

# 量子力学的なにか

2025 年 4 月 10 日



PDF ファイルと  $\text{\LaTeX}$  ソースは, <https://github.com/scasc1939/nusotsu> で配布しています.



This work is licensed under CC BY-SA 4.0.

<https://creativecommons.org/licenses/by-sa/4.0/>

# 目次

<b>§1</b>	<b>イントロダクション</b>	<b>3</b>
<b>§2</b>	<b>ヒルベルト空間の定義</b>	<b>5</b>
2.1	ベクトル空間	5
2.1.1	ユークリッド空間の比喻	5
2.1.2	ベクトル空間の定義	7
2.1.3	ベクトルの線形結合・一次独立	8
2.1.4	ベクトル空間の基底と次元	9
2.1.5	ベクトルの基底による分解	11
2.1.6	基底の存在定理	12
2.2	内積空間	13
2.2.1	ユークリッド空間の幾何学	13
2.2.2	内積の定義	15
2.2.3	ノルム	16
2.2.4	正規直交基底	17
2.3	空間の完備性	19
2.3.1	ベクトルの列の収束	19
2.3.2	コーシー列	19
2.3.3	完備な内積空間	21
2.4	ヒルベルト空間	22
<b>§3</b>	<b>線形代数の力</b>	<b>23</b>
3.1	線形写像	23
3.1.1	そもそも写像とは	23
3.1.2	線形写像の定義	23
3.1.3	内積空間の線形写像	24
3.2	ベクトル空間の同型	25
3.2.1	同型写像	25
3.2.2	有限次元内積空間の同型	26

3.3	表現行列	27
<b>§4</b>	<b>量子力学への準備</b>	<b>28</b>
4.1	ブラ・ケット記法	28
4.2	ユニタリ行列とエルミート行列	30
4.2.1	エルミート行列	30
4.2.2	ユニタリ行列	32
4.3	射影演算子	33
4.3.1	正規直交系の完全性	33
4.3.2	射影演算子の定義	33
4.3.3	スペクトル分解	34
<b>§5</b>	<b>量子力学の公理</b>	<b>37</b>
5.1	純粋状態の量子力学	37
5.1.1	量子力学的状態	37
5.1.2	物理量の観測	37
5.1.3	基底測定	38
5.1.4	状態の時間発展	38
5.1.5	波束の収縮	39
5.2	テンソル積	40
5.2.1	2粒子系のシュレーディンガー方程式	40
5.2.2	テンソル積の定義	41
5.2.3	テンソル積の空間	42
<b>§6</b>	<b>エンタングルメントの不思議</b>	<b>44</b>
6.1	スピン 1/2 をもつ粒子の量子力学	44
6.2	量子エンタングルメント	45
6.2.1	セパラブル状態とエンタングル状態	45
6.2.2	エンタングル状態の性質	46
6.3	量子テレポーテーション	48

# §1 イントロダクション

---

17 世紀から 18 世紀にかけての物理学者、ニュートンが大成した古典力学（ニュートン力学）によって、物体の運動は完全に記述できるようになった。この世界は原子という物体によって構成されているのだから<sup>1)</sup>、現時点での宇宙の全原子の座標と運動量（および相互作用）を完全に決定できる存在、いわゆる**ラプラスの悪魔**は、この世界の過去も未来もすべて知ることができる。のちに形成された解析力学のことばを使えば、各原子のハミルトニアンと初期状態が、その原子の時間発展を決定するといえる。

もちろん実際には、宇宙の全原子はおろか、小さな箱に閉じ込められた気体を構成する全原子の座標と運動量を特定することすら、人間には不可能である。このような多数——おおよそ  $10^{23}$  個のオーダー——の原子がつくる**多体系**は、各粒子を支配しているはずのニュートン力学からは想像もつかないようなふるまいを示す。ニュートン方程式は可逆であるにもかかわらず、多体系は本質的に不可逆的である。実際、熱湯と水を混ぜればぬるま湯になるが、逆にぬるま湯が熱湯と水に分離されるところを見た人はいないだろう。このような「**マクロな世界**」を扱うのが**統計力学**である。ニュートン力学には存在しない「温度」や「エントロピー」といった概念が、統計力学において定義されることは、よく知られている。

マクロな理論である統計力学の形成から少し遅れた 20 世紀初頭、**ミクロな世界**の理論である**量子力学**が形成された。量子力学によればエネルギーは離散的な値しかとることができないし、物理量は確率的にしか予言できず、さらには状態を重ね合わせることができる。また、そこで扱われる量子力学的粒子も、古典粒子に存在しない「スピン」や「位相」といった値を持つ。このような点で、量子力学は古典力学と根本的に異なる理論体系である。しかしながら、面白いことに、視野を広げる（ミクロな世界から遠ざかる）ことで、量子力学は古典力学に漸近するのである。水素原子のスペクトル問題は、量子力学によって見事に解き明かされた。

1905 年にはアインシュタインが特殊相対論を提唱し、絶対時間の存在を暗黙裡に仮定していたニュートン力学はここに崩壊した。量子力学を相対論的に書き直す試みがなされるまで、それほど時間はかからなかった。1928 年、ディラックは、量子力学に相対論的效果を導入したディラック方程式を提唱した。この方程式からは、すべての粒子に対して、質量が同じで、電荷の符号が逆である粒子（**反粒子**）が存在することが示唆される。反粒

---

1) 実は、原子の存在が証明されたのは 1905 年。アインシュタインによるブラウン運動の解明による。

子が実在することは、1932 年のアンダーソンによる陽電子の発見によって裏付けられた。

量子力学を使って統計力学を捉えなおすこともなされた。すなわち、多体系を構成する粒子が量子力学的であるとするのである。一切の相互作用なくしておこる相転移、ボース・アインシュタイン凝縮はまさに量子統計力学の醍醐味である。

1911 年、カメルリング・オネス<sup>2)</sup>は極低温に冷やした水銀の電気抵抗がゼロになることを発見した。のちに超伝導と呼ばれるこの現象の理論的解明は、1957 年にバーディーン、クーパー、シュリーファーによってなされた。3 人の頭文字をとって BCS 理論と呼ばれるこの理論は、量子力学を多体系に適用したものである。

このように、量子力学を応用することによって多くの新奇的な物理現象が明らかになったわけであるが、しかしその中で量子力学の数学的位置づけは等閑視されてきた。これを読んでいる人でヒルベルト空間を知らない人はいないだろうが、ではヒルベルト空間の定義を述べよ、といわれると動揺する人が多いのではないだろうか。むしろ基礎から量子力学を理解するよりも、実際に量子力学を使って物理現象を理解することが重要であるという考え方も大いにあり得よう。量子力学の厳密な数学的定式化はフォン・ノイマン（1932 年）によってなされた。

---

2) Kamerlingh Onnes のカタカナ表記は、状態密度  $D \cdot N$  問題、ボーズ・ボース問題、Liouville の読み方問題と並ぶ統計力学の難問である。

## §2 ヒルベルト空間の定義

標準的な量子力学の教科書では、波動関数の一般化としてブラ・ケットを導入することが多いだろう。それによれば、ケットは“縦ベクトル”，ブラは“横ベクトル”であり，この2つの間で“内積”を計算することができるとされる。このケットがなすベクトル空間こそがヒルベルト空間だという。つまり，量子系の状態は，ヒルベルト空間の元<sup>げん</sup>，すなわち縦ベクトルとして表されるのである。

しかしながら，「量子系の状態がヒルベルト空間をなし」「ヒルベルト空間の元が量子系の状態を表す」というのでは論理が堂々巡りしている。そもそもなぜ，波動関数を縦ベクトルに例えることができるのだろうか。結局ヒルベルト空間とは何なのか。

実はその答えは簡単で，ヒルベルト空間とは「完備な内積空間」のことである。この章では，この定義を理解するために必要な諸概念を定義し，ヒルベルト空間とは何であるかを理解することを目標にする。

### 2.1 ベクトル空間

量子力学を学ぶ上では線形代数の知識が必須である，というのはよく言われることであるが，この言説は若干ミスリーディングである。というのも，量子力学で本当に必要となるのは抽象的な線形代数であり，多くの大学で初年次に学ぶであろう行列の代数では不十分だからである。この節では，抽象的な線形代数の第一歩としてベクトル空間の定義を述べる。

#### 2.1.1 ユークリッド空間の比喻

ベクトル空間の定義を述べる前に，その典型例として，ユークリッド空間 (Euclidean space) について考えてみよう。ある自然数  $N (\geq 1)$  に対し，集合  $\mathbb{C}^N$  を

$$\mathbb{C}^N := \left\{ \mathbf{x} = \begin{pmatrix} x_1 \\ \vdots \\ x_N \end{pmatrix} \mid x_1, \dots, x_N \text{ は複素数} \right\}$$

で定める。 $\mathbb{C}^N$  の元  $\mathbf{x}$  は縦ベクトルあるいは列ベクトル (column vector) とよばれる。数字を縦に並べたものが列 (column), 横に並べたものが行 (row) である<sup>3)</sup>が、ここではわかりやすく縦ベクトルと呼ぶことにする。この縦ベクトルに対して、和  $+$  とスカラー倍  $\star$  と呼ばれる演算が、

$$\mathbf{x} + \mathbf{y} := \begin{pmatrix} x_1 + y_1 \\ \vdots \\ x_N + y_N \end{pmatrix}, \quad c \star \mathbf{x} := \begin{pmatrix} cx_1 \\ \vdots \\ cx_N \end{pmatrix}$$

と定義できる。これを使って、ベクトルの性質を調べよう。まず和  $+$  について、

(1) 任意の縦ベクトル  $\mathbf{x}, \mathbf{y}, \mathbf{z}$  に対し、 $(\mathbf{x} + \mathbf{y}) + \mathbf{z} = \mathbf{x} + (\mathbf{y} + \mathbf{z})$

(2) 任意の縦ベクトル  $\mathbf{x}, \mathbf{y}$  に対し、 $\mathbf{x} + \mathbf{y} = \mathbf{y} + \mathbf{x}$

が成り立つことはすぐにわかる。また、零ベクトル (zero vector) を

$$\mathbf{0} := \begin{pmatrix} 0 \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix}$$

で定めれば、

(3) 任意の縦ベクトル  $\mathbf{x}$  に対し、 $\mathbf{x} + \mathbf{0} = \mathbf{0} + \mathbf{x} = \mathbf{x}$

が成り立つ。さらに、縦ベクトル  $\mathbf{x} = {}^t(x_1 \ \cdots \ x_N)$  に対し、 $\mathbf{y}$  を

$$\mathbf{y} := -\mathbf{x} = \begin{pmatrix} -x_1 \\ \vdots \\ -x_N \end{pmatrix}$$

とすれば、

(4) 任意の縦ベクトル  $\mathbf{x}$  に対し、ある縦ベクトル  $\mathbf{y}$  が存在して、 $\mathbf{x} + \mathbf{y} = \mathbf{0}$

となることがわかる。

スカラー倍  $\star$  については

(5) 任意の縦ベクトル  $\mathbf{x}$  と任意の複素数  $a, b$  に対し、 $(a + b) \star \mathbf{x} = (a \star \mathbf{x}) + (b \star \mathbf{x})$

(6) 任意の縦ベクトル  $\mathbf{x}, \mathbf{y}$  と任意の複素数  $a$  に対し、 $a \star (\mathbf{x} + \mathbf{y}) = (a \star \mathbf{x}) + (a \star \mathbf{y})$

(7) 任意の縦ベクトル  $\mathbf{x}$  と任意の複素数  $a, b$  に対し、 $(ab) \star \mathbf{x} = a \star (b \star \mathbf{x})$

(8) 複素数 1 について、任意の縦ベクトル  $\mathbf{x}$  に対し、 $1 \star \mathbf{x} = \mathbf{x}$

が成り立つことも明らかだろう。

以上で和とスカラー倍の満たすべき性質を調べ終わったが、後の議論のため、和とスカラー倍そのものについても考えておこう。

---

3) 台湾では column を「行」、row を「列」というらしい。

和とは、2つのベクトル  $\mathbf{x}, \mathbf{y}$  を使って新たなベクトル  $\mathbf{x} + \mathbf{y}$  をつくる操作のことをいう。また、ベクトルのスカラー倍とは、複素数  $c$  とベクトル  $\mathbf{x}$  から新しいベクトル  $c \star \mathbf{x}$  を作る操作のことである。数学的には、 $+$  は  $\mathbb{C}^N \times \mathbb{C}^N$  から  $\mathbb{C}^N$  への写像、 $\star$  は  $\mathbb{C} \times \mathbb{C}^N$  から  $\mathbb{C}^N$  への写像であるといえる。

## 2.1.2 ベクトル空間の定義

抽象的なベクトル空間の定義は、2.1.1 節で調べた性質を抽象することで与えられる。

$\mathbb{C}$  を複素数全体の集合とする。集合  $V$  があって、 $V$  の元<sup>げん</sup>に対して和  $+: V \times V \rightarrow V$ 、スカラー倍  $\star: \mathbb{C} \times V \rightarrow V$  が定義されているとする。 $V$  の元を  $\psi, \xi, \eta$ 、複素数  $a, b$  としたとき、以下の8条件

- (1) 和は結合的である——すなわち、任意の  $\psi, \xi, \eta \in V$  に対し、 $(\psi + \xi) + \eta = \psi + (\xi + \eta)$ 。
- (2) 和は交換する——すなわち、任意の  $\psi, \xi, \eta \in V$  に対し、 $\psi + \xi = \xi + \psi$ 。
- (3) 和に対する零元の存在——すなわち、ある  $\mathbf{0} \in V$  が存在して、任意の  $\psi \in V$  に対し、 $\psi + \mathbf{0} = \psi$ 。
- (4) 和に対する逆元の存在——すなわち、任意の  $\psi \in V$  に対し、ある  $\xi \in V$  が存在して、 $\psi + \xi = \mathbf{0}$ 。
- (5) スカラー倍は複素数の和に対して分配的である——すなわち、任意の  $\psi \in V$  と任意の複素数  $a, b$  に対し、 $(a + b) \star \psi = (a \star \psi) + (b \star \psi)$ 。
- (6) スカラー倍は  $V$  上の和に対して分配的である——すなわち、任意の  $\psi, \xi \in V$  と任意の複素数  $a$  に対し、 $a \star (\psi + \xi) = (a \star \psi) + (a \star \xi)$ 。
- (7) 複素数の積とスカラー倍の結合——すなわち、任意の  $\psi \in V$  と任意の複素数  $a, b$  に対し、 $(ab) \star \psi = a \star (b \star \psi)$ 。
- (8) 1 はスカラー倍の単位元——すなわち、複素数 1 について、任意の  $\psi \in V$  に対し、 $1 \star \psi = \psi$ 。

を満たすのならば<sup>4)</sup>、 $V$  をベクトル空間 (vector space) と呼び、 $V$  の元（上で挙げた  $\psi, \xi, \eta, \dots$ ）をベクトルという。

ここに挙げた8条件を、ベクトル空間論を扱うための出発点とする。ベクトル空間の定義は一見すると非常に分かりにくい。このように、定義だけを先に与える「<sup>あまくだ</sup>天下り的」な方法は、物理学の世界ではあまり好まれない傾向にある。しかし、一見何の意味もなさそ

4) ここで、上の条件に出てくる「任意の—」と「ある—」の順序は重要である。(3) では  $\mathbf{0}$  はただひとつであり、その  $\mathbf{0}$  について  $\psi + \mathbf{0} = \psi$  が満たされ、さらに  $\xi + \mathbf{0} = \xi$  が成り立たねばならない。その一方で、(4) における  $\xi$  は、 $\psi$  のとりかたによって変わりうる。あるベクトル  $\psi$  に対して  $\psi + \xi = \mathbf{0}$  が満たされても、別のベクトル  $\eta$  に対して  $\eta + \xi = \mathbf{0}$  が成り立つとは限らない。



うな定義であっても、その根底には典型例（この場合であればユークリッド空間）が存在する。また、先に定義を与えることで、物理学でしばしば行われる大胆な（悪く言えば恣意的な）仮定をなくし、自然な議論を行うことができるという利点もある。

### 2.1.3 ベクトルの線形結合・一次独立

**線形結合**  $\mathbf{u}_1, \mathbf{u}_2, \dots, \mathbf{u}_n$  をベクトル空間  $V$  のベクトルとする。  $V$  上の和  $+$  とスカラー倍  $\star$  を繰り返し使うことで、

$$\mathbf{v} := (c_1 \star \mathbf{u}_1) + (c_2 \star \mathbf{u}_2) + \cdots + (c_n \star \mathbf{u}_n) \quad (2.1')$$

は  $V$  のベクトルであるといえる。式 (2.1) のことを、ベクトル  $\mathbf{u}_1, \mathbf{u}_2, \dots, \mathbf{u}_n$  の**線形結合** (linear combination) という。

線形結合とはある意味ベクトルの本質であり、ベクトル空間論における多くの概念が線形結合を用いて定義される。そのような線形結合を常に式 (2.1') のように書いていると煩雑極まりないので、通常は

$$\mathbf{v} := c_1 \mathbf{u}_1 + c_2 \mathbf{u}_2 + \cdots + c_n \mathbf{u}_n \quad (2.1)$$

と記す。つまり、スカラー倍の記号  $\star$  を省略し、ベクトルの和  $+$  は通常の和と同じ記号  $+$  で表すのである。

これと同様に、無限個<sup>5)</sup>のベクトルの線形結合を考えることもできるが、このときは少し制限が必要である。ベクトル空間  $V$  のベクトル  $\mathbf{u}_1, \mathbf{u}_2, \dots$  に対して、

$$\mathbf{v} := \sum_{i=1}^{\infty} c_i \mathbf{u}_i, \quad (c_1, c_2, \dots \text{ は有限個を除きゼロである複素数}) \quad (2.2)$$

