{x}_1, \hat{x}_2, \hat{x}_3$ は互いに可換なので、同時固有ケット $|x_1, x_2, x_3\rangle$ が存在する。それを $|\boldsymbol{x}\rangle$ と書くことにする。位置ベクトルの演算子を

$$\hat{\boldsymbol{x}}\, |\boldsymbol{x}\rangle \coloneqq \boldsymbol{x}\, |\boldsymbol{x}\rangle$$

で定義しよう。$|\boldsymbol{x}\rangle$ も完全規格直交系を成すので、

$$\begin{gathered}\int \mathrm{d}^3x\, |\boldsymbol{x}\rangle\langle\boldsymbol{x}| = \hat{I} \\ \langle\boldsymbol{x'}|\boldsymbol{x}\rangle = \delta^3(\boldsymbol{x'} - \boldsymbol{x})\end{gathered}$$

が成り立つ。ここで、

$$\int \mathrm{d}^3x \coloneqq \iiint \mathrm{d}x_1\,\mathrm{d}x_2\,\mathrm{d}x_3$$
$$\delta^3(\boldsymbol{x'}-\boldsymbol{x}) \coloneqq \delta(x_1'-x_1)\delta(x_2'-x_2)\delta(x_3'-x_3)$$

という略記を用いた。このとき、$|\psi\rangle$ の $|\boldsymbol{x}\rangle$ での展開は、

$$\begin{aligned}|\psi\rangle &= \int \mathrm{d}^3x\,|\boldsymbol{x}\rangle\,\langle\boldsymbol{x}|\psi\rangle \\ &= \int \mathrm{d}^3x\,|\boldsymbol{x}\rangle\,\psi(\boldsymbol{x})\end{aligned}$$

と書ける。$\psi(\boldsymbol{x}) \coloneqq \langle\boldsymbol{x}|\psi\rangle$ は三次元の粒子の波動関数である。

同じように運動量の同時固有ケットを $|p_1,p_2,p_3\rangle$、運動量ベクトルの演算子を、$\hat{\boldsymbol{p}}\,|\boldsymbol{p}\rangle \coloneqq \boldsymbol{p}\,|\boldsymbol{p}\rangle$ で定義する。位置固有ケットと同様に、

$$\int \mathrm{d}^3p\,|\boldsymbol{p}\rangle\langle\boldsymbol{p}| = \hat{I}$$
$$\langle\boldsymbol{p'}|\boldsymbol{p}\rangle = \delta^3(\boldsymbol{p'}-\boldsymbol{p})$$
$$|\psi\rangle = \int \mathrm{d}^3p\,|\boldsymbol{p}\rangle\,\tilde{\psi}(\boldsymbol{p})$$

が成り立つ。$\tilde{\psi}(\boldsymbol{p}) \coloneqq \langle\boldsymbol{p}|\psi\rangle$ は運動量表示の波動関数である。

運動量の対応関係は、

$$\langle\boldsymbol{x}|\,\hat{\boldsymbol{p}}\,|\psi\rangle = -i\hbar\boldsymbol{\nabla}\,\langle\boldsymbol{x}|\psi\rangle$$

である。三次元でのハミルトニアンは、$\hat{H} = \frac{\hat{\boldsymbol{p}}^2}{2m} + V(\hat{\boldsymbol{x}})$ で書けるので、三次元での定常シュレーディンガー方程式は、

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(\boldsymbol{x})\right)\psi_n(\boldsymbol{x}) = E_n\psi(\boldsymbol{x})$$

である。

また、

$$\langle\boldsymbol{x}|\boldsymbol{p}\rangle = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{\frac{3}{2}}}\exp\left(\frac{i\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{x}}{\hbar}\right)$$

であるので、フーリエ変換の式は、

$$\psi(\boldsymbol{x}) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{\frac{3}{2}}}\int \mathrm{d}^3p\,\tilde{\psi}(\boldsymbol{p})\exp\left(\frac{i\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{x}}{\hbar}\right)$$
$$\tilde{\psi}(\boldsymbol{p}) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{\frac{3}{2}}}\int \mathrm{d}^3x\,\psi(\boldsymbol{x})\exp\left(-\frac{i\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{x}}{\hbar}\right)$$

と書き換えられる。

コラム：

あ

1.5 非可換物理量と不確定性関係

1.5.1 同時対角化不可能

非可換な演算子 $\hat{A}, \hat{B}$ ついて考えよう。すなわち $[\hat{A}, \hat{B}] \neq 0$ であるとする。このような演算子 $\hat{A}, \hat{B}$ を同時に対角化する固有ケットの完全系は存在しないことを示そう。$\hat{A}, \hat{B}$ の同時固有ケット $|a, b\rangle$ が完全系を成し、それぞれのケットについて、

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

を満たすと仮定する。すると、任意のケット $|\psi\rangle$ は完全系で展開できたので、

$$|\psi\rangle = \sum_a \sum_b C_{ab}\,|a,b\rangle$$

が成り立つ。C_{ab} は展開係数である。この $|\psi\rangle$ に $[\hat{A}, \hat{B}]$ を作用させる。

$$\begin{aligned}
[\hat{A}, \hat{B}]\ |\psi\rangle &= [\hat{A}, \hat{B}] \sum_a \sum_b C_{ab}\,|a,b\rangle \\
&= \sum_a \sum_b C_{ab}(\hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A})\,|a,b\rangle \\
&= \sum_a \sum_b C_{ab}(ab - ba)\,|a,b\rangle \\
&= 0
\end{aligned}$$

であるので、$[\hat{A}, \hat{B}] = 0$ となり矛盾する。ここで単に $|a, b\rangle$ を一つ持ってきて $[\hat{A}, \hat{B}]$ を作用させるだけでは、演算子の同等を示すことはできないことに注意されたい。そこで完全系を成すことを仮定して、任意のケットについて $[\hat{A}, \hat{B}]$ を作用させて 0 になることを示し、矛盾を導いた。したがって、ここまでの議論では非可換な演算子 $\hat{A}, \hat{B}$ に対する同時固有ケット $|a, b\rangle$ が 1 つも存在しないということは示していない。実際そのような例は存在して、軌道角運動量演算子 $\hat{l}_x, \hat{l}_y, \hat{l}_z$ は互いに非可換であるが、$l = 0, m = 0$ のケットに対して同じ固有値 0 を与える。

1.5.2 非可換物理量の測定

ある状態 $|\psi\rangle$ についてオブザーバブル A を測定すると、測定後の状態は $\frac{|a\rangle\langle a|\psi\rangle}{|\langle a|\psi\rangle|}$ と書ける。$\frac{\langle a|\psi\rangle}{|\langle a|\psi\rangle|}$ は位相因子なので簡単のために 1 とすると、測定後の状態は単に $|a\rangle$ と書ける。この状態において $\hat{A}$ と非可換なオブザーバブル $\hat{B}$ を測定する。$\hat{A}, \hat{B}$ は同時対角化不可能なので、一般に $|a\rangle$

は $\hat{B}$ の固有状態ではない。したがって $\hat{B}$ の固有値 b を得る確率は $|\langle b|a\rangle|^2$ であり、測定後の状態は $|b\rangle$ へ移る。また状態 $|b\rangle$ について再度 $\hat{A}$ を測定すると、固有値 a を得る確率は $|\langle a|b\rangle|^2$ となる。つまり、一度 $\hat{A}$ の固有状態 $|a\rangle$ を観測したとしても $\hat{B}$ の測定を途中に挟めば、その後の測定で $|a\rangle$ を観測できるとは限らない。これは物理量が可換な古典力学からは説明ができない現象である。

1.5.3 ロバートソンの不確定性関係

今まで 1 つの系について非可換な物理量を測定する場合を考えてきたが、今度は複数の系について測定する場合について考えよう。全く同じ状態の $|\psi\rangle$ をたくさん用意しよう。それらを 2 つのグループに分ける。一つ目のグループについてオブザーバブル $\hat{A}$ を測定する。$\hat{A}$ の統計的な期待値 $\langle\hat{A}\rangle$ は、

$$\langle\hat{A}\rangle = \sum_n a_n P(a_n \leftarrow \psi) = \langle\psi|\hat{A}|\psi\rangle$$

で書けることは 1.3 節で既に確認した。統計的な期待値を用いれば期待値からのずれである分散を定義できる。$\hat{A}$ の分散を $V(\hat{A})$ と書けば、

$$\begin{aligned} V(\hat{A}) &\coloneqq \langle(\hat{A} - \langle\hat{A}\rangle\,\hat{I})^2\rangle \\ &= \langle\hat{A}^2\rangle - \langle\hat{A}\rangle^2 \end{aligned} \tag{1.14}$$

である。式 (1.14) を見やすくするために、新たな演算子として

$$\mathit{\Delta}\hat{A} \coloneqq \hat{A} - \langle\hat{A}\rangle\,\hat{I}$$

を導入する。また $\hat{A}$ の標準偏差 $\sigma(\hat{A})$ は分散を用いて、

$$\sigma(\hat{A}) \coloneqq \sqrt{V(\hat{A})} = \sqrt{\langle(\mathit{\Delta}\hat{A})^2\rangle}$$

と書ける。$\sigma(\hat{A})$ は数学的には標準偏差と呼ばれる量だが、量子力学では**不確かさ**と呼ばれることが多い。

もう一つのグループについてはオブザーバブル $\hat{B}$ を測定したとき、その期待値 $\langle\hat{B}\rangle$ は $\langle\psi|\hat{B}|\psi\rangle$ となる。$\hat{B}$ についての不確かさを $\sigma(\hat{B})$ と書こう。このとき、$\hat{A}$ と $\hat{B}$ の不確かさについて、

$$\sigma(\hat{A})\sigma(\hat{B}) \geq \frac{1}{2}|\langle[\hat{A}, \hat{B}]\rangle|$$