で定義される  $V$  のベクトル  $\mathbf{v}$  を、 $\mathbf{u}_1, \mathbf{u}_2, \dots$  の**線形結合**という。ただし、無限個の複素数  $c_1, c_2, \dots$  が有限個を除きゼロである、つまり式 (2.2) が実は

$$\mathbf{v} = c_{i_1} \mathbf{u}_{i_1} + \cdots + c_{i_n} \mathbf{u}_{i_n}$$

という有限の和であるという条件は、 $\mathbf{v} \in V$  であることを担保するために必要である。ここではベクトルの代わりに関数を使って説明しよう。関数  $1, x, x^2, \dots, x^n, \dots$  はすべて多項式関数であり、当然これらの線形結合はまた多項式となるはずである。しかし、“無限個の線形結合”

$$1 + x + \frac{1}{2!}x^2 + \cdots + \frac{1}{n!}x^n + \cdots = e^x \quad (2.3)$$

はもはや多項式関数でない。

---

5) ここでは可算無限の場合のみを考えるが、非可算無限個のベクトルの線形結合もまったく同様に定義できる。

集合  $X$  の元に対してある演算を行った結果が必ず  $X$  の元になるとき、 $X$  はその演算に関して**閉じている**という。例えば自然数  $\mathbb{N} = \{1, 2, 3, \dots\}$  は、加法  $+$  と乗法  $\times$  に関して閉じているが、減法  $-$  と除法  $\div$  に関しては閉じていない（たとえば  $2 - 3 = -1$  であるし、 $3 \div 2 = 0.5$  である）。ベクトル空間の場合、定義より、線形結合に関して閉じていなければならない。しかし、“無限個の線形結合” に関しては必ずしも閉じているとは限らないのである。

**一次独立** ベクトル空間  $V$  のベクトル  $\mathbf{u}_1, \dots, \mathbf{u}_n$  が、ある複素数  $c_1, \dots, c_n$  に対して

$$\mathbf{0} = c_1 \mathbf{u}_1 + \dots + c_n \mathbf{u}_n \quad (2.4)$$

を満たしているとする。もし  $c_1 = \dots = c_n = 0$  ならば、式 (2.4) は当然成り立つ<sup>6)</sup>。逆に、式 (2.4) が成り立っているなら  $c_1 = \dots = c_n = 0$  であるといえるとき、 $\mathbf{u}_1, \dots, \mathbf{u}_n$  は**一次独立** (linearly independent) であるという。一次独立でなければ、**一次従属** (linearly dependent) であるという。

$\mathbf{u}_1, \dots, \mathbf{u}_n$  が一次独立であるとは、これらからどの  $\mathbf{u}_i$  をとっても、 $\mathbf{u}_i$  は残り  $n - 1$  個のベクトルの線形結合で書けないということである。

$V$  の無限個のベクトル  $\mathbf{u}_1, \mathbf{u}_2, \dots$  に対しても、それらが一次独立であるか、一次従属であるかを定義することもできる。すなわち、有限個を除きゼロである複素数  $c_1, c_2, \dots$  に対して

$$\mathbf{0} = \sum_{i=1}^{\infty} c_i \mathbf{u}_i \quad (2.4')$$

が成り立っているならば  $c_1 = c_2 = \dots = 0$  であるとき、 $\mathbf{u}_1, \mathbf{u}_2, \dots$  は一次独立であるという。そうでなければ一次従属である。

**ベクトル空間の生成** ベクトル空間  $V$  のベクトル  $\mathbf{u}_1, \mathbf{u}_2, \dots$  (有限個でも無限個でもよい) の線形結合の全体

$$W := \left\{ \sum_{i=1}^{\infty} c_i \mathbf{u}_i \mid c_1, c_2, \dots \text{ は有限個を除きゼロである複素数} \right\}$$

はベクトル空間の公理 (2.1.2 節) を満たす。このことを、 $\mathbf{u}_1, \mathbf{u}_2, \dots$  がベクトル空間  $W$  を**生成する** (generate), あるいは**張る** (span) という。

## 2.1.4 ベクトル空間の基底と次元

あるベクトル空間  $V$  を指定するのに、 $V$  に属するベクトルをすべて挙げる必要はなく、一部だけ挙げれば十分である。 $V$  の残りのベクトルは、それらの線形結合として書ける。

6)  $V$  の任意のベクトル  $\mathbf{u}$  に対し、 $0\mathbf{u} = \mathbf{0}$  であるからである。

特定のベクトル空間を構成するのに必要最小限の材料のことを**基底**という。ベクトル空間を扱ううえでは、扱う問題に適した基底をとることが重要である。

**基底** 考えるベクトル空間を  $V$  とする。  $V$  のベクトル  $\mathbf{u}_1, \dots, \mathbf{u}_n$  が以下の 2 条件

- (1)  $\mathbf{u}_1, \dots, \mathbf{u}_n$  は一次独立である。
- (2)  $\mathbf{u}_1, \dots, \mathbf{u}_n$  は  $V$  を生成する。

をいずれも満たすとき、  $\mathbf{u}_1, \dots, \mathbf{u}_n$  は  $V$  の**基底** (basis) であるという。

**次元** ベクトル空間が与えられても、その基底の取り方には任意性がある。たとえば?? と式 (2.5c) は、ともにユークリッド空間  $\mathbb{C}^N$  の基底をなす。しかし、基底を構成するベクトルの数は、どのような基底をとっても常に一定である。実際、??、式 (2.5c) は、ともに  $N$  個のベクトルからなる。これを証明しよう。

あるベクトル空間  $V$  に対して、基底  $(\mathbf{u}_i) := \mathbf{u}_1, \dots, \mathbf{u}_M$  と、基底  $(\mathbf{u}'_j) := \mathbf{u}'_1, \dots, \mathbf{u}'_N$  がとれたとする。まず  $(\mathbf{u}_i)$  は  $V$  の基底であるから、任意の  $\mathbf{u}'_j$  は  $(\mathbf{u}_i)$  の線形結合で書ける：

$$\mathbf{u}'_j = \sum_{i=1}^M c_{ij} \mathbf{u}_i \quad (1 \leq j \leq N)$$

ここでもし  $M < N$  なら、  $(\mathbf{u}'_j)$  は一次従属になる。なぜなら、複素数  $a_1, \dots, a_N$  を用いた  $(\mathbf{u}'_j)$  の一次関係 (式 (2.4) の形のもの) は

$$\begin{aligned} \mathbf{0} &= \sum_{j=1}^N a_j \mathbf{u}'_j = \sum_{i=1}^M \sum_{j=1}^N a_j c_{ij} \mathbf{u}_i \\ &= \begin{pmatrix} \mathbf{u}_1 & \cdots & \mathbf{u}_M \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_{11} & \cdots & c_{1N} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ c_{M1} & \cdots & c_{MN} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_1 \\ \vdots \\ a_N \end{pmatrix} \end{aligned}$$

と書けるが、行列の方程式

$$\begin{pmatrix} c_{11} & \cdots & c_{1N} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ c_{M1} & \cdots & c_{MN} \end{pmatrix} \mathbf{a} = \mathbf{0}$$

は  $M < N$  (行数 < 列数) のとき必ず非自明な解  $\mathbf{a} \neq \mathbf{0}$  を持つからである。仮定より  $(\mathbf{u}'_j)$  は一次独立であるから、  $M \geq N$  である。同様の議論は  $(\mathbf{u}_i)$  と  $(\mathbf{u}'_j)$  を入れ替えても成立するので、  $N \geq M$  である。よって  $M = N$  であるといえる。

ベクトル空間  $V$  について、その基底を構成するベクトルの数を、  $V$  の**次元** (dimension) という。たとえば??よりユークリッド空間  $\mathbb{C}^N$  の次元は  $N$  である。このような基底を構成するベクトルが有限個である空間は**有限次元**であるという。そうでない空間は**無限次元**と呼ばれる。

**3.2 節**で議論するとおり、有限次元のベクトル空間は実質的には  $\mathbb{C}^N$  と同じものであり、

そこでの議論は行列と数ベクトルを用いた議論に置き換えることができる．一方で無限次元のベクトル空間では，行列を使った線形代数の議論は破綻する．このような無限次元の線形代数を議論するのが関数解析学とよばれる分野であるが，これを学ぶには多くの前提知識が必要である．量子力学の難しさには物理的な面と技術的な面とがあるが，そのうちの後者にあたるのが，無限次元の議論である．

なお，古典的な状態（座標や運動量など）の張る空間は無限次元であるが，純粋な量子力学的状態（スピンなど）では有限次元になる．そこで，本稿では考える系をスピン系に限ることで，無限次元の空間における面倒な問題を避け，単純な行列計算を用いた議論を行うことにする．

**$\mathbb{C}^2$  の基底** ユークリッド空間  $\mathbb{C}^2$  の基底について考えてみよう． $V$  の基底は，例えば

$$\mathbf{e}_1 := {}^t(1 \ 0), \quad \mathbf{e}_2 := {}^t(0 \ 1) \quad (2.5a)$$

が考えられる．これは  $\mathbb{C}^2$  の唯一の基底ではなく，たとえば

$$\mathbf{e}'_1 = {}^t\left(\frac{1}{\sqrt{2}} \ \frac{1}{\sqrt{2}}\right), \quad \mathbf{e}'_2 = {}^t\left(\frac{1}{\sqrt{2}} \ -\frac{1}{\sqrt{2}}\right). \quad (2.5b)$$

$$\mathbf{e}_1 = {}^t(1 \ 0), \quad \mathbf{e}_2 = {}^t(1 \ 1). \quad (2.5c)$$

はいずれも  $\mathbb{C}^2$  の基底である．

### 2.1.5 ベクトルの基底による分解

$V$  を有限次元のベクトル空間とし，その基底として  $\mathbf{u}_1, \dots, \mathbf{u}_N$  をとる．基底は  $V$  を生成するので， $V$  の任意のベクトル  $\mathbf{v}$  は，複素数の組  $c_1, \dots, c_N$  を用いて

$$\mathbf{v} = c_1 \mathbf{u}_1 + \dots + c_N \mathbf{u}_N$$

とかける．このとき，基底  $\mathbf{u}_1, \dots, \mathbf{u}_N$  に対して，係数  $c_1, \dots, c_N$  は一意に決まる．それを確かめるために， $\mathbf{v}$  が

$$\mathbf{v} = c_1 \mathbf{u}_1 + \dots + c_N \mathbf{u}_N = c'_1 \mathbf{u}_1 + \dots + c'_N \mathbf{u}_N$$

と2とおりに分解できたとしよう．このとき，ふたつめの等号およびベクトル空間の公理 (5) より

$$\mathbf{0} = (c_1 - c'_1) \mathbf{u}_1 + \dots + (c_N - c'_N) \mathbf{u}_N$$

が成立する．ここで基底は一次独立（式 (2.4) を参照）であるので， $c_1 - c'_1 = \dots = c_N - c'_N$  が従う．よって  $c_1 = c'_1, \dots, c_N = c'_N$  であるから，結局  $c_1, \dots, c_N$  は1とおりに定まる．

無限次元空間のベクトルに対しても，やはり基底を固定した時の展開係数は一意に定まる．これを証明するのは難しくないが，技術的に面倒であるのでここでは省略する．な

お、無限次元の量子力学でベクトルを展開するときには、ふつうは基底ではなく**完全正規直交系**を用いる。完全正規直交系とよく似た概念に、[2.2.4 節](#)で取り上げる**正規直交基底**があるが、前者は式 (2.1) での無限和を容認し、後者は容認しない点で違いがある。

### 2.1.6 基底の存在定理

さて、ここまでベクトル空間の基底について見てきたわけであるが、注意深い読者は、今までの議論はすべてベクトル空間が基底をもつことを前提にしており、基底が本当に存在するかどうかは（いくつかの具体例を除き）まったく示していない。

ベクトル空間  $V$  について、 $V$  から一次独立である  $N$  個のベクトルをとることができ、かつ  $N+1$  個のベクトルは必ず一次従属となるような自然数  $N$  が存在するとき、 $V$  は**有限次元**であるといい、このときの  $N$  を  $V$  の**次元**という。この条件を満たす  $N$  が存在しないとき、 $V$  は**無限次元**であるという。

次元  $N$  は、「 $V$  のベクトルの組が一次独立となる最大の数」であるといえる。

**基底の延長定理**  $V$  を  $N$  次元ベクトル空間とし、 $\mathbf{u}_1, \dots, \mathbf{u}_n$  ( $n \leq N$ ) を  $V$  の一次独立なベクトルの組とする。  $V$  の次元が  $N$  であるという仮定から、

- (1)  $\mathbf{u}_1, \dots, \mathbf{u}_n$  の線形結合で書けない  $V$  のベクトル  $\mathbf{u}_{n+1}$  が存在して、  
 $\mathbf{u}_1, \dots, \mathbf{u}_n, \mathbf{u}_{n+1}$  は一次独立である。
- (2)  $\mathbf{u}_1, \dots, \mathbf{u}_n, \mathbf{u}_{n+1}$  の線形結合で書けない  $V$  のベクトル  $\mathbf{u}_{n+2}$  が存在して、  
 $\mathbf{u}_1, \dots, \mathbf{u}_n, \mathbf{u}_{n+1}, \mathbf{u}_{n+2}$  は一次独立である。
- $\vdots$   $\vdots$
- ( $N-n$ )  $\mathbf{u}_1, \dots, \mathbf{u}_n, \dots, \mathbf{u}_{N-1}$  の線形結合で書けない  $V$  のベクトル  $\mathbf{u}_N$  が存在して、  
 $\mathbf{u}_1, \dots, \mathbf{u}_n, \dots, \mathbf{u}_N$  は一次独立である。

と、一次独立なベクトルの組  $\mathbf{u}_1, \dots, \mathbf{u}_N$  が得られる。これらは  $V$  を生成する、つまり  $V$  の基底になっている。

証明は次のようにできる。次元の定義より、 $V$  の  $N+1$  個のベクトルは一次従属であるから、上で構成した  $\mathbf{u}_1, \dots, \mathbf{u}_N$  と任意の  $\mathbf{v} \in V$  に対して、

$$c_1 \mathbf{u}_1 + \dots + c_N \mathbf{u}_N + c_0 \mathbf{v} = \mathbf{0} \quad (2.6)$$

となるような  $(c_1, \dots, c_N, c_0) \neq (0, \dots, 0, 0)$  が存在する。ここでもし  $c_0 = 0$  なら、

$$c_1 \mathbf{u}_1 + \dots + c_N \mathbf{u}_N = \mathbf{0}$$

となる  $(c_1, \dots, c_N) \neq (0, \dots, 0)$  が存在することになり、 $\mathbf{u}_1, \dots, \mathbf{u}_N$  が一次独立であることと

矛盾する．よって  $c_0 \neq 0$  であるから，式 (2.6) の両辺を  $c_0$  で割ることができて，

$$\mathbf{v} = -\frac{c_1}{c_0}\mathbf{u}_1 - \cdots - \frac{c_N}{c_0}\mathbf{u}_N$$

と書ける．よって  $\mathbf{u}_1, \dots, \mathbf{u}_N$  は  $V$  を生成するから，これは  $V$  の基底である．□

この定理を使えば， $N$  次元ベクトル空間  $V$  の基底は次のように構成できる．まず，( $V \neq \emptyset$  であるから)  $V$  のベクトル  $\mathbf{u}_1$  を任意にとる．上の手順によって一次独立なベクトルの組  $\mathbf{u}_1, \dots, \mathbf{u}_N$  をとれば，これらは  $V$  の基底になっている．

以上の議論はベクトル空間が有限次元である場合に限って成立するが，ベクトル空間が無限次元であっても，やはり基底は必ず存在する．しかし，その証明には多くの数学的知識が必要であり，証明そのものも難しいので省略する．

## 2.2 内積空間

2.1 節ではユークリッド空間の縦ベクトルをもとにして，ベクトル空間を定義した．しかし，そもそも縦ベクトルはどのような動機によって定義されたのだろうか．元をたどれば，縦ベクトルとは幾何的な“矢印”を抽象化したものであり，和はベクトルの合成，スカラー倍はベクトルの伸縮に対応していたはずである．1 本の矢印は“長さ”を持ち，2 本の矢印は“角度”をなすはずである．そこで，この節ではベクトル空間に対して幾何的な性質を導入する．

### 2.2.1 ユークリッド空間の幾何学

**2 次元実ユークリッド空間** まずはイメージがしやすいように，2 次元平面，実数係数のベクトルについて考えてみよう．すなわち，2 次元ユークリッド空間内にある縦ベクトル  $\mathbf{x} = {}^t(x_1 \ x_2 \ x_3)$  (ただし  $x_1, x_2, x_3$  は実数) を扱うことにする．このベクトルの“矢印としての長さ”を  $\|\mathbf{x}\|$  と書くことにしよう．三平方の定理より，

$$\|\mathbf{x}\| = \sqrt{x_1^2 + x_2^2} \quad (2.7)$$

であることは容易に理解できる．式 (2.7) をベクトル  $\mathbf{x}$  の**ノルム** (norm) と呼ぶ．

2 つのベクトル  $\mathbf{x}, \mathbf{y}$  がなす角度  $\theta$  はどのように与えられるだろうか．これは，平面上の三角形に対して成り立つ**余弦定理**

$$\|\mathbf{x} - \mathbf{y}\|^2 = \|\mathbf{x}\|^2 + \|\mathbf{y}\|^2 - 2\|\mathbf{x}\|\|\mathbf{y}\|\cos\theta \quad (2.8)$$

を  $\theta$  について解くことで求められる．ところで，式 (2.8) にあるノルム  $\|\bullet\|^2$  を式 (2.7) に

よって展開して整理すれば,

$$\|\mathbf{x}\|\|\mathbf{y}\| \cos \theta = x_1 y_1 + x_2 y_2 \quad (2.9)$$

が得られる. 式 (2.9) を  $\mathbf{x}$  と  $\mathbf{y}$  の<sup>ないせき</sup>内積 (inner product) と呼ぶ. 内積の記法はいくつかあるが, ここでは  $\langle \mathbf{x}, \mathbf{y} \rangle$  と書くことにする<sup>7)</sup>. 内積を用いることで, 2 つのベクトルがなす角度 (の  $\cos$ ) は

$$\cos \theta = \frac{\langle \mathbf{x}, \mathbf{y} \rangle}{\|\mathbf{x}\|\|\mathbf{y}\|} \quad (2.10)$$

と書ける. 2 つのベクトルが直交していれば, つまり  $\theta = \pi/2$  ( $90^\circ$ ) であれば, 内積がゼロになることも容易に確認できるだろう.