が成り立つ。この関係を**ロバートソンの不確定性関係**という。式の証明の前にこの物理的意味を簡単に述べる。まず $\hat{A}$ と $\hat{B}$ が可換な場合、交換子 $[\hat{A}, \hat{B}]$ は 0 なので、$\sigma(\hat{A})\sigma(\hat{B}) \geq 0$ となる。したがって、可換な物理量に対しては互いに標準偏差が 0 になるような測定が可能である。しかしながら、$\hat{A}$ と $\hat{B}$ が非可換な場合、両方の不確かさを 0 にすることは不可能である。

ロバートソンの不確定性関係を証明するために、$\mathit{\Delta}\hat{A}, \mathit{\Delta}\hat{B}$ についていくつかの性質を示しておく。まず、$\hat{A}, \hat{B}$ はオブザーバブルであるのでエルミート演算子である。したがって $\mathit{\Delta}\hat{A}, \mathit{\Delta}\hat{B}$ もエ

ルミート演算子である。またその積 $\Delta\hat{A}\Delta\hat{B}$ は、次のように変形できる。

$$
\begin{aligned}
\Delta\hat{A}\Delta\hat{B} &= \frac{1}{2}\Big(\Delta\hat{A}\Delta\hat{B} - \Delta\hat{B}\Delta\hat{A} + \Delta\hat{A}\Delta\hat{B} + \Delta\hat{B}\Delta\hat{A}\Big) \\
&= \frac{1}{2}[\Delta\hat{A}, \Delta\hat{B}] + \frac{1}{2}\{\Delta\hat{A}, \Delta\hat{B}\} \qquad (1.15)
\end{aligned}
$$

ただし、一般に $\{\hat{A}, \hat{B}\} := \hat{A}\hat{B} + \hat{B}\hat{A}$ は**反交換子**と呼ばれるものである。また、$[\Delta\hat{A}, \Delta\hat{B}]$ は反エルミート演算子であり、$\{\Delta\hat{A}, \Delta\hat{B}\}$ はエルミート演算子であることは容易に確認できる。ただし反エルミート演算子とは $\hat{A}^\dagger = -\hat{A}$ を満たすような演算子のことである。一般に $\hat{A}$ がエルミート演算子なら $\langle\psi|\hat{A}|\psi\rangle$ は実数になり、$\hat{A}$ が反エルミート演算子なら $\langle\psi|\hat{A}|\psi\rangle$ は純虚数となる。そのことは、

$$
\begin{aligned}
\langle\psi|\hat{A}|\psi\rangle^* &= \langle\psi|\hat{A}^\dagger|\psi\rangle \\
&= \langle\psi|\pm\hat{A}|\psi\rangle = \pm\langle\psi|\hat{A}|\psi\rangle
\end{aligned}
$$

によって確かめられる（$+$ を取ればエルミートの場合、$-$ を取れば反エルミートの場合に対応する）。以上より、$\langle\psi|[\Delta\hat{A}, \Delta\hat{B}]|\psi\rangle$ は純虚数、$\langle\psi|\{\Delta\hat{A}, \Delta\hat{B}\}|\psi\rangle$ は実数であることが示せた。

さて任意のケット $|\chi\rangle, |\xi\rangle$ についてコーシー・シュワルツ不等式 (1.1) が成り立つのだった。もう一度書くと、

$$
\langle\chi|\chi\rangle\langle\xi|\xi\rangle \geq |\langle\chi|\xi\rangle|^2
$$

である。ただし $|\xi\rangle = c|\chi\rangle$ なる $c \in \mathbb{C}$ が存在するとき等号が成立する。ここに $|\chi\rangle = \Delta\hat{A}|\psi\rangle, |\xi\rangle = \Delta\hat{B}|\psi\rangle$ を代入すると、

$$
\begin{aligned}
\langle\psi|(\Delta\hat{A})^2|\psi\rangle\langle\psi|(\Delta\hat{B})^2|\psi\rangle &\geq |\langle\psi|\Delta\hat{A}\Delta\hat{B}|\psi\rangle|^2 \\
\therefore\quad \sigma(\hat{A})^2\sigma(\hat{B})^2 &\geq |\langle\psi|\Delta\hat{A}\Delta\hat{B}|\psi\rangle|^2
\end{aligned}
$$

が成り立つ。右辺に式 (1.15) を代入すると、

$$
\begin{aligned}
\sigma(\hat{A})^2\sigma(\hat{B})^2 &\geq \frac{1}{4}\Big|\langle\psi|[\Delta\hat{A}, \Delta\hat{B}]|\psi\rangle + \langle\psi|\{\Delta\hat{A}, \Delta\hat{B}\}|\psi\rangle\Big|^2 \\
&= \frac{1}{4}|\langle\psi|[\Delta\hat{A}, \Delta\hat{B}]|\psi\rangle|^2 + \frac{1}{4}\langle\psi|\{\Delta\hat{A}, \Delta\hat{B}\}|\psi\rangle^2 \\
&\geq \frac{1}{4}|\langle\psi|[\Delta\hat{A}, \Delta\hat{B}]|\psi\rangle|^2 \\
&= \frac{1}{4}|\langle\psi|[\hat{A}, \hat{B}]|\psi\rangle|^2 \\
\therefore\quad \sigma(\hat{A})\sigma(\hat{B}) &\geq \frac{1}{2}|\langle\psi|[\hat{A}, \hat{B}]|\psi\rangle|
\end{aligned}
$$

となり示された。

さて、等号成立条件はある複素数 c について

$$
\Delta\hat{B}|\psi\rangle = c\Delta\hat{A}|\psi\rangle \qquad (1.16)
$$

$$
\langle\psi|\{\Delta\hat{A}, \Delta\hat{B}\}|\psi\rangle = 0 \qquad (1.17)
$$

である。(1.17) を変形すると、

$$\langle\psi|\Delta\hat{A}\Delta\hat{B}|\psi\rangle + \langle\psi|\Delta\hat{B}\Delta\hat{A}|\psi\rangle = 0$$

となる。ここに (1.16) を代入すると、$\langle\psi|\,\Delta\hat{B} = \langle\psi|\,\Delta\hat{A}c^*$ に注意すると、

$$c\,\langle\psi|(\Delta\hat{A})^2|\psi\rangle + c^*\,\langle\psi|(\Delta\hat{A})^2|\psi\rangle = 0$$
$$\therefore \quad (c+c^*)\sigma(\hat{A})^2 = 0$$

ここで自明な等号成立条件 $\sigma(\hat{A}) = 0$ を除けば、$c + c^* = 0$ が得られる。すなわち、c は純虚数であり、ある実数 κ を用いて $c = i\kappa$ と書ける。したがって等号成立条件は一つの式で表せて、

$$\Delta\hat{B}\,|\psi\rangle = i\kappa\Delta\hat{A}\,|\psi\rangle$$
$$\therefore \quad (\hat{B} - i\kappa\hat{A})\,|\psi\rangle = (\,\langle\hat{B}\rangle - i\kappa\,\langle\hat{A}\rangle)\,|\psi\rangle$$

となる。

ロバートソンの不確定性関係

オブザーバブル $\hat{A}, \hat{B}$ と任意の状態ケット $|\psi\rangle$ について、

$$\sigma(\hat{A})\sigma(\hat{B}) \geq \frac{1}{2}|\,\langle[\hat{A},\hat{B}]\,\rangle| \tag{1.18}$$

が成り立つ。ただし等号成立条件はある実数 κ、あるケット $|\psi\rangle$ が存在して、

$$(\hat{B} - i\kappa\hat{A})\,|\psi\rangle = (\,\langle\hat{B}\rangle - i\kappa\,\langle\hat{A}\rangle)\,|\psi\rangle \tag{1.19}$$

が成り立つことである。

式 (1.19) を満たすような状態 $|\psi\rangle$ のことを**一般コヒーレント状態**という。

式 (1.18) に $\hat{A} = \hat{x}, \hat{B} = \hat{p}$ を代入してみよう。正準交換関係 $[\hat{x},\hat{p}] = i\hbar$ より、

$$\sigma(\hat{x})\sigma(\hat{p}) \geq \frac{\hbar}{2}$$

この不等式を**ケナードの不確定性関係**と呼ぶ。

1.5.4 ハイゼンベルクの不確定性原理

ハイゼンベルクの不確定性原理は、ロバートソンの不確定性関係のような統計平均について成り立つ関係とは全くの別の関係である。歴史的にはハイゼンベルグの不確定性原理はこのような式で書かれることが多い：

$$\Delta x\Delta p \geq \hbar$$

ここで Δx は位置の測定誤差、Δp は位置の測定によって運動量の測定値が受ける影響（擾乱）と考えるのが、もっとも自然である。しかしながらこの意味ではハイゼンベルグの不確定性原理は厳

密には成り立っていない。測定誤差と擾乱という視点に立脚した厳密な不確定性関係は「小沢の不等式」「アーサーケリーグッドマンの不等式」などがある。

1.6　時間発展

ここでは状態ケット $|\psi\rangle$ が時間に依存する $|\psi(t)\rangle$ として議論を行う。

1.6.1　シュレーディンガー方程式

ケット $|\psi(t)\rangle$ の時間発展は以下に示すシュレーディンガー方程式で表すことができる。

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}|\psi(t)\rangle = \hat{H}|\psi(t)\rangle \tag{1.20}$$