興味深いことに, 内積を用いてノルムを計算することができる. 実際, 同じベクトル  $\mathbf{x}$  どうしの内積を計算すると, 当然  $\theta = 0$  であるから,

$$\langle \mathbf{x}, \mathbf{x} \rangle = x_1^2 + x_2^2 = \|\mathbf{x}\|^2 \quad (2.11)$$

であることがわかる.

**$N$  次元実ユークリッド空間** 一般の  $N$  次元<sup>じつ</sup>実ユークリッド空間についても, 内積やノルムが定義できる. ベクトル  $\mathbf{x} = {}^t(x_1 \ \dots \ x_N)$  と  $\mathbf{y} = {}^t(y_1 \ \dots \ y_N)$  の内積は, 式 (2.9) を拡張することで,

$$\langle \mathbf{x}, \mathbf{y} \rangle = \sum_{i=1}^N x_i y_i \quad (2.9')$$

で定義される. ノルムについても, 式 (2.7) と (2.11) と整合的に,

$$\|\mathbf{x}\| = \sqrt{\langle \mathbf{x}, \mathbf{x} \rangle} = \sqrt{\sum_{i=1}^N x_i^2} \quad (2.11')$$

で定まる.

**複素ユークリッド空間** ここまで実ベクトル空間の内積について扱ってきたが, 量子力学で扱うのは複素ベクトル空間である. そこで, 今までの定義を複素ベクトルに拡張しなければいけないのだが, その際に若干注意すべきことがある.

複素ベクトル  $\mathbf{x} = {}^t(x_1 \ \dots \ x_N)$ ,  $\mathbf{y} = {}^t(y_1 \ \dots \ y_N)$  (つまり  $x_i, y_i$  は複素数) の内積は, 一見すると式 (2.9') をそのまま使って定義できそうであるが, それは正しくない. もしこの定義を採用すると, 式 (2.11') のノルムが一般に複素数になってしまう. ノルムを“矢印の長さ”として解釈するためには, ノルムは正の実数 (またはゼロ) である必要がある.

そこで, 式 (2.9') を少し変更して,

$$\langle \mathbf{x}, \mathbf{y} \rangle = \sum_{i=1}^N x_i^* y_i \quad (2.9'')$$

---

7) 実ユークリッド空間においては, 内積を  $\mathbf{x} \cdot \mathbf{y}$  と書くことが多いだろう.



としてみよう．ただ単に  $x_i$  の複素共役をとっただけであるが，これだけで，ノルムが

$$\|\mathbf{x}\| = \sqrt{\langle \mathbf{x}, \mathbf{x} \rangle} = \sqrt{\sum_{i=1}^N |x_i|^2} \quad (2.11'')$$

と，正の実数（またはゼロ）になっている．よって，式 (2.9'') を複素ユークリッド空間における内積の定義とする．

**内積の性質** 式 (2.9'') で定義される内積の性質について，以下の性質が成り立つことが簡単に確かめられる．まず，ベクトルの線形結合と内積との関係について，

- (1) 任意の縦ベクトル  $\mathbf{x}, \mathbf{y}, \mathbf{z}$  および任意の複素数  $a, b$  に対し， $\langle \mathbf{x}, a\mathbf{y} + b\mathbf{z} \rangle = a\langle \mathbf{x}, \mathbf{y} \rangle + b\langle \mathbf{x}, \mathbf{z} \rangle$  が成り立つ．

また，ベクトルの順序を換えると，内積が変わることに注意しなければならない．

- (2) 任意の縦ベクトル  $\mathbf{x}, \mathbf{y}$  に対し， $\langle \mathbf{x}, \mathbf{y} \rangle = \langle \mathbf{y}, \mathbf{x} \rangle^*$  である．

最後に，**正定値性** (positive definiteness)，つまり

- (3) 任意の縦ベクトル  $\mathbf{x}$  に対し， $\langle \mathbf{x}, \mathbf{x} \rangle \geq 0$  であり，しかも  $\langle \mathbf{x}, \mathbf{x} \rangle = 0$  ならば  $\mathbf{x} = \mathbf{0}$  が成り立つ．

(3) は若干意味が取りづらいが，これは，ノルムは正またはゼロの値をとり，さらにノルムがゼロであるベクトルは  $\mathbf{0}$  のみであると主張しているのである．

## 2.2.2 内積の定義

2.2.1 節で見たユークリッド空間における内積の性質を抽象することによって，一般のベクトル空間における内積が定義される．

$V$  をベクトル空間とする． $V$  に属する 2 つのベクトルをある複素数に対応させる写像  $\langle \bullet, \bullet \rangle: V \times V \rightarrow \mathbb{C}$  であって，

- (1) **右線形性**——すなわち，任意のベクトル  $\psi, \xi, \eta$  および任意の複素数  $a, b$  に対し， $\langle \psi, a\xi + b\eta \rangle = a\langle \psi, \xi \rangle + b\langle \psi, \eta \rangle$ ．  
 (2) **共役対称性**——すなわち，任意のベクトル  $\psi, \xi$  に対し， $\langle \psi, \xi \rangle = \langle \xi, \psi \rangle^*$ ．ここで， $\bullet^*$  は  $\bullet$  の共役複素数を表す．  
 (3) **正定値性**——すなわち，任意のベクトル  $\psi$  に対し， $\langle \psi, \psi \rangle \geq 0$  であり，しかも  $\langle \psi, \psi \rangle = 0$  ならば  $\psi = \mathbf{0}$ ．

を満たすものを，( $V$  上の) **内積** (inner product) と呼ぶ．また，内積をもつベクトル空間のことを，**内積空間** (inner product space) という．

ここで，(1) と (2) を合わせると，左側のベクトルについては以下の**反線形性**

$$\langle a\psi + b\xi, \eta \rangle = a^*\langle \psi, \eta \rangle + b^*\langle \xi, \eta \rangle \quad (2.12)$$



が成り立つことに注意しなければならない。ブラ・ケット記法では、この反線形性を直接扱うことを避けるために、わざわざブラをケットに直して計算するのである。

なお、数学ではふつう (1) のかわりに左線形性——つまり  $\langle a\psi + b\xi, \eta \rangle = a\langle \psi, \eta \rangle + b\langle \xi, \eta \rangle$ ——を課すので、かわりに右側に反線形性が要請される。右線形性と左線形性のどちらを採用するかは単に定義の問題であり、両者は本質的に同じものである。ただし、ブラ・ケット記法は右線形性を前提としたものであるから、そちらに統一したほうが物理を扱ううえでは便利である。

### 2.2.3 ノルム

内積空間  $V$  のベクトル  $\psi$  に対して、内積の公理 (3) より、

$$\|\psi\| := \sqrt{\langle \psi, \psi \rangle} \quad (2.13)$$

は正の実数またはゼロとなる。式 (2.13) を  $\psi$  の（内積から導かれる）**ノルム** (norm) という。ノルムとはベクトルの“長さ”に対応する量である。

$V$  を内積空間、 $\|\bullet\|$  を  $V$  に付随するノルムとする。ノルムについて、以下の**三角不等式**

$$\|\psi + \xi\| \leq \|\psi\| + \|\xi\| \quad (2.14)$$

が成り立つ。幾何的に解釈すると、ベクトル  $\vec{a}$  とベクトル  $\vec{b}$  を合成したベクトル  $\vec{a} + \vec{b}$ （つまり、 $\vec{a}$  の始点と  $\vec{b}$  の終点をむすんだベクトル）の長さは、 $\vec{a}$  の長さと  $\vec{b}$  の長さを足したものよりも短い（または同じ）であるということである。式 (2.14) によって、ノルムは単にベクトルの長さというだけでなく、ベクトル空間上の距離と考えることができる。

式 (2.14) は次のように示される。まず、内積空間では、任意のベクトル  $\psi, \xi$  に対して、

$$|\langle \psi, \xi \rangle| \leq \|\psi\| \|\xi\| \quad (2.15)$$

が成り立つ。これを使うと、

$$\begin{aligned} \|\psi + \xi\|^2 &= \langle \psi + \xi, \psi + \xi \rangle \\ &= \langle \psi, \psi \rangle + \langle \psi, \xi \rangle + \langle \xi, \psi \rangle + \langle \xi, \xi \rangle \\ &= \|\psi\|^2 + 2\operatorname{Re}\langle \psi, \xi \rangle + \|\xi\|^2 \\ &\leq \|\psi\|^2 + 2|\langle \psi, \xi \rangle| + \|\xi\|^2 \\ &\leq \|\psi\|^2 + 2\|\psi\|\|\xi\| + \|\xi\|^2 = (\|\psi\| + \|\xi\|)^2 \end{aligned}$$

とできる。ここで、ひとつめの不等号は単なる複素数の絶対値の定義であり、ふたつめの不等号が式 (2.14) である。

式 (2.15) の証明は次のようにできる。

## 2.2.4 正規直交基底

2.1.6 節で取り上げたように、ベクトル空間には基底とよばれるベクトルの組が必ず存在する。したがって、内積空間にも基底が存在するのだが、内積空間においては**正規直交基底**とよばれる“良い”幾何的な性質を持つ基底をとることができる。この正規直交基底<sup>8)</sup>は量子力学を扱ううえで極めて重要な概念であり、量子力学の問題を解くことは、その問題にあった正規直交基底を見つけることに他ならない。そこでこの節では正規直交基底の定義を述べる。

**正規と直交** まずはベクトルの幾何的な性質を示す用語について整理しよう。内積空間のベクトル  $\psi, \xi$  について、この2つの内積がゼロ、つまり

$$\langle \psi, \xi \rangle = 0 \quad (2.16)$$

であるとき、 $\psi$  と  $\xi$  は**直交する**という。

互いに直交する零でないベクトルの組  $\mathbf{u}_1, \dots, \mathbf{u}_n$  は一次独立 (2.1.3 節) である<sup>9)</sup>。なぜなら、これらの一次関係を

$$\mathbf{0} = c_1 \mathbf{u}_1 + c_2 \mathbf{u}_2 + \dots + c_n \mathbf{u}_n \quad (c_1, c_2, \dots, c_n \text{ は複素数})$$

と書いたとき、この式の両辺と  $\mathbf{u}_i$  ( $1 \leq i \leq n$ ) との内積は

$$\langle \mathbf{u}_i, \mathbf{0} \rangle = c_1 \langle \mathbf{u}_i, \mathbf{u}_1 \rangle + \dots + c_i \langle \mathbf{u}_i, \mathbf{u}_i \rangle + \dots + c_n \langle \mathbf{u}_i, \mathbf{u}_n \rangle$$

と書けるが、 $\mathbf{u}_i$  と  $\mathbf{u}_j$  ( $j \neq i$ ) が直交すること、および  $\|\mathbf{u}_i\| \neq 0$  より  $c_i = 0$  が従う。 $i$  は任意なので、結局  $c_1 = c_2 = \dots = c_n$  であるから、 $\mathbf{u}_1, \dots, \mathbf{u}_n$  は一次独立であるといえる。

また、内積空間のベクトル  $\varphi$  のノルムが1、つまり

$$\|\varphi\| = 1 \quad (2.17)$$

であるとき、この  $\varphi$  を**単位ベクトル** (unit vector) (あるいは「 $\varphi$  は<sup>せい き</sup>**正規** (normal) である」) という。内積空間の任意のベクトル  $\psi$  は、適当な係数をかけることで単位ベクトルにすることができる：

$$\psi \mapsto \varphi := \frac{\psi}{\|\psi\|} \quad \text{とすれば,} \quad \|\varphi\| = 1$$

この操作を「 $\psi$  の<sup>きかくか</sup>**規格化** (normalization)」という。

8) より正確には、完全正規直交系。

9) ベクトルが無数個である場合についても同様である。

**正規直交基底** 内積空間  $V$  のベクトルの組  $(\varphi_i)_i = \varphi_1, \dots, \varphi_N$  が

$$\|\varphi_i\| = 1, \quad \langle \varphi_i, \varphi_j \rangle = \delta_{ij} \equiv \begin{cases} 1 & i = j \\ 0 & i \neq j \end{cases} \quad (2.18)$$

を満たすとき、これを  $V$  の **正規直交系** (orthonormal set) という<sup>10)</sup>。特に  $(\varphi_i)_i$  が  $V$  の基底であるとき、これを **正規直交基底** (orthonormal basis) という。式 (2.18) のひとつ目の式が「正規」、ふたつ目の式が「直交」をあらわす。

たとえば??は  $\mathbb{C}^N$  の正規直交基底である。一方、式 (2.5c) は  $\mathbb{C}^N$  の基底であるが、正規直交基底ではない。正規直交基底は内積空間の“良い”基底であるといえ、量子力学を含む物理の様々な分野で頻繁に登場する。ニュートン力学ではふつう直交座標系（デカルト座標系）を使って議論するが、これは 3 次元ユークリッド空間  $\mathbb{R}^3$  の正規直交基底  $\hat{x}, \hat{y}, \hat{z}$  によって座標  $\mathbf{r}$  を分解していることに他ならない。ニュートン力学を数学的に整理して、座標系によらない、つまり基底の取り方によらない一般的な議論を行うのが解析力学である。

**正規直交基底の構成** 有限次元内積空間では、以下に挙げるグラム–シュミットの方法によって、正規直交基底を具体的に構成することができる。

まず、基底  $\mathbf{u}_1, \dots, \mathbf{u}_N$  を適当にとる。このうちの  $\mathbf{u}_1$  を規格化したものを  $\varphi_1$  とおく：

$$\varphi_1 := \frac{\mathbf{u}_1}{\|\mathbf{u}_1\|}$$

次に、ベクトル  $\varphi_2$  を次のように定義する。

$$\varphi_2 := \left[ \mathbf{u}_2 - \langle \mathbf{u}_2, \varphi_1 \rangle \varphi_1 \right] \text{ の規格化 } = \frac{\mathbf{u}_2 - \langle \mathbf{u}_2, \varphi_1 \rangle \varphi_1}{\|\mathbf{u}_2 - \langle \mathbf{u}_2, \varphi_1 \rangle \varphi_1\|}$$

定義より  $\|\varphi_2\| = 1$  である。また、 $\|\varphi_1\| = 1$  に注意すれば  $\langle \varphi_2, \varphi_1 \rangle = 0$  とわかる。これらを用いて  $\varphi_3$  を

$$\varphi_3 := \left[ \mathbf{u}_3 - \langle \mathbf{u}_3, \varphi_1 \rangle \varphi_1 - \langle \mathbf{u}_3, \varphi_2 \rangle \varphi_2 \right] \text{ の規格化}$$

と定めれば、 $\langle \varphi_3, \varphi_1 \rangle = \langle \varphi_3, \varphi_2 \rangle = 0$  であり、さらに  $\|\varphi_3\| = 1$  である。一般の  $\varphi_i$  は  $\varphi_1, \dots, \varphi_{i-1}$  を用いて帰納的に

$$\varphi_i := \left[ \mathbf{u}_i - \sum_{k=1}^{i-1} \langle \mathbf{u}_i, \varphi_k \rangle \varphi_k \right] \text{ の規格化}$$

と定義することで、もとの基底  $\mathbf{u}_1, \dots, \mathbf{u}_N$  から新たなベクトルの組  $\varphi_1, \dots, \varphi_N$  が得られた。構成法よりこれらは正規直交系（式 (2.18)）であり、また 2.1.6 節での議論により、これらが基底になることがわかる。

10) orthonormal = orthogonal (直交) + normal (正規) をあらわす。

## 2.3 空間の完備性

式(2.3)のように、ベクトル空間  $V$  に属するベクトルの無限級数（無限の線形結合）は、 $V$  の外で収束することがある．量子力学では往々にしてこのような“収束すべき級数”が外に出ず、 $V$  の中で収束する条件として、内積空間の**完備性**が定義される．

本稿で扱う有限次元ヒルベルト空間の場合は完備性が問題になることはないが、ヒルベルト空間を定義するために、この節で完備性を扱う．

### 2.3.1 ベクトルの列の収束

実数、あるいは複素数の世界では、数列というものを定義することができ、与えられた数列が収束するか否かということを議論することができた．ベクトルに関して、同様の概念はどのように定義できるだろうか．

**点列** そのために、まずはベクトルの“列” (sequence) を定義しよう．ベクトル空間  $V$  の部分集合であって、自然数によって添字づけられたものを、ベクトルの<sup>てんれつ</sup>点列という．要するに、 $V$  のベクトルを  $\psi_1, \psi_2, \psi_3, \dots$  というふうに順に並べたもののことである．ここでは点列として、無限に続く列のみを考えることにしよう．有限の点列  $\psi_1, \dots, \psi_n$  は、点列  $\psi_1, \dots, \psi_n, \psi_n, \psi_n, \dots$  として扱うことにする．

これから点列  $\psi_1, \psi_2, \dots$  のことを、 $(\psi_n)_{n \in \mathbb{N}}$ 、あるいはさらに略して  $(\psi_n)_n$  と書くことにする．

**収束** 内積空間においては、ベクトルの点列の“収束”を定義することができる．

$V$  を内積空間、 $\|\bullet\|$  をそれに付随するノルムとする． $V$  の点列  $(\psi_n)_n$  について、

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \|\psi_n - \psi_*\| = 0 \quad \text{つまり} \quad \|\psi_n - \psi_*\| \xrightarrow{n \rightarrow \infty} 0 \quad (2.19)$$