この式を要請するか導出するかで流儀が分かれるが、まずはこの式を認めて性質を調べていく。$\hat{H}$ の具体的な形は系によって異なる。特にポテンシャル $V(\hat{x})$ を持つ場合は、

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + V(\hat{x})$$

と書ける。$V(\hat{x}) = 0$ の時は自由粒子と呼ばれる。

さて、ケット $|\psi_1(t)\rangle$ と $|\psi_2(t)\rangle$ がシュレーディンガー方程式 (1.20) を満たすとする。その時、$|\psi_1(t)\rangle$ と $|\psi_2(t)\rangle$ の線形結合もシュレーディンガー方程式の解となる。時間微分とハミルトニアンが線形であることから、

$$\begin{aligned}
i\hbar\frac{\partial}{\partial t}(c_1|\psi_1(t)\rangle + c_2|\psi_2(t)\rangle) &= c_1 i\hbar\frac{\partial}{\partial t}|\psi_1(t)\rangle + c_2 i\hbar\frac{\partial}{\partial t}|\psi_2(t)\rangle \\
&= c_1\hat{H}|\psi_1(t)\rangle + c_2\hat{H}|\psi_2(t)\rangle \\
&= \hat{H}(c_1|\psi_1(t)\rangle + c_2|\psi_2(t)\rangle)
\end{aligned}$$

が成り立つためである。これを重ね合わせの原理という。

シュレーディンガー方程式 (1.20) の両辺の双対対応を取れば、

$$\langle\psi|\left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\right) = \langle\psi|\hat{H}$$

となる。この式は後にハイゼンベルク方程式を導くときに役に立つ。

1.6.2　ユニタリー演算子からの類推

ユニタリー演算子の構成方法を学び、シュレーディンガー方程式を用いずにハミルトニアンの形を類推してみる。状態ケットが時間 t に依存するとして、$|\psi(t)\rangle$ と書くことにする。

このとき時間 t の時間並進演算子 $\hat{U}(t)$ を、

$$\hat{U}(t)|\psi(t_0)\rangle \coloneqq |\psi(t_0 + t)\rangle$$

で定義する。積の演算子の定義と時間並進演算子の定義を順次用いれば、

$$\hat{U}(-t)\hat{U}(t)\left|\psi(t_0)\right\rangle = \left|\psi(t_0+t-t)\right\rangle = \left|\psi(t_0)\right\rangle$$

したがって、

$$\hat{U}(-t)\hat{U}(t) = \hat{I}$$
$$\hat{U}(-t) = \hat{U}^{-1}(t)$$

が成り立つ。したがって、時間発展演算子の逆演算子は t を $-t$ に置き換えることで得られる。同様に、

$$\hat{U}(t_1)\hat{U}(t_2)\left|\psi(t_0)\right\rangle = \left|\psi(t_0+t_1+t_2)\right\rangle = \hat{U}(t_1+t_2)\left|\psi(t_0)\right\rangle$$

であるから、

$$\hat{U}(t_1)\hat{U}(t_2) = \hat{U}(t_1+t_2)$$

も成り立つ。規格化されたケット $\left|\psi\right\rangle$ において $\left\langle\psi|\psi\right\rangle = 1$ は全確率が 1 というのを表すのだった。これが時間変化によって保存されることを要請する。

$$\left\langle\psi(0)|\psi(0)\right\rangle = \left\langle\psi(t)|\psi(t)\right\rangle = \left\langle\psi(0)\right|\hat{U}^\dagger\hat{U}\left|\psi(0)\right\rangle$$

したがって、この要請は時間発展演算子のユニタリー性 $\hat{U}^\dagger\hat{U} = \hat{I}$ を要請することに等しい。

次にこのような性質を満たすような演算子を具体的に構成することを考える。

あるエルミート演算子 $\hat{A}$ と実数 λ によって作られる $\hat{U} \coloneqq e^{-\frac{i\hat{A}\lambda}{\hbar}}$ という演算子を考える。この $\hat{U}$ は、

$$\hat{U}^\dagger = (e^{-\frac{i\hat{A}\lambda}{\hbar}})^\dagger = e^{\frac{i\hat{A}^\dagger\lambda}{\hbar}} = e^{\frac{i\hat{A}\lambda}{\hbar}}$$

であるので、$\hat{U}\hat{U}^\dagger = \hat{I}$ となり、ユニタリー演算子である。指数関数の引数は必ず無次元量にしなければいけないので、$\hat{A}\lambda$ が $\hbar$ と同じ次元を持つ必要がある。物理量にはある程度共役な関係を持つ組があるのでそれを用いる。共役な物理量とは掛け合わせた時に作用の次元を持つような物理量の組のことである。例えば、x と p、H と t などが挙げられる。オブザーバブルとして $\hat{H}$ を選ぶときは、$\lambda = t$ とおけば、分子分母が作用の次元を有し、指数関数の引数を無次元化できる。このとき $\hat{H}$ は時間並進の**生成子**と呼ばれる。

このように構成したユニタリー変換 $e^{-\frac{i\hat{H}t}{\hbar}}$ の性質を調べてみよう。

$$(e^{-\frac{i\hat{H}t}{\hbar}})^{-1} = (e^{-\frac{i\hat{H}t}{\hbar}})^\dagger = e^{\frac{it\hat{H}}{\hbar}}$$

であるので、$e^{-\frac{i\hat{H}t}{\hbar}}$ の逆演算は t を $-t$ に置き換えたものである。
$\left|\psi(t)\right\rangle$ を時間 t について解析的であることを仮定して、テイラー展開してみよう。

$$\begin{aligned}
\left|\psi(t)\right\rangle &= \left|\psi(0)\right\rangle + \frac{\partial\left|\psi(0)\right\rangle}{\partial t}t + \frac{1}{2!}\frac{\partial^2\left|\psi(0)\right\rangle}{\partial t^2}t^2 + \dots \\
&= \left\{\sum_{n=0}^{\infty}\frac{t^n}{n!}\left(\frac{\partial}{\partial t}\right)^n\right\}\left|\psi(0)\right\rangle \\
&= \exp\left\{t\frac{\partial}{\partial t}\right\}\left|\psi(0)\right\rangle
\end{aligned}$$

一方、時間発展演算子の定義より、

$$|\psi(t)\rangle = \hat{U}(t)\,|\psi(0)\rangle$$

したがって、$e^{-\frac{i\hat{H}t}{\hbar}}$ を時間発展演算子とするためには、

$$\hat{H} = i\hbar\frac{\partial}{\partial t}$$

と対応付ければよいことが分かる。この対応は任意のケットに作用させても成り立つので、

$$\hat{H}\,|\psi(t)\rangle = i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\,|\psi(t)\rangle$$

この式がシュレーディンガー方程式である。

時間発展演算子

$$|\psi(t)\rangle = \hat{U}(t)\,|\psi(0)\rangle$$
$$\hat{U}(t) = e^{-\frac{i\hat{H}t}{\hbar}}$$

を満たす演算子 $\hat{U}(t)$ を時間発展演算子と呼ぶ。

従って、ハミルトニアンが時間に陽に依存しない場合、ユニタリーな時間発展とシュレーディンガー方程式は等価である*15。ハミルトニアンが時間に陽に依存する場合は後述する。

1.6.3 時間発展の描像

時間に依存するケット $|\psi(t)\rangle$ についてオブザーバブル $\hat{A}$ の期待値を考えよう。このとき、期待値は時間発展演算子 $\hat{U}(t)$ を用いて、

$$\begin{aligned}\langle\psi(t)|\hat{A}|\psi(t)\rangle &= \langle\psi(0)|\hat{U}(t)^{\dagger}\hat{A}\hat{U}(t)|\psi(0)\rangle \\ &= \langle\psi(0)|e^{\frac{i\hat{H}t}{\hbar}}\hat{A}e^{-\frac{i\hat{H}t}{\hbar}}|\psi(0)\rangle \\ &= \langle\psi(0)|\hat{A}(t)|\psi(0)\rangle\end{aligned}$$

と二通りに書ける。ただし、

$$\hat{A}(t) \coloneqq e^{\frac{i\hat{H}t}{\hbar}}\hat{A}e^{-\frac{i\hat{H}t}{\hbar}}$$

とおいた。時間発展演算子を $|\psi(0)\rangle$ か $\hat{A}$ のどちらかに押し付けることで、二通りの表記が得られている。状態ケットが時間に依存するという描像を**シュレーディンガー描像**という。一方、演算子

*15 厳密には他にも数学的ないくつかの仮定の下で等価である

が時間に依存するという描像を**ハイゼンベルク描像**という。まず、$\langle\psi(t)|\hat{A}|\psi(t)\rangle$ の時間微分を求める。

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\langle\psi(t)|\hat{A}|\psi(t)\rangle = (\langle\psi(t)|\frac{\partial}{\partial t})\hat{A}|\psi(t)\rangle + \langle\psi(t)|\frac{\partial\hat{A}}{\partial t}|\psi(t)\rangle + \langle\psi(t)|\hat{A}(\frac{\partial}{\partial t}|\psi(t)\rangle)$$

シュレーディンガー方程式より、

$$\begin{aligned}
&= \langle\psi(t)|(-\frac{\hat{H}}{i\hbar})\hat{A}|\psi(t)\rangle + \langle\psi(t)|\hat{A}(\frac{\hat{H}}{i\hbar})|\psi(t)\rangle + \langle\psi(t)|\frac{\partial\hat{A}}{\partial t}|\psi(t)\rangle \\
&= \frac{1}{i\hbar}\langle\psi(t)|([\hat{A},\hat{H}] + i\hbar\frac{\partial\hat{A}}{\partial t})|\psi(t)\rangle
\end{aligned}$$