を満たす  $V$  のベクトル  $\psi_*$  が存在するとき、 $(\psi_n)_n$  は  $\psi_*$  に**収束する**といい、 $\psi_*$  のことを  $(\psi_n)_n$  の**極限**という．ただし、極限  $\psi_*$  は  $V$  に属していなければならない．この点については2.3.2節で議論する．

### 2.3.2 コーシー列

$V$  を内積空間、 $\|\bullet\|$  を  $V$  に付随するノルムとする． $V$  の点列  $(\psi_n)_n$  が

$$\lim_{m, n \rightarrow \infty} \|\psi_m - \psi_n\| = 0 \quad (2.20)$$

を満たすとき、 $(\psi_n)_n$  は**コーシー列** (Cauchy sequence) であるという。

式 (2.20) における極限  $\lim_{m,n \rightarrow \infty}$  の意味が分かりづらいが、言葉で書き下すと次のようになる。

＊ **任意の正の実数  $\varepsilon$**  に対し、**ある自然数  $N$**  が存在して、「 $m, n > N$  ならば  $\|\psi_m - \psi_n\| < \varepsilon$ 」が成り立つ<sup>11)</sup>。

つまり式 (2.20) は、「十分大きな ( $N$  より大きな)  $m, n$  に対し、2つのベクトル  $\psi_m, \psi_n$  の距離はほとんどゼロである ( $\varepsilon$  で押さえられる)」と解釈できる。記号  $\lim_{m,n \rightarrow \infty}$  を素朴に「 $m$  と  $n$  を同時に無限大にする」と考えるのは危険である。例えば各項が

$$x_n := 1 + \frac{1}{2} + \frac{1}{3} + \cdots + \frac{1}{n}$$

で与えられる数列  $(x_n)_n$  は、一見  $|x_m - x_n| \rightarrow 0$  ( $m, n \rightarrow \infty$ ) を満たしそうだが、実際には、 $m$  を固定して  $n \rightarrow \infty$  とすれば、

$$|x_m - x_n| = \frac{1}{m+1} + \frac{1}{m+2} + \cdots + \frac{1}{n} \quad (m < n)$$

は発散することがわかる。

話を一般のコーシー列に戻そう。コーシー列  $(\psi_n)_n$  に対し、十分大きな  $m$  をとり、 $\psi_m$  を固定する。コーシー列の定義より、点列の各項  $\psi_n$  ( $n > m$ ) は、 $\psi_m$  の十分近くにある ( $\psi_m$  との距離が  $\varepsilon$  で押さえられる) といえる。 $\psi_n$  の振れ幅  $\varepsilon$  は、 $m$  をより大きな値に取り直すことで、いくらでも小さくすることができる。したがって、「点列  $\psi_n$  は、ある一点  $\psi_*$  に収束する」と考えることができるだろう。

以上の推論から、コーシー列は“**収束しそうな点列**”であるといえる。あくまで収束しそうな列であって、収束するとは限らない。反例はあとで述べるが、問題になるのは**極限  $\psi_*$  が空間内に存在のか**である。

コーシー列と収束する点列 (収束列) の関係について考えてみよう。

**収束列はコーシー列である**  $V$  で収束する点列はコーシー列である。なぜなら、点列  $(\psi_n)_n$  が  $\psi_n \rightarrow \psi_*$  ( $n \rightarrow \infty$ ) に収束するとすれば、定義より  $\|\psi_n - \psi_*\| \rightarrow 0$  ( $n \rightarrow \infty$ ) だから、

$$\|\psi_m - \psi_n\| = \|(\psi_m - \psi_*) + (\psi_* - \psi_n)\| \leq \|\psi_m - \psi_*\| + \|\psi_* - \psi_n\| \xrightarrow{n,m \rightarrow \infty} 0$$

となり、 $(\psi_n)_n$  はコーシー列の条件を満たす。

**コーシー列は収束するとは限らない** 一方、 $V$  のコーシー列が  $V$  で収束するとは限らない。例えば、各項が有理数である数列  $1, 1.4, 1.41, 1.414, \dots$  を考える。これがコーシー列で

---

11) 文献によっては「 $\lim_{m,n \rightarrow \infty}$  を厳密に言えば——」としてこの定義が書いてあるが、そのような言い方は  $\lim$  という記号に対して失礼である。

あることを確認するのは容易である<sup>12)</sup>。一方で、この数列は「一夜一夜に人見ごろ」の語呂合わせで知られる無理数  $\sqrt{2} = 1.41421356 \dots$  に収束することもまた明らかであろう。有理数の世界に  $\sqrt{2}$  は存在しないので、この数列は（有理数の列としては）収束しない。この例から、 $\sqrt{2}$  のまわりは有理数の空間に含まれるにもかかわらず、 $\sqrt{2}$  そのものは空間の「穴」になっていることがわかる。

古代ギリシャの数学者であったピタゴラスとその一派は、自然のもつ美しさとして整数比を重ねたという。整数比で表すことができない無理数の存在に気付いた一派の数学者ヒッパソスが海に沈められたという伝説もある。そんなピタゴラスたちが美しいと信じた有理数は、実は至るところに落とし穴のある空間であったのである。

### 2.3.3 完備な内積空間

これまでに見たように、内積空間  $V$  における“収束しそう”な数列であるコーシー列が、 $V$  で収束するとは限らない。この話題に限らず、数学では直感と実際との間にしばしば隔たりが存在するのであるが、やはり収束しないコーシー列が存在するというのは、どうにも気分が悪い。そこで、「すべてのコーシー列が直観どおりに収束する空間」というものを定義することにしよう。

内積空間  $V$  のどんなコーシー列も  $V$  のベクトルに収束するとき、 $V$  は（ノルム  $\|\bullet\|$  に関して<sup>13)</sup>）**完備** (complete) であるという。完備な空間とは、2.3.2 節でいう“穴”が開いていない空間である。

**実数と複素数の完備性** たとえば、実数全体の空間  $\mathbb{R}$  は完備である。これを**実数の完備性**という。また、複素数全体の空間  $\mathbb{C}$  も完備である（**複素数の完備性**）。後者は前者からすぐにわかる。これを示すために、 $\mathbb{C}$  のコーシー列  $(x_n)_n$  を任意にとる。このとき、各項を  $x_n = a_n + ib_n$  ( $a_n, b_n$  は実数) と表せば、 $(x_n)_n$  がコーシー列である定義は

$$|x_m - x_n| \xrightarrow{m, n \rightarrow \infty} 0 \quad \text{つまり} \quad (a_m - a_n)^2 + (b_m - b_n)^2 \xrightarrow{m, n \rightarrow \infty} 0$$

と書ける。よって  $(a_n)_n$  と  $(b_n)_n$  がともに  $\mathbb{R}$  のコーシー列であることがわかるので、実数の完備性からそれぞれ  $a_n \rightarrow a_*$ ,  $b_n \rightarrow b_*$  ( $n \rightarrow \infty$ ,  $a_*, b_* \in \mathbb{R}$ ) に収束する。このとき複素数列  $(x_n)$  が  $x_n \rightarrow a_* + ib_*$  ( $n \rightarrow \infty$ ) に収束することは明らかである。よって  $\mathbb{C}$  は完備である。□

一方、2.3.2 節で見たように、有理数のコーシー列には有理数に収束しないものがある

12) 具体的には、 $|x_m - x_n| < 10^{-a+2}$  (ただし  $m$  と  $n$  のうち小さいほうを  $a$  とする) が成り立つことからわかる。

13) 収束はノルムを用いて定義される。式 (2.19) を参照。

ので、有理数全体の空間  $\mathbb{Q}$  は完備ではない。

**有限次元内積空間の完備性** より一般の内積空間の完備性についても考えてみよう。驚くことに、有限次元の内積空間は、すべて完備であることが示される。

証明は次のようにする。  $V$  を有限次元の内積空間とすれば、その正規直交基底  $\varphi_1, \dots, \varphi_N$  をとることができる。すると、  $V$  の任意のコーシー列  $(\psi_n)_n$  の各項は、

$$\psi_n = c_n^{(1)} \varphi^{(1)} + \dots + c_n^{(N)} \varphi^{(N)} \quad (c_n^{(i)} \text{ は複素数})$$

と書ける。コーシー列の定義より、

$$\begin{aligned} \|\psi_m - \psi_n\| &\xrightarrow{m, n \rightarrow \infty} 0 \\ \text{つまり} \quad (c_m^{(1)} - c_n^{(1)})^2 + \dots + (c_m^{(N)} - c_n^{(N)})^2 &\xrightarrow{m, n \rightarrow \infty} 0 \\ \text{つまり} \quad \text{すべての } 1 \leq i \leq N \text{ に対して } c_m^{(i)} - c_n^{(i)} &\xrightarrow{m, n \rightarrow \infty} 0 \end{aligned}$$

となる。よって複素数列  $(c_n^{(i)})_n$  はコーシー列であり、複素数の完備性からそれぞれの  $i$  について  $c_n^{(i)} \rightarrow c_*^{(i)}$  と収束する。このときコーシー列  $(\psi_n)_n$  は

$$\psi_n \xrightarrow{n \rightarrow \infty} c_*^{(1)} \varphi^{(1)} + \dots + c_*^{(N)} \varphi^{(N)} \quad (c_*^{(i)} \text{ は複素数})$$

と、たしかに  $V$  のベクトルに収束する。

## 2.4 ヒルベルト空間

完備な内積空間を**ヒルベルト空間** (Hilbert space) という。より正確には、内積空間  $\mathcal{H}$  が自身に付随するノルムに関して完備であるとき、 $\mathcal{H}$  をヒルベルト空間という。

**2.3.3 節** で見たように、有限次元の内積空間は完備であるから、すべての有限次元内積空間はヒルベルト空間である。

特に、ユークリッド空間  $\mathbb{C}^N$  は有限次元ゆえに完備なので、ヒルベルト空間である。



## §3 線形代数の力

### 3.1 線形写像

#### 3.1.1 そもそも写像とは

**写像** 線形写像を定義する前に、そもそも写像とはなにかを簡単に見る。2つの集合  $X, Y$  が与えられたとき、 $X$  の各元をそれぞれ  $Y$  のある元に対応させる規則のことを、 $X$  から  $Y$  への<sup>しゃぞう</sup>写像という。ある写像を  $f$  と書くことにすると、元  $x \in X$  が元  $y \in Y$  に対応することを、 $f(x) = y$  と書く。

$f$  を集合  $X$  から  $Y$  への写像とする。 $X$  の任意の元  $x, y$  について、 $x \neq y$  なら  $f(x) \neq f(y)$  が必ず成り立つとき、 $f$  を  $X$  から  $Y$  への<sup>たんしゃ</sup>単射 (injection) という。また、 $Y$  の任意の元  $y$  について、 $y = f(x)$  を満たす  $X$  の元  $x$  が存在するとき、 $f$  を  $X$  から  $Y$  への<sup>ぜんしゃ</sup>全射 (surjection) という。 $f$  が単射であり、かつ全射であるとき、 $f$  を<sup>ぜんたんしゃ</sup>全単射 (bijection) という。

$X$  から  $Y$  への写像  $f$  が全単射であるとは、 $X$  の元と  $Y$  の元が  $f$  によってそれぞれ 1 対 1 に結びついていることを意味する。 $f$  は  $X$  の任意の元  $x$  を  $Y$  のある元  $y$  に対応させる写像だが、 $f$  が全単射であれば、 $f$  による対応を逆にたどって、 $Y$  の任意の元  $y$  を  $X$  のある元  $x$  に対応させる写像 (つまり  $Y$  から  $X$  への写像)  $f^{-1}$  を考えることができる。このような  $f^{-1}$  を、 $f$  の<sup>ぎやくしゃぞう</sup>逆写像という。

#### 3.1.2 線形写像の定義

写像そのものも非常に重要な概念であるが、量子力学 (あるいはもっと一般の線形代数) でとりわけ重要な役割を果たすのは、写像のうち特別な性質 (線形性) を満たすものである。2つのベクトル空間  $V, W$  が与えられたとき、 $V$  から  $W$  への写像  $f$  があったとする。すべての  $\psi \in V$  とすべての  $\xi \in W$  に対して、

$$f(a\psi + b\xi) = af(\psi) + bf(\xi) \quad (3.1)$$

を満たすとき、 $f$  を ( $V$  から  $W$  への) 線形写像 (linear map) という。あるいは、 $f$  は線形 (linear) であるともいう。



線形写像の例としてなじみ深いのが行列である。複素成分の  $M \times N$  行列  $A$  は、ユークリッド空間  $\mathbb{C}^M$  から  $\mathbb{C}^N$  への線形写像になっている。  $A$  が式 (3.1) を満たすことは、行列計算によって容易に示されるが、ここでは省略する。

微分演算子  $\hat{D} := \frac{d}{dx}$  も線形写像である。  $\hat{D}$  は、ベクトル空間  $C^1$  の元（1回微分可能な連続関数）を  $C^0$  の元（連続関数）に対応させる写像である。  $\hat{D}$  が線形であることは、関数  $f, g \in C^1$  および複素数  $a, b$  に対して、

$$\hat{D}(af + bg)(x) = \frac{d}{dx}(af(x) + bg(x)) = a \frac{df(x)}{dx} + b \frac{dg(x)}{dx} = (a\hat{D}f + b\hat{D}g)(x)$$

であることから従う（ $\hat{D}(f)$  を  $\hat{D}f$  と略記している）<sup>14)</sup>。これが??で扱った「線形微分方程式」の意味するところである。

### 3.1.3 内積空間の線形写像

**偏極恒等式** 内積空間  $V$  から  $V$  自身への線形写像  $f$  を考える。  $V$  のベクトル  $\psi, \xi$  について、

$$\begin{aligned} \langle \psi, f(\xi) \rangle = \frac{1}{4} \{ & \langle \psi + \xi, f(\psi + \xi) \rangle - \langle \psi - \xi, f(\psi - \xi) \rangle \\ & + i \langle \psi + i\xi, f(\psi + i\xi) \rangle - i \langle \psi - i\xi, f(\psi - i\xi) \rangle \} \end{aligned} \quad (3.2a)$$

が成り立つ。特に  $f = \hat{1}$ （恒等写像）であるとき、

$$\langle \psi, \xi \rangle = \frac{1}{4} \{ \|\psi + \xi\|^2 - \|\psi - \xi\|^2 + i\|\psi + i\xi\|^2 - i\|\psi - i\xi\|^2 \} \quad (3.2b)$$

である。これらを**偏極恒等式**（polarization identity）という。これらは内積  $\langle \bullet, \bullet \rangle$  と  $f$  の線形性を用いて展開することで、容易に証明できる。実際、それぞれの項は

$$\begin{aligned} \langle \psi + \xi, f(\psi + \xi) \rangle &= \langle \psi, f(\psi) \rangle + \langle \psi, f(\xi) \rangle + \langle \xi, f(\psi) \rangle + \langle \xi, f(\xi) \rangle \\ \langle \psi - \xi, f(\psi - \xi) \rangle &= \langle \psi, f(\psi) \rangle - \langle \psi, f(\xi) \rangle - \langle \xi, f(\psi) \rangle + \langle \xi, f(\xi) \rangle \\ \langle \psi + i\xi, f(\psi + i\xi) \rangle &= \langle \psi, f(\psi) \rangle + i\langle \psi, f(\xi) \rangle - i\langle \xi, f(\psi) \rangle + \langle \xi, f(\xi) \rangle \\ \langle \psi - i\xi, f(\psi - i\xi) \rangle &= \langle \psi, f(\psi) \rangle - i\langle \psi, f(\xi) \rangle + i\langle \xi, f(\psi) \rangle + \langle \xi, f(\xi) \rangle \end{aligned}$$

と展開できて、これらに係数をかけて足せば、それぞれの第3項のみが残る。

**線形写像の一致** 有限次元内積空間  $V$  から  $V$  自身への線形写像  $f, g$  をとる。このとき、

$$\text{すべての } \psi, \xi \in V \text{ に対して } \langle \psi, f(\xi) \rangle = \langle \psi, g(\xi) \rangle \quad (3.3)$$

14) この議論を精緻に行うには、連続関数全体が関数としての和とスカラー倍に対してベクトル空間をなすことを示さないといけないが、本稿では  $\hat{D}$  を扱わないので例示だけにとどめる。

なら  $f = g$  である。なぜなら、 $V$  の正規直交基底  $(\varphi_i)_{1 \leq i \leq N}$  を使って  $f(\xi) = \sum_i c_i \varphi_i$ ,  $g(\xi) = \sum_i d_i \varphi_i$  と展開し、 $\psi$  を順に  $\psi = \varphi_1, \dots, \varphi_N$  とおくと、それぞれに対して  $c_1 = d_1, \dots, c_N = d_N$  が成り立つから、 $f(\xi) = g(\xi)$  が従う。ここで  $\xi$  は任意であるから、結局  $f = g$  である。

もう少し条件を弱めた

$$\text{すべての } \psi \in V \text{ に対して } \langle \psi, f(\psi) \rangle = \langle \psi, g(\psi) \rangle \quad (3.4)$$

であっても  $f = g$  がいえる。実際、式 (3.3) を仮定すると、偏極恒等式 (式 (3.2a)) より式 (3.3) が満たされる。

## 3.2 ベクトル空間の同型

いままで「内積空間  $V$ 」について、ベクトル  $\mathbf{v} \in V$  や基底  $(\mathbf{u}_i)_i$ 、内積  $\langle \bullet, \bullet \rangle$  など扱ってきたが、これまでの議論ではベクトルが具体的にどのようなものであるのか、あるいは内積がどのように定義されるのかについては触れなかった。具体例はたびたび扱ったが、それらを省略してもこれまでの議論には何ら影響しない。