ここで演算子 $\hat{A}$ が時間に陽に依存しない（すなわち時間発展演算子を掛けるまでは $\hat{A}$ の引数に直接 t が含まれることは無い）と仮定すると、

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\langle\psi(t)|\hat{A}|\psi(t)\rangle = \frac{1}{i\hbar}\langle\psi(t)|([\hat{A},\hat{H}])|\psi(t)\rangle \tag{1.21}$$

が得られる。これをシュレーディンガー描像でのハイゼンベルク方程式という。

次に $\hat{A}(t)$ の時間微分を求める。$\hat{A}$ 自身に陽な時間依存性が無いとすると、

$$\begin{aligned}
\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\hat{A}(t) &= \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\left(e^{\frac{i\hat{H}t}{\hbar}}\hat{A}e^{-\frac{i\hat{H}t}{\hbar}}\right) \\
&= \frac{i\hat{H}}{\hbar}e^{\frac{i\hat{H}t}{\hbar}}\hat{A}e^{-\frac{i\hat{H}t}{\hbar}} + e^{\frac{i\hat{H}t}{\hbar}}\hat{A}(-\frac{i\hat{H}}{\hbar})e^{-\frac{i\hat{H}t}{\hbar}} \\
&= \frac{i\hat{H}}{\hbar}\hat{A}(t) - \frac{i}{\hbar}\hat{A}(t)\hat{H} \\
&= \frac{1}{i\hbar}[\hat{A}(t),\hat{H}]
\end{aligned}$$

であるので、結局

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\hat{A}(t) = \frac{1}{i\hbar}[\hat{A}(t),\hat{H}] \tag{1.22}$$

が成り立つ。この式はハイゼンベルク描像でのハイゼンベルク方程式である。

1.6.4　定常状態

ハイゼンベルク方程式 (1.22) の $\hat{A}$ に $\hat{H}$ を代入する。$[\hat{H},\hat{H}]=0$ であるので、

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\hat{H}(t) = 0$$

したがって、ハミルトニアンが陽に時間依存しない場合、ハミルトニアンは保存される。もしハミルトニアンの固有値と固有ケットがあって、

$$\hat{H}|\psi_n\rangle = E_n|\psi_n\rangle \tag{1.23}$$

という固有方程式が成り立っているとき、この関係は時間が経過しても崩れない。したがってエネルギーの固有状態のことを**定常状態**ともいう。式 (1.23) のことを**定常シュレーディンガー方程式**という。時刻 0 でのある状態ケット $|\psi(0)\rangle$ を式 (1.23) の固有ケットで展開すると、

$$|\psi(0)\rangle = \sum_n c_n |\psi_n\rangle$$

となる。このとき時刻 t での状態ケット $|\psi(t)\rangle$ は、時間発展演算子を用いて、

$$\begin{aligned}|\psi(t)\rangle &= e^{-\frac{i\hat{H}t}{\hbar}} |\psi(0)\rangle \\ &= e^{-\frac{i\hat{H}t}{\hbar}} \sum_n c_n |\psi_n\rangle \\ &= \sum_n c_n e^{-\frac{iE_n t}{\hbar}} |\psi_n\rangle\end{aligned}$$

と表せられる。

1.6.5　時間とエネルギーの不確定性関係

古典力学において時間 t というパラメーターは観測者によって任意の精度で測定できる量という扱いを受ける。量子力学もこの立場を取るため、時間 t についての測定誤差は存在しない。したがって、式や式といった意味での不確定性関係は成立しないことをまず念頭においていただきたい。

では量子力学でしばしば時間とエネルギーの不確定性関係と呼ばれている式について説明する。

1.6.6　エーレンフェストの定理

時刻 t でのあるケット $|\psi(t)\rangle$ について、物理量 $\hat{A}$ の期待値を $\langle\hat{A}\rangle$ と書くことにする。ハミルトニアン $\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + V(\hat{x})$ で表される 1 粒子系について、位置 $\hat{x}$ の期待値の時間発展を調べよう。シュレーディンガー描像でのハイゼンベルク方程式 (1.21) より、

$$\begin{aligned}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\langle\hat{x}\rangle &= \frac{1}{i\hbar}\langle[\hat{x},\hat{H}]\rangle = \frac{1}{i\hbar}\langle[\hat{x},\frac{\hat{p}^2}{2m}+V(\hat{x})]\rangle \\ &= \frac{1}{2mi\hbar}\langle[\hat{x},\hat{p}^2]\rangle = \frac{1}{2mi\hbar}\cdot 2i\hbar\langle\hat{p}\rangle \\ &= \frac{\langle\hat{p}\rangle}{m}\end{aligned}$$

とできる。これをさらに t で微分する。ハイゼンベルク方程式を再度使えば、

$$\begin{aligned}\frac{1}{m}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\langle\hat{p}\rangle &= \frac{1}{mi\hbar}\langle[\hat{p},\hat{H}]\rangle = \frac{1}{mi\hbar}\langle[\hat{p},\frac{\hat{p}^2}{2m}+V(\hat{x})]\rangle \\ &= \frac{1}{mi\hbar}\langle[\hat{p},V(\hat{x})]\rangle = \frac{1}{mi\hbar}\left\langle -i\hbar\frac{\partial V}{\partial x}\right\rangle \\ &= -\frac{1}{m}\left\langle\frac{\partial V}{\partial x}\right\rangle\end{aligned}$$

したがって、

$$m\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}t^2}\langle \hat{x}\rangle = -\left\langle \frac{\partial V(\hat{x})}{\partial x}\right\rangle$$

を得る。右辺に出てきた量は、ポテンシャルが粒子に及ぼす力の x 成分の期待値である。この式からは定数 $\hbar$ が消えており、ニュートンの運動方程式に対応する関係式である。したがってある程度の誤差さえ許せば量子的な粒子も古典軌道を描くことが示された。これをエーレンフェストの定理という。

ハイゼンベルク描像においても同様の議論が成り立ち、

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\hat{x}(t) = \frac{\hat{p}(t)}{m} \tag{1.24}$$

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\hat{p}(t) = -\frac{\partial V(\hat{x})}{\partial x} \tag{1.25}$$

である。自由粒子のときは $V(\hat{x}) = 0$ であるので (1.25) より、

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\hat{p}(t) = 0 \qquad \therefore\ \hat{p}(t) = \hat{p}(0)$$

が成り立つ。これを式 (1.24) に代入すると、

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\hat{x}(t) = \frac{\hat{p}(0)}{m} \qquad \therefore\ \hat{x}(t) = \frac{\hat{p}(0)t}{m} + \hat{x}(0)$$

さて時刻 t の位置 $\hat{x}(t)$ と、時刻 0 の位置 $\hat{x}(0)$ において、交換子を取ると、

$$[\hat{x}(t), \hat{x}(0)] = \frac{i\hbar t}{m}\hat{I}$$

となるため、$\hat{x}(t)$ と $\hat{x}(0)$ は可換ではない。これを時間に依らないあるケット $|\psi\rangle$ での不確定性関係の式 (1.18) に代入すると、

$$\left\langle (\Delta\hat{x}(t))^2\right\rangle \left\langle (\Delta\hat{x}(0))^2\right\rangle \geq \frac{\hbar^2 t^2}{4m^2}$$

を得る。したがって、ポテンシャルに束縛されていない粒子は時刻 0 である位置に局在していたとしても、時間とともに位置の不確定性が増大することが確かめられる。

1.6.7 自由粒子解

ここではフーリエ変換の有用性について説明する。一次元シュレーディンガー方程式は、

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}|\psi(t)\rangle = \left(\frac{\hat{p}^2}{2m} + V(\hat{x})\right)|\psi(t)\rangle$$

である。$V(\hat{x}) = 0$ であったり（自由粒子と呼ばれる）、$V(\hat{x})$ が簡単な関数で表されていたりする場合、運動量表示の波動関数に書き換える方が見通しがよい。逆に $V(\hat{x})$ が複雑な場合は位置表示

の方が考えやすい。自由粒子の一次元シュレーディンガー方程式について運動量空間のある状態 $|p\rangle$ へ射影すると、

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\tilde{\psi}(p,t) = \frac{p^2}{2m}\tilde{\psi}(p,t)$$

したがって、

$$\tilde{\psi}(p,t) = \tilde{\psi}(p,0)\exp\left(-\frac{i}{\hbar}\frac{p^2 t}{2m}\right)$$

が得られる。$\tilde{\psi}(p,t)$ は $|\psi(t)\rangle$ を $|p\rangle$ で展開した時の展開係数だった。したがって一般解は、

$$|\psi(t)\rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\int \mathrm{d}p\,|p\rangle\,\tilde{\psi}(p,0)\exp\left(-\frac{i}{\hbar}\frac{p^2 t}{2m}\right) \tag{1.26}$$

である。このケットを用いればハミルトニアン $\hat{H}$ の期待値を求めることができて、

$$\begin{aligned}
\langle\hat{H}\rangle &= \langle\psi(t)|\hat{H}|\psi(t)\rangle \\
&= \iint \mathrm{d}p\,\mathrm{d}p'\,\langle p'|\,\tilde{\psi}^*(p',0)\exp\left(\frac{i}{\hbar}\frac{p'^2 t}{2m}\right)\frac{\hat{p}^2}{2m}\,|p\rangle\,\tilde{\psi}(p,0)\exp\left(-\frac{i}{\hbar}\frac{p^2 t}{2m}\right) \\
&= \iint \mathrm{d}p\,\mathrm{d}p'\,\delta(p-p')\frac{p^2}{2m}\tilde{\psi}^*(p',0)\tilde{\psi}(p,0) \\
&= \frac{1}{2m}\int \mathrm{d}p\,p^2\left|\tilde{\psi}(p,0)\right|^2
\end{aligned}$$

となり、時間 t に依らない（エネルギー保存則）。また $\hat{p}$ の期待値も同様に表すことができて、$\langle\hat{p}\rangle$ が時間に依らないこと（運動量保存則もしくは慣性の法則）も示せる。式 (1.26) に位置ケットに射影して、位置表示波動関数を求めよう。

$$\begin{aligned}
\psi(x,t) &= \frac{1}{2\pi\hbar}\int \mathrm{d}p\,e^{\frac{ipx}{\hbar}}\,\langle p|\psi(0)\rangle\exp\left(-\frac{i}{\hbar}\frac{p^2 t}{2m}\right) \\
&= \frac{1}{2\pi\hbar\sqrt{2\pi\hbar}}\int \mathrm{d}p\int \mathrm{d}x'\exp\left\{-\frac{i}{\hbar}\left(\frac{p^2 t}{2m}-p(x-x')\right)\right\}\langle x'|\psi(0)\rangle \\
&= \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\int \mathrm{d}x'\,\sqrt{\frac{m}{2\pi i\hbar t}}\exp\left\{\frac{im}{2\hbar t}(x-x')^2\right\}\psi(x',0)
\end{aligned}$$

となる。この式は、$\psi(x',t)$ に時間依存の重みを掛けて積分することで、時刻 t における状態の表式を得られるという式である。この重みの部分はプロパゲーターと呼ばれ、正準量子化で仮定したような特異な代数構造を持つ演算子 (q 数) は登場していない。このプロパゲーターを、演算子の代数構造を仮定せずに求められるのではないか、とするのがファインマンの経路積分量子化のアイデアである。

正準交換関係による量子化の弱点は、配位空間が（周期境界を持つなどして）曲がっている場合には定式化が難しいことだった。一方、経路積分による量子化は配位空間の大域的構造を反映することが可能である。

1.6.8 ファインマンの経路積分 ★

一粒子系において経路積分量子化を説明する。一般に、

$$\psi(x_f, t_f) = \langle x_f| \hat{U}(t_f - t_i) |\psi(t_i)\rangle = \int \mathrm{d}x' \langle x_f| \hat{U}(t_f - t_i) |x'\rangle \psi(x', t_i)$$

であるから、プロパゲーター $\langle x_f| \hat{U}(t_f - t_i) |x'\rangle$ が分かれば波動関数の時間発展が追えたことになる。時間発展演算子を位置ケットに押し付けてハイゼンベルグ表示に移る（時刻 t_i での位置は x_i と置き直す）と、

$$\langle x_f| \hat{U}(t_f - t_i) |x_i\rangle = \langle x_f| \exp\left(\frac{i\hat{H}t_f}{\hbar}\right) \exp\left(-\frac{i\hat{H}t_i}{\hbar}\right) |x_i\rangle = \langle x_f, t_f|x_i, t_i\rangle$$

となることに注意しておく。ファインマンの経路積分量子化で仮定される式は以下のようなものである。

経路積分量子化

量子力学的な時間発展を与えるプロパゲーター $\langle x_f, t_f|x_i, t_i\rangle$ は、古典的作用 $S[x]$ を指数の肩に持つ位相因子を全ての経路について足し合わせたもので表現できる。

$$\langle x_f, t_f|x_i, t_i\rangle = \sum_{\text{all path of} x_i \text{to} x_f} \exp\left(\frac{i}{\hbar}S[x]\right)$$

1.7 調和振動子

1.8 合成系とテンソル積空間

物理学ではしばしば合成系（複合系）というものを考える。合成系とは、２つ以上の系を用意してそれらを一つの系と見なした系のことである。量子力学において合成系を扱うためにテンソル積空間というものを導入する。

1.8.1 テンソル積空間の動機

量子力学において合成系を考えたい。すなわち、あるヒルベルト空間 $\mathscr{H}^{(1)}$ 上の状態ケット $\left|\psi^{(1)}\right\rangle \in \mathscr{H}^{(1)}$ と別のヒルベルト空間 $\mathscr{H}^{(2)}$ 上の状態ケット $\left|\psi^{(2)}\right\rangle \in \mathscr{H}^{(2)}$ の両方を合わせて一つの状態ケットと見なしたい。そして、そのような状態ケットの全体集合が合成系のあらゆる状態ケットを含むような新しいヒルベルト空間となることを目指す。そのために二つのヒルベルト空間から新しいヒルベルト空間を作るための積演算が必要である。この時、個々のヒルベルト空間の構造が保存されていることが、量子力学における状態を表すためには必要不可欠である。積演算の候補として、まずは直積を考えてみる。

一般に二つ以上の集合について、その元を単に横に並べて組にすることを直積という。ユークリッド空間 $\mathbb{R}^2$ は二つの実数体 $\mathbb{R}$ の直積を取ったものである。このとき、

$$\mathbb{R}^2 = \mathbb{R} \times \mathbb{R} \coloneqq \{(x_1, x_2) \mid x_i \in \mathbb{R}\,(i = 1, 2)\}$$

と書ける。これが二つの集合に対する直積の定義であり、二つ以上の自然数個の集合の直積はこの定義を複数回使うことで実現できる。

ヒルベルト空間の直積を考える。結論から言うと、ヒルベルト空間同士の直積空間は合成系の状態ベクトルを与えるヒルベルト空間とは見なせないため、合成系を表すことはできない。

二つのヒルベルト空間 $\mathscr{H}^{(1)}, \mathscr{H}^{(2)}$ を用意し、それに属する状態ケットをそれぞれ $\left|\psi^{(1)}\right\rangle, \left|\psi^{(2)}\right\rangle$ とする。この二つの状態は独立で互いに干渉できないものとする。$(1), (2)$ というのは属する空間のラベルであるとする。このケットたちの直積は、$(\left|\psi^{(1)}\right\rangle, \left|\psi^{(2)}\right\rangle)$ という表記で書くことにする。この表記は単に二つのケットを成分に持つ列ベクトルのようなものを考えていると思って欲しい。

さて、系 1 の状態は $\left|\psi^{(1)}\right\rangle = c_1 \left|a_1^{(1)}\right\rangle + c_2 \left|a_2^{(1)}\right\rangle$ という重ね合わせ状態で与えられるとする。一方、系 2 の状態は $\left|\psi^{(2)}\right\rangle = \left|b^{(2)}\right\rangle$ というある固有状態に留まっている状態を表すものとする。系 1 と系 2 をまとめて一つの系と見なすとき、この合成系の状態は確率の独立性より $c_1 \left|a_1^{(1)}\right\rangle$ と $\left|b^{(2)}\right\rangle$ の状態と、$c_2 \left|a_2^{(1)}\right\rangle$ と $\left|b^{(2)}\right\rangle$ の状態が重ね合わされた状態であって欲しい。すなわち、$(\left|a_1^{(1)}\right\rangle, \left|b^{(2)}\right\rangle)$ と $(\left|a_2^{(1)}\right\rangle, \left|b^{(2)}\right\rangle)$ が確率振幅 c_1, c_2 で実現するような重ね合わせ状態であって欲しいのである。

しかしながら、今導入されている積は単なる直積なので、

$$\begin{aligned}
(\left|\psi^{(1)}\right\rangle, \left|\psi^{(2)}\right\rangle) &= (c_1 \left|a_1^{(1)}\right\rangle + c_2 \left|a_2^{(1)}\right\rangle, \left|b^{(2)}\right\rangle) \\
&\neq c_1(\left|a_1^{(1)}\right\rangle, \left|b^{(2)}\right\rangle) + c_2(\left|a_1^{(1)}\right\rangle, \left|b^{(2)}\right\rangle).
\end{aligned} \tag{1.27}$$

この関係は列ベクトルをある成分についてだけ線形に分解することができないのと同じである。従って、直積を用いては合成系の状態の重ね合わせを自然に表現できないことが分かった。

(1.27) において $\neq$ で結ばれた部分を等号に変えれば、$\mathscr{H}^{(1)}$ における重ね合わせ状態が合成系の重ね合わせ状態として反映される。さらに、

$$(\left|a^{(1)}\right\rangle, d_1 \left|b_1^{(2)}\right\rangle + d_2 \left|b_2^{(2)}\right\rangle) = d_1(\left|a^{(1)}\right\rangle, \left|b_1^{(2)}\right\rangle) + d_2(\left|a^{(1)}\right\rangle, \left|b_2^{(2)}\right\rangle)$$

なる等号を認めると、$\mathscr{H}^{(2)}$ における重ね合わせ状態も合成系の重ね合わせ状態として反映される。*16以上のことから第一引数と第二引数の両方に対して線形性を課すことが、量子力学の合成系を扱う上で都合が良いことが分かる。これを条件は双線形性という。双線形性を満たす直積のことを**テンソル積**と定義し、任意の $\left|\psi^{(1)}\right\rangle \in \mathscr{H}^{(1)}, \left|\psi^{(2)}\right\rangle \in \mathscr{H}^{(2)}$ に対して、そのテンソル積の状態を

$$\left|\psi^{(1)}\right\rangle \otimes \left|\psi^{(2)}\right\rangle \in \mathscr{H}^{(1)} \otimes \mathscr{H}^{(2)}$$