このことをもう少し考えてみよう。??ではいくつかベクトル空間の例を見た。そこでのベクトルを  $\psi$  という文字で表してしまえば、それがユークリッド空間  $\mathbb{C}^N$  のベクトル  $\mathbf{x}$  であるか、 $N$  階斉次線形常微分方程式 (??) の解となるベクトル  $\varphi(x)$  であったかは、まったく区別がつかない。それでも 2.1.2 節で述べたベクトル空間の公理を使って、ベクトルの性質を議論できるということは、この 2 つのベクトル空間は“同じ”ものとみなせるのではないだろうか。あるいはもっとほかの空間であっても、実は  $\mathbb{C}^N$  と同じように扱えるのではないか。この発想を数学的に定義したのがベクトル空間の<sup>どうけい</sup>同型である。

### 3.2.1 同型写像

$V, W$  をそれぞれ内積空間とする。 $V$  から  $W$  への線形写像  $f$  が全単射であり、さらに内積を保つ、つまり

$$\langle f(\psi), f(\xi) \rangle = \langle \psi, \xi \rangle$$

が  $V$  の任意のベクトル  $\psi, \xi$  に対して成り立つ<sup>15)</sup> とき、この  $f$  を**同型写像** (isomorphism) という。ベクトル空間  $V, W$  の間に同型写像が存在するとき、 $V$  と  $W$  は (内積空間として) <sup>どうけい</sup>**同型** (isomorphic) であるという。

15) なお、 $\langle f(\psi), f(\xi) \rangle$  は  $W$  上の内積、 $\langle \psi, \xi \rangle$  は  $V$  上の内積であるから、本来は記号を区別すべきである。

同型写像は、2 つのベクトル空間の線形構造および内積構造を保つ可逆な変換である。したがって、互いに同型な内積空間は、(本質的に) 同じベクトル空間であるとみなすことができる。あるベクトル空間上で議論をする代わりに、それと同型なベクトル空間上での議論を流用することができる。抽象論の威力が存分に発揮される部分である。

### 3.2.2 有限次元内積空間の同型

**有限次元内積空間は  $\mathbb{C}^N$  と同型** 驚くべきことに、有限次元の内積空間は、すべてユークリッド空間と同型であることがわかる。より正確に述べると、すべての  $N$  次元内積空間は、複素ユークリッド空間  $\mathbb{C}^N$  と同型である。これを証明しよう。

考える  $N$  次元ベクトル空間を  $V$  とする。  $V$  の正規直交基底をひとつ取り、それを  $(\mathbf{u}_i)_i$  とする。  $\mathbb{C}^N$  から  $V$  への写像  $f$  を、

$$f(x_1 \mathbf{e}_1 + \cdots + x_N \mathbf{e}_N) = x_1 \mathbf{u}_1 + \cdots + x_N \mathbf{u}_N \quad (3.5)$$

で定める。ここで  $(\mathbf{e}_i)_i$  は  $\mathbb{C}^N$  の正規直交基底である。  $f$  が全単射、線形であり、内積を保つことを示せばよい。

**式 (3.5) が well-defined であること** 2.1.5 節で見たように、  $\mathbb{C}^N$  のベクトル  $\mathbf{x}$  に対して、基底による展開  $\mathbf{x} = \sum_{i=1}^N x_i \mathbf{e}_i$  における係数  $(x_i)_i$  は一意に定まる。よって、式 (3.5) は矛盾なく定義できる。

**式 (3.5) が全単射であること** 逆写像  $f^{-1}$  が

$$f^{-1}(x_1 \mathbf{u}_1 + \cdots + x_N \mathbf{u}_N) = x_1 \mathbf{e}_1 + \cdots + x_N \mathbf{e}_N$$

と構成できるので、  $f$  は全単射である。

**式 (3.5) が線形であること**  $\mathbb{C}^N$  の 2 つのベクトル  $\mathbf{x} = \sum_{i=1}^N x_i \mathbf{e}_i$ ,  $\mathbf{y} = \sum_{i=1}^N y_i \mathbf{e}_i$ , および複素数  $a, b$  について、

$$\begin{aligned} f(a\mathbf{x} + b\mathbf{y}) &= f((ax_1 + by_1)\mathbf{e}_1 + \cdots + (ax_N + by_N)\mathbf{e}_N) \\ &= (ax_1 + by_1)\mathbf{u}_1 + \cdots + (ax_N + by_N)\mathbf{u}_N \\ &= a(x_1\mathbf{u}_1 + \cdots + x_N\mathbf{u}_N) + b(y_1\mathbf{u}_1 + \cdots + y_N\mathbf{u}_N) \\ &= af(\mathbf{x}) + bf(\mathbf{y}) \end{aligned}$$

とできる。

**式 (3.5) が内積を保つこと**  $\mathbb{C}^N$  に属するベクトルの内積は、?? の形で書ける。一方、  $f(\mathbf{x}) = \sum_{i=1}^N x_i \mathbf{u}_i$ ,  $f(\mathbf{y}) = \sum_{i=1}^N y_i \mathbf{u}_i$  の内積は、内積の線形性・反線形性 (2.2.2 節の (1))

と式 (2.12)) および  $(\mathbf{u}_i)_i$  が正規直交であること (2.2.4 節の式 (2.18)) を使えば

$$\langle f(\mathbf{x}), f(\mathbf{y}) \rangle = \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N x_i^* y_j^* \langle \mathbf{u}_i, \mathbf{u}_j \rangle = \sum_{i=1}^N x_i^* y_i = \langle \mathbf{x}, \mathbf{y} \rangle$$

と求められる。したがって  $f$  は内積を保つ。

すべての  $N$  次元ベクトル空間は互いに同型である。なぜなら、 $N$  次元ベクトル空間  $V, W$  に対して、 $\mathbb{C}^N$  から  $V$  への同型写像  $f$  および  $\mathbb{C}^N$  から  $W$  への同型写像  $g$  が存在するので、 $g \circ f^{-1}$  が  $V$  から  $W$  への同型写像になっているからである。

### 3.3 表現行列

有限次元ベクトル空間  $V$  から  $W$  への線形写像  $f$  について考えよう。 $V$  は  $\mathbb{C}^M$  と同型、 $W$  は  $\mathbb{C}^N$  と同型であるから、 $\mathbb{C}^M$  から  $V$ 、 $\mathbb{C}^N$  から  $W$  への同型写像  $\Phi, \Phi'$  がそれぞれ存在する。 $V$  の基底  $\mathbf{u}_1, \dots, \mathbf{u}_M$ 、 $W$  の基底  $\mathbf{u}'_1, \dots, \mathbf{u}'_N$  をとり、 $\Phi, \Phi'$  をそれぞれ

$$\Phi(\mathbf{e}_i) = \mathbf{u}_i, \quad \Phi'(\mathbf{e}'_j) = \mathbf{u}'_j \quad \text{where } 1 \leq i \leq M, 1 \leq j \leq N$$

と定める。ただし  $\mathbf{e}_i, \mathbf{e}'_j$  はそれぞれ  $(N \rightarrow M, N)$  で定義される  $\mathbb{C}^M, \mathbb{C}^N$  の基底である。これらを用いると、 $f$  に対して  $\mathbb{C}^M$  から  $\mathbb{C}^N$  への線形写像  $\hat{A} = \Phi'^{-1} \circ f \circ \Phi$  が定まる。 $\hat{A}$  は  $N \times M$  行列  $A$  として表せるので、この  $A$  を  $f$  の (基底  $(\mathbf{u}_i)_i, (\mathbf{u}'_j)_j$  に対する) **表現行列** という。なお、表現行列の形は  $V, W$  の基底をどう取るかに依存する。特に、基底の順番を入れ替えただけでも表現行列が変化することに注意が必要である。

具体的に  $A$  を求めるには次のようにすればよい。 $V$  の基底  $(\mathbf{u}_i)_i$  の  $f$  による変換が、 $W$  の基底  $(\mathbf{u}'_j)_j$  を用いて

$$f(\mathbf{u}_i) = a_{1i}\mathbf{u}'_1 + \dots + a_{Ni}\mathbf{u}'_N \quad (1 \leq i \leq M)$$

と書けたとする。この  $a_{ji}$  を転置して並べた  $M \times N$  行列

$$A = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1M} \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2M} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{N1} & a_{N2} & \cdots & a_{NM} \end{pmatrix}$$

が  $f$  の表現行列である。式でまとめると、

$$\begin{pmatrix} f(\mathbf{u}_1) & \cdots & f(\mathbf{u}_M) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathbf{u}'_1 & \cdots & \mathbf{u}'_N \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_{11} & \cdots & a_{1N} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{NM} & \cdots & a_{NM} \end{pmatrix}$$

と書ける。

## §4 量子力学への準備

今後ヒルベルト空間といった場合、有限次元のもの、とくにユークリッド空間  $\mathbb{C}^N$  を指すものとする。

### 4.1 ブラ・ケット記法

この節では、量子力学を議論する際に使う記号、**ブラ**と**ケット**について扱う。これらの記号は必須というわけではないが、非常に便利なので量子力学およびその周辺分野では広く使われている。相対論におけるアインシュタインの縮約規則に似たような立ち位置にある記号である。

考えるヒルベルト空間のベクトルを**ケット** (ket) といい、 $|\psi\rangle$  と書く。3.2 節で見たように、有限次元ヒルベルト空間のベクトルは、数ベクトルとして書けるのであった：

$$|\psi\rangle = \begin{pmatrix} a_1 \\ \vdots \\ a_N \end{pmatrix}, \quad |\xi\rangle = \begin{pmatrix} b_1 \\ \vdots \\ b_N \end{pmatrix}$$

転置の記号を使って  $|\psi\rangle = {}^t(a_1 \ \dots \ a_N)$  のように書くこともあるが、単に紙幅を節約するためである。

ケットはベクトルであるから、当然 2.1.2 節で挙げた条件を満たす。そこで扱った条件をブラの言葉で書き直そう。表記の簡略化のために、和とスカラー倍を、

$$|\psi + \xi\rangle := |\psi\rangle + |\xi\rangle = {}^t(a_1 + b_1 \ \dots \ a_N + b_N), \quad |c\psi\rangle := c|\psi\rangle = {}^t(ca_1 \ \dots \ ca_N)$$

のように書く。したがって、 $|\psi_1\rangle, \dots, |\psi_N\rangle$  の線形結合は

$$|*\rangle \sum_{i=1}^N c_i \psi_i := \sum_{i=1}^N c_i |\psi_i\rangle$$

のように書ける。さて、ベクトルの和については、(1) と (2) は明らかであるから省略して、

(3) ある  $0 \in \mathcal{H}$  が存在して、任意の  $|\psi\rangle \in \mathcal{H}$  に対し、 $|\psi\rangle + 0 = |\psi\rangle$ 。

(4) 任意の  $|\psi\rangle \in \mathcal{H}$  に対し、ある  $|\xi\rangle \in \mathcal{H}$  が存在して、 $|\psi\rangle + |\xi\rangle = 0$ 。

とかける。ここでの  $0$  は、複素数としてのゼロではなく、 $\mathcal{H}$  のベクトル  $\mathbf{0} = {}^t(0 \ \dots \ 0)$  のことである。なお、 $|0\rangle$  と書いた場合は、ふつう  $|0\rangle = {}^t(1 \ 0)$  のことであり、 $\mathbf{0}$  ではない。

スカラー倍については

(5) 任意の  $|\psi\rangle \in \mathcal{H}$  と任意の複素数  $a, b$  に対し,

$$(a+b)|\psi\rangle = a|\psi\rangle + b|\psi\rangle \quad \text{あるいは} \quad |(a+b)\psi\rangle = |a\psi + b\psi\rangle$$

(6) 任意の  $|\psi\rangle, |\xi\rangle \in \mathcal{H}$  と任意の複素数  $a$  に対し,

$$a(|\psi\rangle + |\xi\rangle) = a|\psi\rangle + a|\xi\rangle \quad \text{あるいは} \quad |a(\psi + \xi)\rangle = |a\psi + a\xi\rangle$$

と書ける. (7) と (8) も明らかであるから省略する.

ケットの複素共役をとって転置したもの<sup>16)</sup>を**ブラ** (bra) とよび,

$$\langle\psi| = (|\psi\rangle)^\dagger = (a_1^* \quad \cdots \quad a_N^*)$$

と書く. ブラとケットを用いると, ヒルベルト空間の内積は

$$\langle\psi|\xi\rangle := \langle\psi| \cdot |\xi\rangle = (a_1^* \quad \cdots \quad a_N^*) \begin{pmatrix} b_1 \\ \vdots \\ b_N \end{pmatrix} = \sum_{i=1}^N a_i^* b_i = ??$$

とあらわされる. 2.2.2 節で扱った内積の公理は

(1) **右線形性**——任意の  $|\psi\rangle, |\varphi\rangle, |\xi\rangle \in \mathcal{H}$  および任意の複素数  $a, b$  に対し,

$$\langle\psi|a\varphi + b\xi\rangle = a\langle\psi|\varphi\rangle + b\langle\psi|\xi\rangle \quad \text{あるいは} \quad \langle\psi|(|\varphi\rangle + b|\xi\rangle) = a\langle\psi|\varphi\rangle + b\langle\psi|\xi\rangle \quad (4.1)$$

(2) **共役対称性**——任意の  $|\psi\rangle, |\xi\rangle \in \mathcal{H}$  に対し,  $\langle\psi|\xi\rangle = \langle\xi|\psi\rangle^*$ .

(3) **正定値性**——任意の  $|\psi\rangle \in \mathcal{H}$  に対し,  $\langle\psi|\psi\rangle \geq 0$  であり, さらに  $\langle\psi|\psi\rangle = 0$  ならば  $|\psi\rangle = 0$ .

と書ける. さらに

(1) **左反線形性**——任意の  $|\psi\rangle, |\varphi\rangle, |\xi\rangle \in \mathcal{H}$  および任意の複素数  $a, b$  に対し,

$$\langle a\psi + b\varphi|\xi\rangle = a^*\langle\psi|\xi\rangle + b^*\langle\varphi|\xi\rangle \quad \text{あるいは} \quad (\langle a\psi| + \langle b\varphi|)|\xi\rangle = a^*\langle\psi|\xi\rangle + b^*\langle\varphi|\xi\rangle$$

が成り立つことを確認するのも容易である.

内積に似た記号で, ブラとケットを入れ替えたもの

$$|\psi\rangle\langle\xi| := \begin{pmatrix} a_1 \\ \vdots \\ a_N \end{pmatrix} (b_1^* \quad \cdots \quad b_N^*) = \begin{pmatrix} a_1 b_1^* & \cdots & a_1 b_N^* \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ a_N b_1^* & \cdots & a_N b_N^* \end{pmatrix}$$

も定義される. 内積  $\langle\psi|\xi\rangle$  とちがって  $|\psi\rangle\langle\xi|$  の意味はわかりづらいが, これはケットを別のケットにうつす写像

$$(|\psi\rangle\langle\xi|)|\varphi\rangle = \underbrace{\langle\xi|\varphi\rangle}_{\text{複素数}} |\psi\rangle \quad (4.2)$$

16) 一般のヒルベルト空間については, その<sup>そうつい</sup>双対空間の元として定義される.

と解釈される．これが線形写像であることは，ケット  $|\varphi\rangle, |\varphi'\rangle$  および複素数  $a, b$  を用いて

$$\begin{aligned} (|\psi\rangle\langle\xi|)(a|\varphi\rangle + b|\varphi'\rangle) &= \langle\xi|a\varphi + b\varphi'\rangle|\psi\rangle \\ &= (a\langle\xi|\varphi\rangle + b\langle\xi|\varphi'\rangle)|\psi\rangle \\ &= a\langle\xi|\varphi\rangle|\psi\rangle + b\langle\xi|\varphi'\rangle|\psi\rangle \\ &= a(|\psi\rangle\langle\xi|)|\varphi\rangle + b(|\psi\rangle\langle\xi|)|\varphi'\rangle \end{aligned}$$

と示される．なお，2つ目の等号で内積の右線形性（式 (4.1)）を使った．内積に右線形性ではなく左線形性を採用した場合，これが線形写像にならない．

## 4.2 ユニタリ行列とエルミート行列

### 4.2.1 エルミート行列

ヒルベルト空間  $\mathcal{H} = \mathbb{C}^N$  の任意のベクトル  $|\psi\rangle, |\xi\rangle$  に対して，

$$\langle\psi|A\xi\rangle = \langle A^\dagger\psi|\xi\rangle \quad (4.3)$$

を満たす  $N \times N$  行列  $A^\dagger$  を， $A$  の**エルミート共役** (Hermitian adjoint) という． $A = A^\dagger$  である行列を，**エルミート行列** (Hermitian matrix) という．

$A$  のエルミート共役は， $A^\dagger = {}^t A^*$ ，すなわち  $A$  を転置して複素共役をとった行列である．なぜなら，行列  $A$  の  $(i, j)$ -成分  $a_{ij}$  は??で定義される基底  $|e_i\rangle = {}^t(0 \ \cdots \ 1 \ \cdots \ 0)$  を用いて  $a_{ij} = \langle e_i|Ae_j\rangle$  と書けるが，式 (4.3) を使うと

$$a_{ij} = \langle e_i|Ae_j\rangle = \langle A^\dagger e_i|e_j\rangle = \langle e_j|A^\dagger e_i\rangle^* = (a_{ji}^\dagger)^*$$

(ここで  $a_{ji}^\dagger$  は  $A^\dagger$  の  $(j, i)$ -成分) であるからである．

任意の行列  $A$  に対してエルミート共役  $A^\dagger$  が定義できる 行列  $A^\dagger$  は次のように定義できる．まず  $|\psi\rangle$  を固定したとき，任意の  $|\xi\rangle$  に対して

$$\langle\psi|A\xi\rangle = \langle\eta_\psi|\xi\rangle$$

となる  $\mathcal{H}$  のベクトル  $\eta_\psi$  が

$$\langle\eta_\psi| := \langle\psi|A \quad (\text{行列としての積})$$

で定義できる．そこで  $\mathcal{H}$  から  $\mathcal{H}$  自身への写像  $f$  を  $f(\psi) = \eta_\psi$  で定義すれば，任意の  $|\psi\rangle, |\xi\rangle$  に対して

$$\langle\psi|\xi\rangle = \langle f(\psi)|\xi\rangle$$

が成り立つ。  $f$  が線形であること、つまり  $\eta_{a\psi+b\psi'} = a\eta_\psi + b\eta_{\psi'}$  が成り立つことは、  $\langle \eta_\psi |$  の定義から明らかである。 よって  $f$  はある行列  $A^\dagger$  を使って  $|f(\psi)\rangle = A^\dagger|\psi\rangle$  と書ける。 これがエルミート共役  $A^\dagger$  の定義である<sup>17)</sup>。