*16 元々等号ではなかったものを等号と見なすという操作には疑問を感じるかもしれないが、数学的には同値関係というものの一種である。

と書くことにする。$\left|\psi^{(1)}\right\rangle \otimes \left|\psi^{(2)}\right\rangle$ の属する空間 $\mathscr{H}^{(1)} \otimes \mathscr{H}^{(2)}$ をテンソル積空間と呼ぶ（定義は後で与える）。また、テンソル積状態の略記を $\left|\psi^{(1)} \otimes \psi^{(2)}\right\rangle \coloneqq \left|\psi^{(1)}\right\rangle \otimes \left|\psi^{(2)}\right\rangle$ と書く。双線形は、

$$\left(c_1 \left|a_1^{(1)}\right\rangle + d_1 \left|b_1^{(2)}\right\rangle\right) \otimes \left(c_2 \left|a_2^{(1)}\right\rangle + d_2 \left|b_2^{(2)}\right\rangle\right) = c_1 d_1 \left|a_1^{(1)} \otimes b_1^{(2)}\right\rangle + c_2 d_2 \left|a_2^{1} \otimes b_2^{(2)}\right\rangle$$

と書ける。

続いて、テンソル積空間に内積を定めることでヒルベルト空間を作る。ここでも確率解釈を持ち込んで内積の形を類推する。独立な状態 $\left|\psi^{(1)}\right\rangle, \left|\psi^{(2)}\right\rangle$ を用意して、独立に状態の観測を行う。$\left|\psi^{(1)}\right\rangle, \left|\psi^{(2)}\right\rangle$ から $\left|a^{(1)}\right\rangle, \left|b^{(2)}\right\rangle$ が見出される確率は、それぞれの空間でボルンの確率解釈を適応すると、それぞれ $\left|\left\langle a^{(1)}\middle|\psi^{(1)}\right\rangle\right|^2, \left|\left\langle b^{(2)}\middle|\psi^{(2)}\right\rangle\right|^2$ である。このとき、系 1 と系 2 をまとめて一つの系と見なした時、$\left|\psi^{(1)} \otimes \psi^{(2)}\right\rangle$ から $\left|a^{(1)} \otimes b^{(2)}\right\rangle$ を見出す確率は、独立事象における確率の積法則より、$\left|\left\langle a^{(1)}\middle|\psi^{(1)}\right\rangle\right|^2 \left|\left\langle b^{(2)}\middle|\psi^{(2)}\right\rangle\right|^2$ でなければばならない。

$$\left|\left\langle a^{(1)}\middle|\psi^{(1)}\right\rangle\right|^2 \left|\left\langle b^{(2)}\middle|\psi^{(2)}\right\rangle\right|^2 = \left|\left\langle a^{(1)}\middle|\psi^{(1)}\right\rangle \left\langle b^{(2)}\middle|\psi^{(2)}\right\rangle\right|^2$$

と変形できるので、$\left|\psi^{(1)} \otimes \psi^{(2)}\right\rangle$ と $\left|a^{(1)} \otimes b^{(2)}\right\rangle$ の内積を、

$$\left\langle a^{(1)} \otimes b^{(2)}\middle|\psi^{(1)} \otimes \psi^{(2)}\right\rangle \coloneqq \left\langle a^{(1)}\middle|\psi^{(1)}\right\rangle \left\langle b^{(2)}\middle|\psi^{(2)}\right\rangle \tag{1.28}$$

と定義すれば、空間 $\mathscr{H}^{(1)} \otimes \mathscr{H}^{(2)}$ においてもボルンの確率解釈が実現することが分かる。従って、テンソル積空間における内積は (1.28) のようになることが期待される。また、$\mathscr{H}^{(1)}, \mathscr{H}^{(2)}$ の正規直交基底をそれぞれ $\left\{\left|a_i^{(1)}\right\rangle\right\}_{i=1}^{d_1}, \left\{\left|b_j^{(2)}\right\rangle\right\}_{j=1}^{d_2}$ としたとき（ただし d_1, d_2 は $\mathscr{H}^{(1)}, \mathscr{H}^{(2)}$ の次元）、その線形結合、

$$|\psi\rangle = \sum_{i}^{d_1} \sum_{j}^{d_2} c_{ij} \left|a_i \otimes b_j\right\rangle \in \mathscr{H}^{(1)} \otimes \mathscr{H}^{(2)}$$

によって、空間 $\mathscr{H}^{(1)} \otimes \mathscr{H}^{(2)}$ の全ての状態が表現されることも期待される。積が双線形性を持つこと・内積が式 (1.28) で書けること・両方の基底の積により空間が生成されること、これらの三条件をもってして合成系の状態を表すヒルベルト空間としたいわけである。そこで関数解析の分野で示された以下の事実を使う。

テンソル積空間

ヒルベルト空間 $\mathscr{H}^{(1)}, \mathscr{H}^{(2)}$ を定義域とした写像

$$\begin{aligned} \phi : \mathscr{H}^{(1)} \times \mathscr{H}^{(2)} &\to L \\ \left|\psi^{(1)}\right\rangle, \left|\xi^{(2)}\right\rangle &\mapsto \left|\phi\left(\psi^{(1)}, \xi^{(2)}\right)\right\rangle \end{aligned}$$

が以下の三条件：

1. ϕ は双線形性写像であり、L はヒルベルト空間である。

2. 任意の $\left|\psi^{(1)}\right\rangle, \left|\xi^{(1)}\right\rangle \in \mathscr{H}^{(1)}, \left|\chi^{(2)}\right\rangle, \left|\eta^{(2)}\right\rangle \in \mathscr{H}^{(2)}$, に対して内積が、

$$\left\langle \phi\left(\psi^{(1)}, \chi^{(2)}\right) \middle| \phi\left(\xi^{(1)}, \eta^{(2)}\right) \right\rangle = \left\langle \psi^{(1)} \middle| \chi^{(2)} \right\rangle \left\langle \xi^{(1)} \middle| \eta^{(2)} \right\rangle$$

で定まり、

3. $\overline{\mathrm{Span}\left\{\phi\left(\mathscr{H}^{(1)} \times \mathscr{H}^{(2)}\right)\right\}} = L$

を満たすとき[*17]、L と ϕ が一意に定まる。
このとき、

$$\mathscr{H}^{(1)} \otimes \mathscr{H}^{(2)} := L$$
$$\left|\psi^{(1)}\right\rangle \otimes \left|\xi^{(2)}\right\rangle := \left|\phi\left(\psi^{(1)}, \xi^{(2)}\right)\right\rangle$$

と書き、それぞれテンソル積空間、テンソル積と呼ぶ。

このことから、ヒルベルト空間を二つ用意すると、そこから定まるテンソル積空間やテンソル積演算はただ一つであることが分かった。二つの空間の基底を適当に選んでテンソル積空間を定義すれば、その空間が一意となる。物理学としては以下の定義で合成系の状態を導入する。

要請：合成系の状態

系 1、系 2 の状態が $\mathscr{H}^{(1)}, \mathscr{H}^{(2)}$ 上の状態ベクトルを用いて表されるとき、合成系 $1+2$ の状態は、次の三条件を満たすような、$\mathscr{H}^{(1)}$ と $\mathscr{H}^{(2)}$ のテンソル積空間で与えられる。

1.
2.
3. $\mathscr{H}^{(1)}, \mathscr{H}^{(2)}$ の正規直交基底をそれぞれ $\left\{\left|a_i^{(1)}\right\rangle\right\}_{i=1}^{d_1}, \left\{\left|b_j^{(2)}\right\rangle\right\}_{j=1}^{d_2}$ とした時、
任意の $|\psi\rangle \in L$ が、

$$|\psi\rangle = \sum_i^{d_1} \sum_j^{d_2} c_{ij} \left|\phi\left(a_i^{(1)}, b_j^{(2)}\right)\right\rangle$$

と表せらる。

[*17] $\mathrm{Span}\{A\}$ とは、A の元の線形結合で書ける元を全て集めた空間。$\overline{B}$ とは集合 B の閉包。

1.8.2 諸概念のテンソル積空間上への拡張

1.9 角運動量

量子力学では軌道角運動量やスピン角運動量といった概念が登場するが、それらの代数的性質には一貫性がある。そこでどんな角運動量にも成り立つ性質をまず示すことにする。古典力学における軌道角運動量は、

$$l_k \coloneqq \epsilon_{ijk} x_i p_j \tag{1.29}$$

で定義されていた。ただし、ϵ_{ijk} は**エディントンのイプシロン**と呼ばれ、

$$\epsilon_{ijk} = \begin{cases} 1 & (ijk) = (123), (231), (312) \\ -1 & (ijk) = (132), (321), (213) \\ 0 & (\text{その他}) \end{cases}$$

を表す。ϵ_{ijk} は、$(ijk) = (123)$ のとき 1 を取り、二つの添え字を入れ替えると符号が反転し、等しい添え字があるときは 0 を取るような記号であるという理解で差し支えない。添え字 (123) を (xyz) と読み替えて議論することがしばしばあることに注意して欲しい。また、式 (1.29) では、同じ添え字をもつ 2 つの量の積について和を取るという略記を用いている。すなわち、$a_i b_i \coloneqq \sum_{i=1}^{3} a_i b_i$ とせよということである。このような記法を**アインシュタインの縮約**という。$\sum$ を省略せずに式 (1.29) を書き直せば、

$$l_k \coloneqq \sum_{i=1}^{3} \sum_{j=1}^{3} \epsilon_{ijk} x_i p_j$$

である。具体的に l_z を計算すると、

$$l_z = x p_y - y p_x$$

となる。さて、x_i, p_j を非可換な演算子 $\hat{x}_i, \hat{p}_j$ に置き換えて新たに軌道角運動量の演算子 $\hat{l}_k$ を、

$$\hat{l}_k \coloneqq \epsilon_{ijk} \hat{x}_i \hat{p}_j$$

と定義する。$\hat{x}_i$と$\hat{p}_j$ はエルミート演算子であるから、$\hat{l}_k$ もエルミート演算子である。$\hat{l}_k, \hat{l}_n$ 同士の交換子を計算してみよう。添え字でない部分に出てくる i は虚数単位であることに注意する。

まずは、

$$
\begin{aligned}
[\hat{x}_l, \hat{l}_k] &= [\hat{x}_l, \epsilon_{ijk}\hat{x}_i\hat{p}_j] \\
&= \epsilon_{ijk}\hat{x}_i[\hat{x}_l, \hat{p}_j] \\
&= \epsilon_{ijk} i\hbar\delta_{lj}\hat{x}_i \\
&= i\hbar\epsilon_{ilk}\hat{x}_i \\
[\hat{p}_m, \hat{l}_k] &= [\hat{p}_m, \epsilon_{ijk}\hat{x}_i\hat{p}_j] \\
&= \epsilon_{ijk}[\hat{p}_m, \hat{x}_i]\,\hat{p}_j \\
&= \epsilon_{ijk}(-i\hbar)\delta_{mi}\hat{p}_j \\
&= -i\hbar\epsilon_{mjk}\hat{p}_j
\end{aligned}
$$

と計算できるので、$\hat{l}_n = \epsilon_{nlm}\hat{x}_l\hat{p}_m$ とおくと、

$$
\begin{aligned}
[\hat{l}_n, \hat{l}_k] &= [\epsilon_{nlm}\hat{x}_l\hat{p}_m, \hat{l}_k] \\
&= \epsilon_{nlm}([\hat{x}_l, \hat{l}_k]\,\hat{p}_m + \hat{x}_l[\hat{p}_m, \hat{l}_k]\,) \\
&= \epsilon_{nlm}(i\hbar\epsilon_{ilk}\hat{x}_i\hat{p}_m - i\hbar\epsilon_{mjk}\hat{x}_l\hat{p}_j) \\
&= i\hbar(\epsilon_{nlm}\epsilon_{ilk}\hat{x}_i\hat{p}_m - \epsilon_{nlm}\epsilon_{jkm}\hat{x}_l\hat{p}_j)
\end{aligned}
$$

ここで公式 $\epsilon_{ijk}\epsilon_{lmk} = \delta_{il}\delta_{jm} - \delta_{im}\delta_{jl}$ を用いて、

$$
\begin{aligned}
&= i\hbar\{(\delta_{ni}\delta_{mk} - \delta_{nk}\delta_{mi})\hat{x}_i\hat{p}_m - (\delta_{nj}\delta_{lk} - \delta_{nk}\delta_{jl})\hat{x}_l\hat{p}_j\} \\
&= i\hbar\{(\hat{x}_n\hat{p}_k - \delta_{nk}\hat{x}_i\hat{p}_i) - (\hat{x}_k\hat{p}_n - \delta_{nk}\hat{x}_j\hat{p}_j)\} \\
&= i\hbar(\hat{x}_n\hat{p}_k - \hat{x}_k\hat{p}_n) \\
&= i\hbar\epsilon_{jnk}\hat{l}_j
\end{aligned}
$$

となる。最後の等式では、軌道角運動量演算子の定義式 $\hat{l}_j = \epsilon_{jnk}\hat{x}_n\hat{p}_k$ を用いて変形したのち、$[\hat{l}_n, \hat{l}_n] = 0, [\hat{l}_k, \hat{l}_n] = -[\hat{l}_n, \hat{l}_k]$ であることを考慮して係数 ϵ_{jnk} を掛けた。

今度は $\hat{l}^2 := \hat{l}_j\hat{l}_j = \hat{l}_x^2 + \hat{l}_y^2 + \hat{l}_z^2$ と定義して、その性質を調べる。$\hat{l}^2$ と $\hat{l}_i$ の交換関係は、

$$
\begin{aligned}
[\hat{l}^2, \hat{l}_i] &= [\hat{l}_j\hat{l}_j, \hat{l}_i] \\
&= \hat{l}_j[\hat{l}_j, \hat{l}_i]\, + [\hat{l}_j, \hat{l}_i]\,\hat{l}_j \\
&= \hat{l}_j i\hbar\epsilon_{kji}\hat{l}_k + i\hbar\epsilon_{kji}\hat{l}_k\hat{l}_j \\
&= \hat{l}_j i\hbar\epsilon_{kji}\hat{l}_k + i\hbar\epsilon_{jki}\hat{l}_j\hat{l}_k \quad (\text{補足説明}^{*18}) \\
&= \hat{l}_j i\hbar\epsilon_{kji}\hat{l}_k - i\hbar\epsilon_{kji}\hat{l}_j\hat{l}_k \\
&= 0
\end{aligned}
$$

である。したがって、$\hat{l}^2$ と $\hat{l}_i$ は可換であり、同時固有ケットが存在することが分かる。

---

*18 この等号では和を取る添え字の交換を行った。$a_{ij}b_{ji} = \sum_{i=1}^{3}\sum_{j=1}^{3} a_{ij}b_{ji}$ の計算を実行すれば、$a_{ij}b_{ji}$ という量が添え字 i, j の取り方に依らないことが確認できる。

軌道角運動量の性質

軌道角運動量演算子 $\hat{l}_i := \epsilon_{ijk}\hat{x}_j\hat{p}_k$ と $\hat{l}^2 := \hat{l}_x^2 + \hat{l}_y^2 + \hat{l}_z^2$ は、

$$[\hat{l}_i, \hat{l}_j] = i\hbar\epsilon_{ijk}\hat{l}_k \tag{1.30}$$

$$[\hat{l}^2, \hat{l}_i] = 0 \tag{1.31}$$

を満たす。

一般化角運動量

軌道角運動量演算子 $\hat{l}_i$ を $\hbar$ で割って無次元化したものを一般化角運動量演算子と呼び記号 $\hat{j}_i$ で書くことにする。すなわち、

$$\hat{j}_i := \frac{\hat{l}_i}{\hbar}$$

$$\hat{j}^2 := \frac{\hat{l}^2}{\hbar^2}$$

とする。$\hat{l}_i$ がエルミート演算子であるので、$\hat{j}_i$ もエルミート演算子である。また、交換子は線形性を満たすので式 (1.30) と式 (1.31) は無次元化されて、

$$[\hat{j}_i, \hat{j}_j] = i\epsilon_{ijk}\hat{l}_k \tag{1.32}$$

$$[\hat{j}^2, \hat{j}_i] = 0 \tag{1.33}$$

と書ける。$\hat{j}_i$ は軌道角運動量や後で議論するスピン角運動量を統合的に取り扱うことができる。$\hat{j}_i$ について導いた関係式は、

$$\hat{l}_i := \hbar\hat{j}_i$$

$$(\hat{s}_i := \hbar\hat{j}_i)$$

などとすることで、軌道角運動量（もしくはスピン角運動量）の関係式に直すことができる。したがって、ここから先の議論は、逆に式 (1.32) を一般化角運動量の定義に採用して、$\hat{j}_i$ とその固有ケットの代数的な関係を導くことに終始する。

一般化角運動量の定義

一般化角運動量演算子 $\hat{j}_x, \hat{j}_y, \hat{j}_z$ を、次の交換関係を満たすものとして定義する。

$$[\hat{j}_i, \hat{j}_j] = i\epsilon_{ijk}\hat{l}_k$$

また $\hat{j}^2$ を、

$$\hat{j}^2 := \hat{j}_x^2 + \hat{j}_y^2 + \hat{j}_z^2$$

で定義する。

式 (1.33) より、$\hat{j}^2$と$\hat{j}_z$ についても同時固有ケットを考えることができるので、それを $|m\rangle$ とおく。$\hat{j}^2$と$\hat{j}_z$ の同時固有ケット $|m\rangle$ について、固有方程式を、

$$\hat{j}_z |m\rangle = m |m\rangle \tag{1.34}$$

とする。この $|m\rangle$ についての性質を探るのが当面の目標である。そのために便利な道具として、**昇降演算子** $\hat{j}_\pm$ を、

$$\hat{j}_\pm \coloneqq \hat{j}_x \pm i\hat{j}_y$$

と定義する。今後ことわりが無いとき $\pm$ や $\mp$ は複号同順を表すものとする。その定義から、

$$\hat{j}_\pm^\dagger = \hat{j}_\mp \tag{1.35}$$

が成り立つ。$\hat{j}_z$や$\hat{j}^2$ との交換関係を調べると、

$$\begin{aligned}
[\hat{j}_z, \hat{j}_\pm] &= [\hat{j}_z, \hat{j}_x] \pm i[\hat{j}_z, \hat{j}_y] \\
&= i\hat{j}_y \pm i(-i\hat{j}_x) \\
&= \pm\hat{j}_x + i\hat{j}_y \\
&= \pm\hat{j}_\pm
\end{aligned} \tag{1.36}$$

$$[\hat{j}^2, \hat{j}_\pm] = [\hat{j}^2, \hat{j}_x \pm i\hat{j}_y] = 0$$

が導かれる。また、$\hat{j}_+\hat{j}_-$と$\hat{j}_-\hat{j}_+$ は $\hat{j}_z$や$\hat{j}^2$ を用いて表すことができて、

$$\begin{aligned}
\hat{j}_+\hat{j}_- &= (\hat{j}_x + i\hat{j}_y)(\hat{j}_x - i\hat{j}_y) \\
&= \hat{j}_x^2 + \hat{j}_y^2 - i[\hat{j}_x, \hat{j}_y] \\
&= \hat{j}_x^2 + \hat{j}_y^2 + \hat{j}_z \\
&= \hat{j}^2 - \hat{j}_z^2 + \hat{j}_z
\end{aligned} \tag{1.37}$$