**エルミート行列の必要十分条件**  $A$  がエルミート行列であることの必要十分条件は、  $\mathcal{H}$  のすべてのベクトル  $|\psi\rangle$  に対して  $\langle \psi | A\psi \rangle$  が実数となることである。

**必要性**  $A$  がエルミートであるとする。 このとき

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

であるから  $\langle \psi | A\psi \rangle$  は実数である。

**十分性**

$$\langle A\psi | \psi \rangle \stackrel{\text{実数}}{=} \langle A\psi | \psi \rangle^* \stackrel{\text{内積}}{=} \langle \psi | A\psi \rangle \stackrel{\text{エルミート共役}}{=} \langle A^\dagger \psi | \psi \rangle$$

である。 よって式 (3.4) より  $A = A^\dagger$

**エルミート行列の固有値はすべて実数** なぜなら、  $A$  の規格化された固有ベクトルを  $|\varphi\rangle$  としたとき、つまり

$$A|\varphi\rangle = \lambda|\varphi\rangle, \quad \langle \varphi | \varphi \rangle = 1$$

であるとき、  $\langle \varphi | A\varphi \rangle = \langle \varphi | \lambda\varphi \rangle = \lambda\langle \varphi | \varphi \rangle = \lambda$  であるから、 上で議論したことにより固有値  $\lambda = \langle \varphi | A\varphi \rangle$  は実数である。

**エルミート行列の相異なる固有値に属する固有ベクトルは直交する** エルミート行列  $A$  について、固有値  $\lambda$  に属する固有ベクトルを  $|\varphi_\lambda\rangle$ 、固有値  $\mu$  の固有ベクトルを  $|\varphi_\mu\rangle$  とする。 このとき、  $\lambda \neq \mu$  であれば、  $|\varphi_\lambda\rangle$  と  $|\varphi_\mu\rangle$  は直交する。 なぜなら、

$$\lambda\langle \varphi_\lambda | \varphi_\mu \rangle = \langle \lambda^* \varphi_\lambda | \varphi_\mu \rangle = \langle A^\dagger \varphi_\lambda | \varphi_\mu \rangle = \langle \varphi_\lambda | A\varphi_\mu \rangle = \langle \varphi_\lambda | \mu\varphi_\mu \rangle = \mu\langle \varphi_\lambda | \varphi_\mu \rangle$$

なので  $(\lambda - \mu)\langle \varphi_\lambda | \varphi_\mu \rangle = 0$ 。 したがって、  $\lambda \neq \mu$  なら  $\langle \varphi_\lambda | \varphi_\mu \rangle = 0$  である。

この事実から、 次のことがいえる。 エルミート行列の固有値を  $\lambda_1, \dots, \lambda_n$  とし、固有値  $\lambda_i$  に属する独立な固有ベクトルを  $|\varphi_{\lambda_i,1}\rangle, |\varphi_{\lambda_i,2}\rangle, \dots, |\varphi_{\lambda_i,n_i}\rangle$  とおく。 このとき、固有ベクトルの組  $(|\varphi_{\lambda_i,k}\rangle)_{1 \leq i \leq n, 1 \leq k \leq n_i}$  はすべて互いに直交するようにとれる：

$$\langle \varphi_{\lambda_i,k} | \varphi_{\lambda_j,l} \rangle = \delta_{ij} \delta_{kl} \quad (\delta \text{ はクロネッカーのデルタ})$$

具体的な手順は次のとおり。 まず異なる固有値に属する固有ベクトルは直交するので、  $\delta_{ij}$  は自動的に満たされる。 したがって同じ固有値に属するベクトル  $|\varphi_{\lambda_i,1}\rangle, |\varphi_{\lambda_i,2}\rangle, \dots, |\varphi_{\lambda_i,n_i}\rangle$  を直交化すればよい（これにより  $\delta_{kl}$  が満たされる）。 これは **2.2.4 節** で扱ったグラム – シュミットの方法で得ることができる。 このようにして得られ

17) 一般の線形演算子  $\hat{A}$  に対するエルミート共役演算子  $\hat{A}^\dagger$  も、同じ論法によって定義できる。 ただし、行列の場合と違って定義域の問題があるために、  $\langle \eta_\psi |$  の定義が若干面倒になる。



た固有ベクトルの各々を規格化すれば,  $(|\varphi_{\lambda_i, k}\rangle)_{1 \leq i \leq n, 1 \leq k \leq n_i}$  が  $\mathcal{H}$  の正規直交系 (実は完全である) になる.

#### 4.2.2 ユニタリ行列

3.2 節では, 内積空間の同型写像について見た. ヒルベルト空間における同型写像に相当するのがユニタリ行列である.

$N \times N$  行列  $U$  が, ヒルベルト空間  $\mathcal{H} = \mathbb{C}^N$  から自身への写像<sup>18)</sup>として全単射であり, かつ  $\mathbb{C}^N$  の内積を保つ, つまり

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

がすべての  $|\psi\rangle, |\xi\rangle$  に対して成り立つとき,  $U$  を**ユニタリ行列** (unitary matrix) と呼ぶ.

ユニタリ行列  $U$  の逆行列は, エルミート共役  $U^\dagger$  である. なぜなら, ユニタリ行列が内積を保つことから

$$\langle \psi | \xi \rangle = \langle U\psi | U\xi \rangle = \langle U^\dagger U\psi | \xi \rangle$$

とでき, 式 (3.3) より  $U^\dagger U = I$  (単位行列) であるから  $U^\dagger = U^{-1}$  である<sup>19)</sup>.  $U^\dagger = U^{-1}$  のほ  
うをユニタリ行列の定義とすることも多い.

**ユニタリ行列の各列は正規直交基底** 行列  $U$  の各列を  $|\varphi_1\rangle, \dots, |\varphi_N\rangle$  とする. このとき

$$U^\dagger U = \begin{pmatrix} \langle \varphi_1 | \\ \vdots \\ \langle \varphi_N | \end{pmatrix} \begin{pmatrix} |\varphi_1\rangle & \cdots & |\varphi_N\rangle \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \langle \varphi_1 | \varphi_1 \rangle & \langle \varphi_1 | \varphi_2 \rangle & \cdots & \langle \varphi_1 | \varphi_N \rangle \\ \langle \varphi_2 | \varphi_1 \rangle & \langle \varphi_2 | \varphi_2 \rangle & \cdots & \langle \varphi_2 | \varphi_N \rangle \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \langle \varphi_N | \varphi_1 \rangle & \langle \varphi_N | \varphi_2 \rangle & \cdots & \langle \varphi_N | \varphi_N \rangle \end{pmatrix}$$

であることを使えば,  $U$  がユニタリ行列 ( $U^\dagger U = I$ ) であることと,  $|\varphi_1\rangle, \dots, |\varphi_N\rangle$  が正規直交系である ( $\langle \varphi_i | \varphi_j \rangle = \delta_{ij}$ ) ことは同値であるとわかる. また,

$$UU^\dagger = \begin{pmatrix} |\varphi_1\rangle & \cdots & |\varphi_N\rangle \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \langle \varphi_1 | \\ \vdots \\ \langle \varphi_N | \end{pmatrix} = \sum_{i=1}^N |\varphi_i\rangle \langle \varphi_i|$$

であることを使えば,  $U$  がユニタリ行列であること ( $UU^\dagger = I$ ) と,  $\sum_i |\varphi_i\rangle \langle \varphi_i| = I$  であること (4.3.1 節で扱う完全性) は同値であることがわかる.

18) 一般のユニタリ演算子は, ヒルベルト空間  $\mathcal{H}$  から  $\mathcal{H}$  自身への演算子である必要はなく,  $\mathcal{H}$  から別のヒルベルト空間  $\mathcal{K}$  への演算子でよい.

19) ヒルベルト空間  $\mathcal{H}$  が無限次元の場合, 「 $\hat{U}^\dagger \hat{U} = \hat{I}$  なら  $\hat{U}^\dagger = \hat{U}^{-1}$ 」は成り立たないが, それでも  $\hat{U}^\dagger = \hat{U}^{-1}$  である.

## 4.3 射影演算子

### 4.3.1 正規直交系の完全性

2.2.4 節で扱った正規直交基底を、ブラケットのことはを使って表現することができる。ヒルベルト空間  $\mathcal{H} = \mathbb{C}^N$  の正規直交系  $(|\varphi_i\rangle)_i$  が、 $\mathcal{H}$  の任意のベクトル  $|\psi\rangle$  を

$$|\psi\rangle = \sum_{i=1}^N c_i |\varphi_i\rangle \quad (c_1, \dots, c_N \text{ は複素数}) \quad (4.4)$$

と表せるとき、 $(|\varphi_i\rangle)_i$  は**完全** (complete) であるという。有限次元では、 $(|\varphi_i\rangle)_i$  が完全である（したがって完全正規直交系である）ことは、 $(|\varphi_i\rangle)_i$  が正規直交基底（2.2.4 節）であることとまったく同じことである。

正規直交系  $(|\varphi_i\rangle)_i$  が完全である必要十分条件は、

$$\sum_{i=1}^N |\varphi_i\rangle \langle \varphi_i| = \hat{1} \quad (\text{単位行列}) \quad (4.5)$$

と書けることである。このことは次のように証明できる。

**必要**  $(|\varphi_i\rangle)_i$  が完全であれば、 $\mathcal{H}$  のすべてのベクトル  $|\psi\rangle$  は式 (4.4) の形で展開できる。このとき、 $|\varphi_i\rangle \langle \varphi_i|$  の定義（式 (4.2)）および  $(|\varphi_i\rangle)_i$  の正規直交性（式 (2.18)）、内積の線形性から

$$\left( \sum_{i=1}^N |\varphi_i\rangle \langle \varphi_i| \right) |\psi\rangle = \sum_i \langle \varphi_i | \psi \rangle |\varphi_i\rangle = \sum_{i,j} \underbrace{\langle \varphi_i | c_j \varphi_j \rangle}_{c_j \langle \varphi_i | \varphi_j \rangle = c_j \delta_{ij}} |\varphi_i\rangle = \sum_i c_i |\varphi_i\rangle = |\psi\rangle$$

がすべての  $|\psi\rangle$  について成り立つから、 $\sum_{i=1}^N |\varphi_i\rangle \langle \varphi_i| = \hat{1}$  である。

**十分**  $\sum_{i=1}^N |\varphi_i\rangle \langle \varphi_i| = \hat{1}$  であれば、任意の  $|\psi\rangle \in \mathcal{H}$  は

$$|\psi\rangle = \left( \sum_{i=1}^N |\varphi_i\rangle \langle \varphi_i| \right) |\psi\rangle = \sum_{i=1}^N \underbrace{\langle \varphi_i | \psi \rangle}_{\text{複素数 } c_i} |\varphi_i\rangle$$

と式 (4.4) の形であらわされる。 □

### 4.3.2 射影演算子の定義

ヒルベルト空間  $\mathcal{H} = \mathbb{C}^N$  の正規直交系（完全とは限らない） $(|\varphi_i\rangle)_i$  を用いて

$$\hat{P} = \sum_i |\varphi_i\rangle \langle \varphi_i|$$

と書ける演算子  $\hat{P}$  を、 $(|\varphi_i\rangle)_i$  が張る固有空間への **射影演算子** (projection operator) という。

射影演算子は次のように理解できる。ヒルベルト空間  $\mathcal{H}$  のベクトルが正規直交基底によって  $|\psi\rangle = c_1|\varphi_1\rangle + \dots + c_N|\varphi_N\rangle$  と書けたとする。このとき、正規直交系  $|\varphi_1\rangle, \dots, |\varphi_N\rangle$  ( $n \leq N$ ) が張る空間への  $|\psi\rangle$  の射影は

$$\begin{aligned}\hat{P}|\psi\rangle &= (|\varphi_1\rangle\langle\varphi_1| + \dots + |\varphi_n\rangle\langle\varphi_n|)(c_1|\varphi_1\rangle + \dots + c_n|\varphi_n\rangle + \dots + c_N|\varphi_N\rangle) \\ &= c_1|\varphi_1\rangle + \dots + c_n|\varphi_n\rangle\end{aligned}$$

と書ける。つまり、 $|\varphi_1\rangle, \dots, |\varphi_n\rangle$  の空間に映る情報のみを残して、残りの情報  $c_{n+1}|\varphi_{n+1}\rangle + \dots + c_N|\varphi_N\rangle$  を消しているのである。

卑近な例では、3次元空間における横方向と高さ方向の情報のみを残し、奥行きの情報を消した射影 ( $N=3, n=2$ ) が、いわゆる写真である。なお、人間の眼球が受け取る情報は写真と同じく2次元の射影である。人間が3次元空間を認識できるのは、脳が2次元の視覚情報から3次元空間を再構成しているからである。このような再構成は経験則によっているので、“常識的でない”形状をした物体を人間は正しく認識することができない。これを利用して脳をだましているのがトリックアートである。

### 4.3.3 スペクトル分解

量子力学の教科書に載っているように、自己共役演算子の固有関数系はヒルベルト空間の完全系をなす<sup>20)</sup>。一般のヒルベルト空間についてこれを示すのは非常に面倒であるが、空間が有限次元の場合、これは単なるエルミート行列のユニタリ行列による対角化に帰着される。このことを確かめてみよう。

線形代数でよく知られているように、 $N \times N$  エルミート行列  $A$  は、あるユニタリ行列  $U$

---

20) この定理が成り立つためには、エルミート演算子という条件では不十分であり、より制限が強い「自己共役演算子」である必要である。ただし、有限次元のエルミート演算子は自動的に自己共役になるので、本稿では気にしなくてよい。

を用いて対角化できる：

$$U^\dagger A U = \begin{pmatrix} \lambda_1 & & & & \\ & \ddots & & & \\ & & \lambda_1 & & \\ & & & \ddots & \\ & & & & \lambda_n \\ & & & & & \ddots \\ & & & & & & \lambda_n \end{pmatrix} \quad (4.6)$$

ここで、 $\lambda_1, \dots, \lambda_n$  は  $A$  の相異なる固有値である。このとき、ユニタリ行列  $U$  の各列が  $A$  の固有ベクトルであり、これらは  $\mathbb{C}^N$  の正規直交基底になっていることもよく知られる事実である<sup>21)</sup>。これらの各列を  $|\varphi_i\rangle$  ( $1 \leq i \leq N$ ) と書くことにしよう。

固有値  $\lambda_i$  の固有空間を張る正規直交系を  $|\varphi_{\lambda_i,1}\rangle, \dots, |\varphi_{\lambda_i,m_i}\rangle$  とする。このとき、 $\lambda_i$  の固有空間への射影演算子  $\hat{P}_{\lambda_i}$  は

$$\hat{P}_{\lambda_i} = \sum_{k=1}^{m_i} |\varphi_{\lambda_i,k}\rangle \langle \varphi_{\lambda_i,k}|$$

と書ける (4.3.2 節)。正規直交系  $(|\varphi_{\lambda_i,k_i}\rangle)_{1 \leq i \leq n, 1 \leq k_i \leq m_i} = (|\varphi_i\rangle)_{1 \leq i \leq N}$  は完全であるから、これらの射影演算子の和は恒等演算子  $\hat{1}$  になる (式 (4.5) の条件)：

$$\hat{1} = \sum_{i=1}^N |\varphi_i\rangle \langle \varphi_i| = \sum_{i=1}^n \sum_{k=1}^{m_i} |\varphi_{\lambda_i,k}\rangle \langle \varphi_{\lambda_i,k}| = \sum_{i=1}^n \hat{P}_{\lambda_i} \quad (4.7)$$

(最後の和  $\sum_{i=1}^N$  は固有値の重複を含む固有ベクトルの和)。

式 (4.6) で対角化された行列を  $A'$  とおく。このとき  $U^\dagger = U^{-1}$  であることを使えば  $A = U A' U^\dagger$  である。ここでユニタリ行列  $U$  が  $A$  の固有ベクトルを使って

$$U = \begin{pmatrix} |\varphi_1\rangle & \dots & |\varphi_N\rangle \end{pmatrix}, \quad U^\dagger = {}^t U^* = \begin{pmatrix} \langle \varphi_1| \\ \vdots \\ \langle \varphi_N| \end{pmatrix}$$

と書けることを思い出せば,

$$A = U A' U^\dagger = \sum_{i=1}^N \lambda_{(i)} |\varphi_i\rangle \langle \varphi_i|$$

と書ける (ただし  $\lambda_{(i)}$  は重複を含めた固有値)。したがって、エルミート行列  $A$  は、固有

---

21)  $U$  の各列  $\mathbf{u}_1, \dots, \mathbf{u}_N$  が  $\mathbb{C}^N$  の基底であることは、 $\mathbb{C}^N$  の次元が  $N$  であること、 $\mathbf{u}_1, \dots, \mathbf{u}_N$  が一次独立であること、および基底の延長定理より従う。

値  $\lambda_i$  に対応する固有空間への射影演算子  $\hat{P}_{\lambda_i}$  を使って

$$A = \sum_{i=1}^n \lambda_i \hat{P}_{\lambda_i} \quad (4.8a)$$

$$= \sum_{i=1}^N \lambda_{(i)} |\varphi_i\rangle \langle \varphi_i| \quad (4.8b)$$

と書ける．ここで式 (4.8a) の  $\lambda_i$  は  $A$  の相異なる固有値であり，式 (4.8b) の  $\lambda_{(i)}$  は重複を含めた  $N$  個の固有値である．式 (4.8a) を**スペクトル分解**，式 (4.8b) を**固有値分解**という．

## §5 量子力学の公理

### 5.1 純粋状態の量子力学

1 粒子の量子力学についてここでは考えよう。

#### 5.1.1 量子力学的状態

シュレーディンガー方程式の解  $\psi$  を、全空間での存在確率が 1 になるように規格化した  $\tilde{\psi}$  が量子状態をあらわすのであった。また、物理的に観測できるのは  $\tilde{\psi}$  の絶対値  $|\tilde{\psi}|$  であり、位相のみが異なる 2 つの状態は区別できないのであった。これに対応する公理は、次のように与えられる。

##### 公理 1.

量子系の状態は、ヒルベルト空間  $\mathcal{H}$  の規格化されたベクトル  $|\psi\rangle$  であらわされる。ただし、実数  $\theta$  によって  $|\psi'\rangle = e^{i\theta}|\psi\rangle$  の関係で結ばれた  $|\psi\rangle, |\psi'\rangle$  (つまり位相のみが異なる 2 つのケット) は同じ状態とみなす。

#### 5.1.2 物理量の観測

物理量  $A$  には対応する自己共役演算子  $\hat{A}$  が存在する。そして、任意の状態  $|\psi\rangle$  は、 $\hat{A}$  の固有関数系  $|\varphi_i\rangle$  を使って

$$|\psi\rangle = \sum_i c_i |\varphi_i\rangle$$

と展開できる (4.3.3 節)。  $|\varphi_i\rangle$  に対応する状態を観測する確率は  $|c_i|^2$  で与えられる。ところが、  $|\varphi_i\rangle$  の固有値  $a_i$  を得る確率が  $|c_i|^2$  とは限らない。なぜなら、この表記では  $|\varphi_i\rangle \neq |\varphi_j\rangle$  でも  $a_i = a_j$  となる可能性があるからである。したがって、オブザーバブルの値として固有値  $a_i$  を観測する確率は、固有値  $a_i$  に属するすべての固有関数  $|\varphi_{a_i,1}\rangle, \dots, |\varphi_{a_i,m_i}\rangle$  を用いて

$$\sum_{k=1}^{m_i} |c_{a_i,k}|^2 = \sum_{k=1}^{m_i} \langle c_{a_i,k} \varphi_{a_i,k} | c_{a_i,k} \varphi_{a_i,k} \rangle = \langle \psi | \hat{P}_{a_i} \psi \rangle$$

と表せるはずである．ここで， $\hat{P}_{a_i}$  は固有値  $a_i$  に対応する固有空間への射影演算子

$$\hat{P}_{a_i} = \sum_{k=1}^{m_i} |\varphi_{a_i,k}\rangle \langle \varphi_{a_i,k}|$$

である．

### 公理 2.

すべてのオブザーバブルには，それに対応するエルミート行列  $A$  が存在し，観測値は  $A$  の固有値のどれかである．固有値  $a$  を観測する確率は， $a$  に対応する固有空間への射影演算子  $\hat{P}_a$  を使って

$$\langle \psi | \hat{P}_a \psi \rangle \quad (5.1)$$

と表される．

### 5.1.3 基底測定

任意のオブザーバブル  $A$  には対応するエルミート行列  $\hat{A}$  が存在するというのが公理 2 の主張である．このとき， $\hat{A}$  の固有ベクトル  $|\varphi_1\rangle, \dots, |\varphi_N\rangle$  はヒルベルト空間  $\mathcal{H}$  の正規直交基底をなす．それでは逆に， $\mathcal{H}$  の任意の正規直交基底  $|\varphi_1\rangle, \dots, |\varphi_N\rangle$  に対して，それらを固有ベクトルにもつオブザーバブル  $A$  は存在するだろうか？ つまり，

任意のエルミート行列  $\hat{A}$  には対応するオブザーバブル  $A$  が存在するか？

量子力学の公理はここまで要求しない．すべてのエルミート行列に対応するオブザーバブルが存在するわけではない．しかし，本稿ではスピン系のみを扱うので，すべてのエルミート行列  $\hat{A}$  に対応する“スピンの向き”があると仮定することにする．

### 5.1.4 状態の時間発展

時間に依存するシュレーディンガー方程式を形式的に解くことで，状態の時間発展が記述される：

$$\psi(t) = \exp\left(-i\frac{\hat{H}}{\hbar}(t-t_0)\right)\psi(t=t_0)$$

シュレーディンガー方程式を解くとは，実のところ  $\exp(-i\hat{H}(t-t_0)/\hbar)$  の形式を求めることに対応するのである．ところで，ハミルトニアンが自己共役 ( $\hat{H} = \hat{H}^\dagger$ ) であることを使うと，

$$\exp\left(-i\frac{\hat{H}}{\hbar}(t-t_0)\right)\left[\exp\left(-i\frac{\hat{H}}{\hbar}(t-t_0)\right)\right]^\dagger = \left[\exp\left(-i\frac{\hat{H}}{\hbar}(t-t_0)\right)\right]^\dagger \exp\left(-i\frac{\hat{H}}{\hbar}(t-t_0)\right) = \hat{1}$$

が成り立つ。したがって  $\exp(-i\hat{H}(t-t_0)/\hbar)$  はユニタリであるといえる。これに対応する公理は次のように与えられる。

### 公理 3.

量子系の時間発展はユニタリ行列  $U$  を用いて

$$|\psi'\rangle = U|\psi\rangle \quad (5.2)$$

と書ける。  $U$  には逆行列  $U^{-1} = U^\dagger$  が存在するので、時間発展は可逆である。

量子系の状態を変えるのは時間発展だけではなく、観測者が量子系に操作を加えることができる。そこでそのような操作も（公理 4 で述べる測定を除いて）ユニタリ的であるでしょう。

## 5.1.5 波束の収縮

物理の文脈で「系の測定によって情報を得る」と語るのは容易であるが、測定を行えばそれによって系が変化してしまう。例えばコップに入った水の温度を測定したいとする。そのためにコップに温度計を挿入すると、目盛りが上昇して温度を示す過程で、水分子の熱運動が温度計に奪われている<sup>22)</sup>。温度の測定は水の状態に影響を与えるのである。

古典力学におけるこの影響は無限小にすることができる。温度計による系への影響を抑えたければ、温度計を小さくすればよい。しかし、量子力学では測定による系への影響が本質的に避けられない。

状態  $|\psi\rangle$  に対してオブザーバブル  $A$  を測定することを考える。このとき得られる測定値は次のように求められる。まず  $|\psi\rangle$  をオブザーバブルに対応する演算子  $\hat{A}$  の固有関数系で展開する：

$$|\psi\rangle = c_1|\varphi_1\rangle + \cdots + c_i|\varphi_i\rangle + \cdots + c_N|\varphi_N\rangle$$

ここで、 $|\varphi_i\rangle$  は  $\hat{A}$  の固有値  $a_i$  に属する固有ベクトルである。話を簡単にするために、固有空間には縮退がない（つまり、 $i \neq j$  なら  $a_i \neq a_j$ ）とする。

公理 2 によれば、この測定によって、固有値  $a_1, \dots, a_N$  のうちいずれかひとつが得られる。どの固有値が得られるかは確率的にしか予言できない。もう一度同じ  $|\psi\rangle$  を用意して  $A$  の測定を行えば、別の固有値が得られる可能性もある。いずれの測定でも固有値  $a_i$  を得る確率は（縮退がなければ） $|c_i|^2$  である。

22) 具体的には、例えば水銀温度計の場合、温度計に含まれる水銀がコップの水から熱を受け取って膨張することで、目盛りを指し示す。電気抵抗温度計であれば、温度計内の金属あるいは半導体部品が熱を受け取り、電気抵抗が変化することによって測定値を得る。



公理 2 における確率とは、測定ごとに状態  $|\psi\rangle$  を用意し直すことを前提としている。もしはじめに  $|\psi\rangle$  の状態にある系に対して  $A$  の測定を行い、固有値  $a_i$  が得られたとする。そのまま同じ系に対して  $A$  を測定すれば、必ず（確率 1 で）同じ固有値  $a_i$  が得られる。確率的にしか予言できなかったはずの測定値が、最初の測定によって確定してしまうのである。数式で表すと、状態  $|\psi\rangle$  が測定によって

$$|\psi\rangle \rightarrow |\varphi_i\rangle$$

と変化する。これが**波束の収縮**である。

#### 公理 4.

状態  $|\psi\rangle$  に対してオブザーバブル  $A$  の測定を行うと、 $|\psi\rangle$  は  $\hat{A}$  の固有状態のうちのひとつに変化する。これは公理 3 における時間発展とは異なり、非ユニタリで不可逆的な変化である。

固有空間に縮退がある場合まで含めると、波束の収縮とは、固有値  $a$  に対応する固有空間への射影演算子  $\hat{P}_a$  (4.3.2 節) を用いて

$$|\psi\rangle \rightarrow \frac{1}{\|\hat{P}_a|\psi\rangle\|} \hat{P}_a|\psi\rangle$$

と書ける。ただし  $1/\|\hat{P}_a|\psi\rangle\|$  は単なる規格化のための定数である。

## 5.2 テンソル積

### 5.2.1 2 粒子系のシュレーディンガー方程式

独立な 2 粒子の（時間に依存しない）シュレーディンガー方程式

$$\left[ -\frac{\hbar^2}{2m_1} \nabla_1^2 - \frac{\hbar^2}{2m_2} \nabla_2^2 + V_1(\mathbf{r}_1) + V_2(\mathbf{r}_2) \right] \Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = E \Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \quad (5.3)$$

を考えてみよう。式 (5.3) は次のように変数分離できる：

$$\begin{cases} \left[ -\frac{\hbar^2}{2m_1} \nabla_1^2 + V_1(\mathbf{r}_1) \right] \psi(\mathbf{r}_1) = E_1 \psi(\mathbf{r}_1) \\ \left[ -\frac{\hbar^2}{2m_2} \nabla_2^2 + V_2(\mathbf{r}_2) \right] \xi(\mathbf{r}_2) = E_2 \xi(\mathbf{r}_2) \end{cases}, \quad \text{where } \begin{cases} \Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \psi(\mathbf{r}_1) \xi(\mathbf{r}_2), \\ E = E_1 + E_2 \end{cases} \quad (5.4)$$

なぜなら、式 (5.3) の第 1 項  $\nabla_1^2$  と第 3 項  $V_1(\mathbf{r}_1)$  は  $\mathbf{r}_2$  のみの関数である  $\xi(\mathbf{r}_2)$  には作用せず、同じように第 2 項  $\nabla_2^2$  と第 4 項  $V_2(\mathbf{r}_2)$  は  $\mathbf{r}_1$  のみの関数  $\psi(\mathbf{r}_1)$  を“通り抜ける”である。

そして、式 (5.3) の一般解は、式 (5.4) の（任意定数を消去した）解  $\psi_i(\mathbf{r}_1), \xi_i(\mathbf{r}_2)$ <sup>23)</sup>を用いて

$$\Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \sum_i c_i \psi_i(\mathbf{r}_1) \xi_i(\mathbf{r}_2), \quad (c_i \text{ は複素数}) \quad (5.5)$$

と与えられる．ここで注意しなければならないのは、式 (5.5) が式 (5.4) の解  $\psi(\mathbf{r}_1), \xi(\mathbf{r}_2)$  を用いて  $\Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \psi(\mathbf{r}_1)\xi(\mathbf{r}_2)$  と書けるとは限らないことである．

### 5.2.2 テンソル積の定義

複合状態  $\psi(\mathbf{r}_1)\xi(\mathbf{r}_2)$  のうち  $\psi$  にのみ作用し、 $\xi$  を“通り抜ける”演算子は、微分のことばでは  $\mathbf{r}_1$  微分のみを含む演算子（たとえば  $\hbar^2 \nabla_1^2 / 2m$ ）として表現できる．では、線形代数のことばで複合状態  $|\psi\rangle|\xi\rangle$  の片方を“通り抜ける”演算子はどのように定義できるだろうか？ それを実現するための数学的な道具がテンソル積である．一般のヒルベルト空間におけるベクトルのテンソル積を定義するのは非常に面倒であるが、有限次元のヒルベルト空間では容易に導入できる．

例として有限次元ヒルベルト空間  $\mathcal{H} = \mathbb{C}^2$  を考えよう．状態  $\boldsymbol{\psi} = {}^t(a \ b)$  にある粒子 A と、状態  $\boldsymbol{\xi} = {}^t(\alpha \ \beta)$  にある粒子 B の複合系の状態を、

$$\boldsymbol{\psi} \otimes \boldsymbol{\xi} = \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix} := \begin{pmatrix} a \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix} \\ b \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a\alpha \\ a\beta \\ b\alpha \\ b\beta \end{pmatrix} \quad (5.6)$$

で定義する．式 (5.6) を  $(\boldsymbol{\psi}, \boldsymbol{\xi})$  の **テンソル積** (tensor product) という．ここでは  $\boldsymbol{\psi}, \boldsymbol{\xi}$  は両方とも  $\mathbb{C}^2$  のベクトルとしたが、2 つのベクトルが属するヒルベルト空間は異なっている（たとえば  $\boldsymbol{\psi} \in \mathbb{C}^2$ ,  $\boldsymbol{\xi} \in \mathbb{C}^3$  でも）よい．

同様に、行列 A, B のテンソル積を

$$A \otimes B = \begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} \alpha & \beta \\ \gamma & \delta \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a \begin{pmatrix} \alpha & \beta \\ \gamma & \delta \end{pmatrix} & b \begin{pmatrix} \alpha & \beta \\ \gamma & \delta \end{pmatrix} \\ c \begin{pmatrix} \alpha & \beta \\ \gamma & \delta \end{pmatrix} & d \begin{pmatrix} \alpha & \beta \\ \gamma & \delta \end{pmatrix} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a\alpha & a\beta & b\alpha & b\beta \\ a\gamma & a\delta & b\gamma & b\delta \\ c\alpha & c\beta & d\alpha & d\beta \\ c\gamma & c\delta & d\gamma & d\delta \end{pmatrix} \quad (5.7)$$

で定義する．

テンソル積で重要なのは、以下の等式が成立することである：

$$(A \otimes B)(\boldsymbol{\psi} \otimes \boldsymbol{\xi}) = (A\boldsymbol{\psi}) \otimes (B\boldsymbol{\xi}) \quad (5.8)$$

23)  $i$  は式 (5.4) における定数  $E_1$  に対応する添字である．

つまり、行列  $A$  は左側の状態  $\psi$ 、行列  $B$  は右側の状態  $\xi$  のみに作用する。したがって、複合状態  $\psi \otimes \xi$  のうち  $\psi$  のみに作用する演算子は  $A \otimes I$  ( $I$  は単位行列) と書ける：

$$(A \otimes I)(\psi \otimes \xi) = (A\psi) \otimes \xi$$

**双線形性** テンソル積の重要な性質のひとつに、双線形性があげられる<sup>24)</sup>。すなわち、任意のベクトル  $\psi, \psi' \in \mathcal{H}_1$ ,  $\xi, \xi' \in \mathcal{H}_2$ 、および複素数  $a, b$  に対して、

$$\psi \otimes (a\xi + b\xi') = a(\psi \otimes \xi) + b(\psi \otimes \xi') \quad (5.9a)$$

$$(a\psi + b\psi') \otimes \xi = a(\psi \otimes \xi) + b(\psi' \otimes \xi) \quad (5.9b)$$

が成り立つ。これはテンソル積の定義 (式 (5.6)) から直ちに従う。

**3つ以上のテンソル積** 3つのベクトルのテンソル積は、

$$\psi \otimes \xi \otimes \eta := \psi \otimes (\xi \otimes \eta)$$

と定義する。  $\psi \otimes (\xi \otimes \eta) = (\psi \otimes \xi) \otimes \eta$  であることを示すのも容易である。

4つ以上のベクトルのテンソル積も、同様にして帰納的に定義される。

**テンソル積の記法** テンソル積の記号  $\otimes$  は、ベクトルの和の記号  $+$  よりも先に計算する。つまり、

$$\psi \otimes \xi + \psi \otimes \eta = (\psi \otimes \xi) + (\psi \otimes \eta)$$

である。また、ブラ・ケット記号を用いるときは、記号  $\otimes$  を省略して  $|\psi\rangle \otimes |\xi\rangle = |\psi\rangle|\xi\rangle$  と書くこともある。さらに、それぞれのベクトルに添え字を付して  $|\psi\rangle_A |\xi\rangle_B$  と書くこともある。テンソル積では一般に  $|\psi\rangle|\xi\rangle \neq |\xi\rangle|\psi\rangle$  であるが、添え字をつけたときは、 $|\psi\rangle_A |\xi\rangle_B = |\xi\rangle_B |\psi\rangle_A$  と扱う。

### 5.2.3 テンソル積の空間

ヒルベルト空間  $\mathcal{H}_1 = \mathbb{C}^M$ ,  $\mathcal{H}_2 = \mathbb{C}^N$  のそれぞれに属するベクトル  $\psi, \xi$  のテンソル積  $\psi \otimes \xi$  の線形結合の全体はヒルベルト空間になる。実際、式 (5.6) の類推から、 $\mathbb{C}^{M \times N}$  であるとわかる。そこで、この空間を  $\mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2$  と書き、( $\mathcal{H}_1$  と  $\mathcal{H}_2$  の) **テンソル積** (tensor product) という。

もうすこし丁寧に説明しよう。  $\mathcal{H}_1$  を  $M$  次元ヒルベルト空間、  $\mathcal{H}_2$  を  $N$  次元ヒルベルト空間とする。  $\mathcal{H}_1$  のベクトル  $\psi, \psi'$ 、  $\mathcal{H}_2$  のベクトル  $\xi, \xi'$  について、テンソル積の和  $(\psi \otimes \xi) + (\psi' \otimes \xi)$  とスカラー倍  $c \star (\psi \otimes \xi)$  を、双線形性 (式 (5.9)) が満たされるように定義すると、  $\psi \otimes \xi$  の線形結合の全体  $\mathcal{H}$  はベクトル空間の公理 (2.1.2 節) を満たす (詳細は

24) これを満たすようにテンソル積を定義するのが本来の方法である。

略) ので,  $\mathcal{H}$  はベクトル空間である. ここで,  $\mathcal{H}$  の基底は,  $\mathcal{H}_1$  の基底  $\varphi_1, \dots, \varphi_M$ ,  $\mathcal{H}_2$  の基底  $\varphi'_1, \dots, \varphi'_N$  を使って

$$\begin{aligned} & \varphi_1 \otimes \varphi'_1, \quad \varphi_1 \otimes \varphi'_2, \quad \dots, \quad \varphi_1 \otimes \varphi'_N, \\ & \varphi_2 \otimes \varphi'_1, \quad \varphi_2 \otimes \varphi'_2, \quad \dots, \quad \varphi_2 \otimes \varphi'_M, \\ & \vdots \quad \quad \quad \vdots \quad \quad \quad \ddots \quad \quad \quad \vdots \\ & \varphi_M \otimes \varphi'_1, \quad \varphi_M \otimes \varphi'_2, \quad \dots, \quad \varphi_M \otimes \varphi'_N \end{aligned} \quad (5.10)$$

と書ける. したがって,  $\mathcal{H}$  の次元は  $M \times N$  である. また,  $\mathcal{H}$  上の内積 (2.2.2 節) は

$$\langle \psi \otimes \xi, \psi' \otimes \xi' \rangle_{\mathcal{H}} := \langle \psi, \psi' \rangle_{\mathcal{H}_1} \langle \xi, \xi' \rangle_{\mathcal{H}_2} \quad (5.11)$$

で定義できる<sup>25)</sup> ので,  $\mathcal{H}$  は内積空間である. また  $\mathcal{H}$  は有限次元 ( $M \times N$  次元) 内積空間なので, ノルムに関して完備 (2.3.3 節) である. よって  $\mathcal{H}$  はヒルベルト空間であるといえる.  $\varphi_1, \dots, \varphi_M$  を  $\mathcal{H}_1$  の正規直交基底,  $\varphi'_1, \dots, \varphi'_N$  を  $\mathcal{H}_2$  の正規直交基底とすれば, 式 (5.10) は  $\mathcal{H}$  の正規直交基底になっていることが, 式 (5.11) から直ちにわかる.