同様に、

$$\hat{j}_-\hat{j}_+ = \hat{j}^2 - \hat{j}_z^2 - \hat{j}_z \tag{1.38}$$

である。(1.37),(1.38) より、

$$\frac{1}{2}(\hat{j}_+\hat{j}_- + \hat{j}_-\hat{j}_+) = \hat{j}_x^2 + \hat{j}_y^2 \tag{1.39}$$

が成り立つ。

次に、$\hat{j}_\pm |m\rangle$ が $\hat{j}_z$ の固有状態であることを示す。(1.36) より、

$$\begin{aligned}
\hat{j}_z(\hat{j}_\pm |m\rangle) &= ([\hat{j}_z, \hat{j}_\pm] + \hat{j}_\pm\hat{j}_z) |m\rangle \\
&= (\pm\hat{j}_\pm + \hat{j}_\pm\hat{j}_z) |m\rangle \\
&= (m \pm 1)(\hat{j}_\pm |m\rangle)
\end{aligned}$$

したがって、$\hat{j}_\pm |m\rangle$ は $\hat{j}_z$ に対して、固有値 $(m \pm 1)$ を返すような固有ケットであることが分かった。そのため $\hat{j}_z$ の固有ケット $|m \pm 1\rangle$ をある定数 $c_\pm$ 倍して、

$$\hat{j}_\pm |m\rangle = c_\pm |m \pm 1\rangle \tag{1.40}$$

と書ける。これが、$\hat{j}_\pm$ が昇降演算子と呼ばれる理由である。

さて、(1.34) に立ち返ろう。固有値 m に上限と下限が存在することを示す。$|m\rangle$ は $\hat{j}^2$ の固有ケットでもあるので、$\langle m|\hat{j}^2|m\rangle$ は実数である。

$$\langle m|\hat{j}^2|m\rangle = \langle m|\hat{j}_x^2 + \hat{j}_y^2 + \hat{j}_z^2|m\rangle$$

は、(1.34) と期待値の線形性を用いると、

$$\langle m|\hat{j}^2|m\rangle - m^2 = \langle m|\hat{j}_x^2 + \hat{j}_y^2|m\rangle$$

と書ける。(1.39) および内積の公理 (4)(ノルムの非負性) より、

$$\begin{aligned}
\langle m|\hat{j}^2|m\rangle - m^2 &= \frac{1}{2} \langle m|(\hat{j}_+\hat{j}_- + \hat{j}_-\hat{j}_+)|m\rangle \\
&= \left\| \hat{j}_+ |m\rangle \right\|^2 \\
&\geq 0
\end{aligned}$$

が成り立つので、

$$-\sqrt{\langle m|\hat{j}^2|m\rangle} \leq m \leq \sqrt{\langle m|\hat{j}^2|m\rangle}$$

が導かれる。この式は固有値 m が上限と下限を持つことを示している。実際に m がその値を取れるかは不明なので上限・下限という呼び方をしている。

$\hat{j}_z$ と $\hat{j}^2$ には同時固有ケット $|m\rangle$ が存在すると先ほど述べた。このケットについて $\hat{j}_z$ の固有値は m となるが、$\hat{j}^2$ の固有値は何になるだろうか。そこで $\hat{j}_z$ の固有値 m の最大値を j とおく。すると、

$$\hat{j}_z |j\rangle = j |j\rangle$$

が成り立つ。j は固有値 m の最大値であるので、

$$\hat{j}_+ |j\rangle \coloneqq 0$$

と定義する。j より大きい添え字の固有ケットは存在しないので、このように定義するのは理にかなっている。$|j\rangle$ に $\hat{j}^2$ を作用させると、

$$\begin{aligned}
\hat{j}^2 |j\rangle &= (\hat{j}_z^2 + \hat{j}_z + \hat{j}_-\hat{j}_+) |j\rangle \\
&= (\hat{j}_z^2 + \hat{j}_z) |j\rangle \\
&= j(j+1) |j\rangle
\end{aligned}$$

が導かれる。ここまでで分かったことは、$\hat{j}_z$ と $\hat{j}^2$ の同時固有ケット $|j\rangle$(ただし j は m の最大値) についての固有方程式だけである。一般に $|m\rangle$ についての固有方程式を得るためには、固有値 m の固有ケット $|m\rangle$ を $|j\rangle$ と昇降演算子を用いて、

$$|m\rangle = C(\hat{j}_-)^{j-m} |j\rangle \tag{1.41}$$

と表せばよい。ただし C は定数である。式 (1.41) に対して $\hat{j}^2$ を作用させる。$\hat{j}^2$ と $\hat{j}_-$ は可換なので、

$$\begin{aligned}
\hat{j}^2 |m\rangle &= C\hat{j}^2(\hat{j}_-)^{j-m} |j\rangle \\
&= C(\hat{j}_-)^{j-m}\hat{j}^2 |j\rangle \\
&= j(j+1)C(\hat{j}_-)^{j-m} |j\rangle \\
&= j(j+1) |m\rangle
\end{aligned}$$

となり、一般に $|m\rangle$ についての $\hat{j}^2$ の固有値が $j(j+1)$ であることが示された。

また、m の最小値を μ とおくと、

$$\begin{aligned}
\hat{j}_z |\mu\rangle &= \mu |\mu\rangle \\
\hat{j}_- |\mu\rangle &\coloneqq 0
\end{aligned}$$

が成り立つ。したがって $\langle\mu| \hat{j}_+\hat{j}_- |\mu\rangle = 0$ が得られるので、これを式 (1.37) を用いて変形すると、

$$\begin{aligned}
&\langle\mu| (\hat{j}^2 - \hat{j}_z^2 + \hat{j}_z) |\mu\rangle = 0 \\
\therefore\quad & j(j+1) - \mu^2 + \mu = 0 \\
\therefore\quad & \mu = \frac{1 \pm \sqrt{1+4j(j+1)}}{2} \\
\therefore\quad & \mu = \frac{1 \pm (2j+1)}{2}
\end{aligned}$$

を得る。最後の等式において $+$ を採用してしまうと、$\mu = j+1$ となり最大値を超えてしまうので矛盾。よって $-$ の方を採用すると、

$$\mu = -j$$

が導き出せる。したがって m の最大値と最小値がそれぞれ j と $-j$ になることが分かった。$|m\rangle$ は $\hat{j}^2$ の固有ケットでもあり、その固有値は $j(j+1)$ であるため、これからは $\hat{j}^2$ と $\hat{j}_z$ の同時固有ケットを $|j,m\rangle$ と書くことにする。

一般化角運動量

$\hat{j}^2$ と $\hat{j}_z$ の同時固有ケットを $|j,m\rangle$ と書くと、

$$\begin{aligned}
\hat{j}^2 |j,m\rangle &= j(j+1) |j,m\rangle \\
\hat{j}_z |j,m\rangle &= m |j,m\rangle
\end{aligned} \tag{1.42}$$

を満たす。ただし $-j \le m \le j$ であり、$|j,m\rangle$ は $(2j+1)$ 重に縮退している。

さて、式 (1.42) における j は整数か半整数[*19]となることを示す。式 (1.40) により、m の変化は昇降演算子によって離散的に起こることが分かる。したがって、$|j,-j\rangle$ に対してある自然数 n 回 $\hat{j}_+$ を作用させれば $|j,j\rangle$ に移行できると仮定すると、

$$|j,j\rangle \propto (\hat{j}_+)^n |j,-j\rangle \propto |j,-j+n\rangle$$

したがって、$j=-j+n$ が導かれて、$j=n/2$ を得る。

最後に昇降演算子を $|j,m\rangle$ に掛けた時の係数を決定する。(1.40) をもう一度書き直すと、

$$\hat{j}_\pm |j,m\rangle = c_\pm |j,m\pm 1\rangle$$

である。式 (1.35) より、

$$\langle j,m| \hat{j}_-\hat{j}_+ |j,m\rangle = |c_+|^2$$
$$\langle j,m| \hat{j}_+\hat{j}_- |j,m\rangle = |c_-|^2$$

が成り立つ。式 (1.37)、(1.38) より、

$$\langle j,m| (\hat{j}^2 - \hat{j}_z^2 - \hat{j}_z) |j,m\rangle = |c_+|^2$$
$$\langle j,m| (\hat{j}^2 - \hat{j}_z^2 + \hat{j}_z) |j,m\rangle = |c_-|^2$$

と変形できるので、結局

$$c_\pm = \sqrt{(j\mp m)(j\pm m+1)}$$

を複号同順で得る。$c_\pm$ は複素数に取れるのだが、位相因子は 0 とする習わしである。以上をまとめると、

昇降演算子の定義と性質

昇降演算子 $\hat{j}_\pm$ の定義は

$$\hat{j}_\pm \coloneqq \hat{j}_x \pm i\hat{j}_y$$

で与えられ、

$$\hat{j}_\pm |j,m\rangle = \sqrt{(j\mp m)(j\pm m+1)}\, |j,m\rangle$$

が成り立つ。

[*19] 量子力学では、奇数の整数を 2 で割った数のことを半整数と呼ぶ。

1.10 スピン

1.11 角運動量の合成 ★

第 2 章

量子力学と対称性

第 3 章

量子多体系の基礎

第 4 章

量子多体系と幾何学