**$\psi \otimes \xi$  と書けないテンソル積**  $\psi \otimes \xi$  の全体が  $\mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2$  になるわけではない. なぜなら,  $\psi \otimes \xi$  全体は線形結合について閉じていないために, ベクトル空間にならないからである.

たとえば  $\mathcal{H}_1 = \mathcal{H}_2 = \mathbb{C}^2$  の場合を考えてみよう.  $\mathbb{C}^2$  の基底として ?? をとる. このとき  $\mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2$  の基底は

$$\begin{aligned} \mathbf{e}_1 \otimes \mathbf{e}_1 &= {}^t(1 \ 0 \ 0 \ 0), & \mathbf{e}_1 \otimes \mathbf{e}_2 &= {}^t(0 \ 1 \ 0 \ 0), \\ \mathbf{e}_2 \otimes \mathbf{e}_1 &= {}^t(0 \ 0 \ 1 \ 0), & \mathbf{e}_2 \otimes \mathbf{e}_2 &= {}^t(0 \ 0 \ 0 \ 1) \end{aligned}$$

である. 基底の定義から,

$$\mathbf{v} = \frac{1}{\sqrt{2}} (\mathbf{e}_1 \otimes \mathbf{e}_1 + \mathbf{e}_2 \otimes \mathbf{e}_2) = \frac{1}{\sqrt{2}} {}^t(1 \ 0 \ 0 \ 1)$$

は  $\mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2$  のベクトルである. しかし, これは  $\mathcal{H}_1$  のベクトル  $\mathbf{x} = {}^t(a \ b)$ ,  $\mathcal{H}_2$  のベクトル  $\mathbf{y} = {}^t(c \ d)$  を使って  $\mathbf{v} = \mathbf{x} \otimes \mathbf{y} = {}^t(ac \ ad \ bc \ bd)$  という形で書くことができない. なぜなら,

$$ac = \frac{1}{\sqrt{2}}, \quad ad = 0, \quad bc = 0, \quad bd = \frac{1}{\sqrt{2}}$$

を満たす複素数の組  $a, b, c, d$  は存在しないからである.

はじめテンソル積を  $\mathbf{x} \otimes \mathbf{y}$  の形で定義したのにもかかわらず, その形で書けない  $\mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2$  のベクトル  $\mathbf{v}$  が存在する. 6.2 節では, 2 つの粒子が極めて強い相関を持った **エンタングル状態** を扱うが, その起源がここで見たテンソル積の特性である.

25) これが内積の公理を満たすことは省略するが,  $\mathcal{H}_1 = \mathbb{C}^M$ ,  $\mathcal{H}_2 = \mathbb{C}^N$  としたときに,  $\mathcal{H} = \mathbb{C}^{M \times N}$  の標準内積 (??) と  $\mathcal{H}_1, \mathcal{H}_2$  の標準内積について式 (5.11) が成り立つことは簡単に検証できる.

## §6 エンタングルメントの不思議

### 6.1 スピン 1/2 をもつ粒子の量子力学

はじめに量子力学におけるスピンの取り扱い方について述べる．以下  $\hbar = 1$  とする．スピンの大きさ 1/2 をもつ粒子は，その固有状態としてスピンの  $z$ -成分が 1/2 または  $-1/2$  を持つ状態をとることができる．それぞれの状態を

$$|\uparrow\rangle, |\downarrow\rangle \quad (6.1)$$

と書き， $|\uparrow\rangle$  を「スピン<sup>うえ</sup>上向きの状態， $|\downarrow\rangle$  を「スピン<sup>した</sup>下向きの状態」と呼ぶことにする．一般のスピン状態は，これらの重ね合わせによって

$$|\psi\rangle = a|\uparrow\rangle + b|\downarrow\rangle \quad (6.2)$$

と書ける ( $a, b$  は複素数であり， $|a|^2 + |b|^2 = 1$ )．

スピンの  $i$ -成分 ( $i = x, y, z$ ) に対応する演算子  $\hat{S}^i$  を導入しよう．たとえば式 (6.1) は  $\hat{S}^z$  の固有状態であるから

$$\hat{S}^z|\uparrow\rangle = \frac{1}{2}|\uparrow\rangle, \quad \hat{S}^z|\downarrow\rangle = -\frac{1}{2}|\downarrow\rangle \quad (6.3a)$$

となる． $\hat{S}^x, \hat{S}^y$  の固有状態は，昇降演算子  $\hat{S}^+ := \hat{S}^x + i\hat{S}^y$ ， $\hat{S}^- := \hat{S}^x - i\hat{S}^y$  の作用

$$\hat{S}^+|\uparrow\rangle = 0, \quad \hat{S}^+|\downarrow\rangle = |\uparrow\rangle, \quad \hat{S}^-|\uparrow\rangle = |\downarrow\rangle, \quad \hat{S}^-|\downarrow\rangle = 0$$

を使えば

$$\hat{S}^x(|\uparrow\rangle + |\downarrow\rangle) = \frac{1}{2}(|\uparrow\rangle + |\downarrow\rangle), \quad \hat{S}^x(|\uparrow\rangle - |\downarrow\rangle) = -\frac{1}{2}(|\uparrow\rangle - |\downarrow\rangle), \quad (6.3b)$$

$$\hat{S}^y(|\uparrow\rangle + i|\downarrow\rangle) = \frac{1}{2}(|\uparrow\rangle + i|\downarrow\rangle), \quad \hat{S}^y(|\uparrow\rangle - i|\downarrow\rangle) = -\frac{1}{2}(|\uparrow\rangle - i|\downarrow\rangle), \quad (6.3c)$$

と求められる (ただし  $\hat{S}^x = \frac{1}{2}(\hat{S}^+ + \hat{S}^-)$ ， $\hat{S}^y = \frac{1}{2i}(\hat{S}^+ - \hat{S}^-)$  である)．

これまで議論したことと結び付けよう．式 (6.2) より，スピン状態は 2 次元ヒルベルト空間  $\mathcal{H}$  のベクトルとして扱える．式 (6.1) は  $\mathcal{H}$  の正規直交基底であり，したがって， $\mathcal{H}$  は  $\mathbb{C}^2$  と同型 (3.2 節) であり，

$$|\uparrow\rangle = {}^t(1 \ 0), \quad |\downarrow\rangle = {}^t(0 \ 1)$$

という (同型写像による) 対応により，式 (6.2) はユークリッド空間のベクトル  ${}^t(a \ b)$  と

同一視できる．このとき，式 (6.3) の  $\hat{S}_x, \hat{S}_y, \hat{S}_z$  は，**パウリ行列** (Pauli matrix)

$$\sigma^x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma^y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma^z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \quad (6.4)$$

に  $1/2$  をかけたものと同一視できる．すなわち，線形演算子  $\hat{S}^i$  の (基底  $|\uparrow\rangle, |\downarrow\rangle$  に対する) 表現行列 (3.3 節) は  $\sigma^i/2$  である．

## 6.2 量子エンタングルメント

スピン  $1/2$  を持つ 2 つの粒子 A, B のスピン状態について考えよう．A, B の状態はそれぞれ，正規直交基底  $|\uparrow\rangle, |\downarrow\rangle$  をもつ 2 次元ヒルベルト空間  $\mathcal{H} = \mathbb{C}^2$  のベクトルとして表される．したがって，A, B を合わせた系の状態は，テンソル積 (5.2 節)  $\mathcal{H} \otimes \mathcal{H} = \mathbb{C}^4$  のベクトル

$$\begin{aligned} |\Psi\rangle_{A,B} &= {}^t(a \ b \ c \ d) \\ &= a|\uparrow\rangle_A|\uparrow\rangle_B + b|\uparrow\rangle_A|\downarrow\rangle_B + c|\downarrow\rangle_A|\uparrow\rangle_B + d|\downarrow\rangle_A|\downarrow\rangle_B \\ &\quad (a, b, c, d \text{ は複素数, } |a|^2 + |b|^2 + |c|^2 + |d|^2 = 1) \end{aligned} \quad (6.5)$$

で表される．単純な形で表される状態であるが，非常に興味深い性質を持つ．

### 6.2.1 セパラブル状態とエンタングル状態

式 (6.5) のうち，複素数  $a, b, c, d$  を用いて

$$|\Psi\rangle_{A,B} = \left( a|\uparrow\rangle_A + b|\downarrow\rangle_A \right) \otimes \left( c|\uparrow\rangle_B + d|\downarrow\rangle_B \right) \quad (6.6)$$

という形で書ける状態を**セパラブル状態** (separable state)<sup>26)</sup>，そうでない状態を**エンタングル状態** (entangled state)<sup>27)</sup>という．

**セパラブル状態** 例えば，A と B を合わせた系が

$$\begin{aligned} |\Xi\rangle_{A,B} &= \frac{1}{10} \left( 3|\uparrow\rangle_A|\uparrow\rangle_B - 3\sqrt{3}|\uparrow\rangle_A|\downarrow\rangle_B + 4|\downarrow\rangle_A|\uparrow\rangle_B - 4\sqrt{3}|\downarrow\rangle_A|\downarrow\rangle_B \right) \\ &= \frac{1}{5} \left( 3|\uparrow\rangle_A + 4|\downarrow\rangle_A \right) \otimes \frac{1}{2} \left( |\uparrow\rangle_B - \sqrt{3}|\downarrow\rangle_B \right) \end{aligned} \quad (6.7)$$

という状態にあったとしよう．この状態に対してスピン A の向きを測定すると， $9/25$  の確率で  $|\uparrow\rangle_A$ ， $16/25$  の確率で  $|\downarrow\rangle_A$  に対応する値が得られる．あるいは，スピン B の向きを測定すれば， $|\uparrow\rangle_B$  (確率  $1/4$ )， $|\downarrow\rangle_B$  (確率  $3/4$ ) のいずれか一方が得られる．

26) ヒルベルト空間論における「可分 (separable)」という概念とは無関係である．

27) ‘entangle’ は「からまる」という意味．entanglement を「量子もつれ」と訳すこともある．

いま、式 (6.7) の状態に対して、スピン A の向きを観測したところ、上向き ( $|\uparrow\rangle_A$ ) だったとしよう。波束の収縮（公理 4）によって、式 (6.7) の状態は

$$\begin{aligned} |\Xi'\rangle_{A,B} &= \frac{1}{6} \left( 3|\uparrow\rangle_A |\uparrow\rangle_B - 3\sqrt{3}|\uparrow\rangle_A |\downarrow\rangle_B \right) \\ &= |\uparrow\rangle_A \otimes \frac{1}{2} \left( |\uparrow\rangle_B - \sqrt{3}|\downarrow\rangle_B \right) \end{aligned} \quad (6.7')$$

に変化する。この状態に対してスピン B の向きを測定すると、直接  $|\Xi\rangle$  を測定したときと同じく、確率 1/4 で  $|\uparrow\rangle_B$  が、確率 3/4 で  $|\downarrow\rangle_B$  が得られる。はじめの測定で  $|\downarrow\rangle_B$  を得た場合も同じである。

### エンタングル状態

$$|H\rangle_{A,B} = \frac{1}{3} \left( |\uparrow\rangle_A |\uparrow\rangle_B + 2|\uparrow\rangle_A |\downarrow\rangle_B + 2|\downarrow\rangle_A |\downarrow\rangle_B \right) \quad (6.8)$$

$|H\rangle_{A,B}$  に対してスピン A を測定すれば、確率 5/9 で状態  $|\uparrow\rangle_A$  が、確率 4/9 で状態  $|\downarrow\rangle_A$  が得られる。一方、スピン B を測定すると、確率 1/9 で  $|\uparrow\rangle_B$  を、確率 8/9 で  $|\downarrow\rangle_B$  を得る。

いま、式 (6.8) の状態に対してスピン A を測定し、状態  $|\uparrow\rangle_A$  を得たとする。すると、状態は

$$|H'\rangle_{A,B} = \frac{1}{\sqrt{5}} \left( |\uparrow\rangle_A |\uparrow\rangle_B + 2|\uparrow\rangle_A |\downarrow\rangle_B \right) \quad (6.8')$$

に変化する。ここからさらにスピン B を測定すれば、確率 1/5 で状態  $|\uparrow\rangle_B$ 、確率 4/5 で状態  $|\downarrow\rangle_B$  が得られる。

一方、最初にスピン A を測定したとき、状態  $|\downarrow\rangle_B$  を得たとする。そうすると、式 (6.8) は

$$|H''\rangle_{A,B} = |\downarrow\rangle_A |\downarrow\rangle_B \quad (6.8'')$$

になる。したがって、スピン B を測定すると、必ず下向きの状態が得られる。

## 6.2.2 エンタングル状態の性質

2つのスピン A, B のエンタングル状態

$$|\Psi\rangle_{A,B} = |\uparrow\rangle_A |\downarrow\rangle_B + |\downarrow\rangle_A |\uparrow\rangle_B \quad (6.9)$$

を考えよう。前節での議論によれば、この状態においてはスピン A の値とスピン B の値が必ず異なる。これを次のように考えてみよう。スピン A を Alice が、スピン B を Bob が持っている。2人はスピン A, B が式 (6.9) のエンタングル状態にあることを知っているとする。Alice が自身のスピン A を測定し、状態  $|\uparrow\rangle_A$  を得たとする。続けて Bob がスピン B を測定すれば、必ず状態  $|\downarrow\rangle_B$  が得られる。Alice は Bob の測定結果を予言できるし、そもそも Alice がスピン A の測定結果を Bob に伝えれば、Bob はスピン B を測定する必要がない。このように、エンタングル状態は非常に奇妙なふるまいを示す。



しかし、この状況は本当に“奇妙”なのだろうか。例えば次のような状況を考えてみよう。第三者 Carol がそれぞれ状態  $|\uparrow\rangle, |\downarrow\rangle$  にある 2 つのスピンを用意し、片方 (A とする) を Alice に、もう片方 (B) を Bob に渡す<sup>28)</sup>。ふたりは Carol が  $|\uparrow\rangle$  と  $|\downarrow\rangle$  の 2 つの状態を用意したことを知っているが、自分がどちらをもらったのかは知らない。

この状況下で、Alice がスピン A を測定し、状態  $|\uparrow\rangle$  を得たとする<sup>29)</sup>。その時点で Bob が  $|\downarrow\rangle$  を持っていることを Alice は知ることができる。Alice が状態  $|\downarrow\rangle$  を観測した場合も同様である。それではエンタングル状態というのは、かくもわかりやすい状況を、数学的に難しく表現したものにはすぎないのだろうか。

ところが、前者のエンタングルメントによる状況と、後者の Carol が作った状況は、本質的に異なっている。そのことを確かめるために、Alice と Bob が  $|\uparrow\rangle, |\downarrow\rangle$  とは別の正規直交基底

$$|\leftarrow\rangle := \frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\rangle + |\downarrow\rangle), \quad |\rightarrow\rangle := \frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\rangle - |\downarrow\rangle) \quad (6.10)$$

による測定を行うとしよう。まず、

$$|\uparrow\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\leftarrow\rangle + |\rightarrow\rangle), \quad |\downarrow\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\leftarrow\rangle - |\rightarrow\rangle) \quad (6.10')$$

であることに注意する。したがって式 (6.9) のエンタングル状態は、

$$|\Psi\rangle_{A,B} = |\leftarrow\rangle_A |\leftarrow\rangle_B + |\rightarrow\rangle_A |\rightarrow\rangle_B \quad (6.9')$$

と書き換えられる。

Alice がスピン A に対して、式 (6.10) の基底による測定<sup>おこな</sup>を行ったとする。式 (6.9') のエンタングル状態にあるとき、 $|\leftarrow\rangle_A$  を得る確率と  $|\rightarrow\rangle_A$  を得る確率はそれぞれ 1/2 である。一方、Carol から  $|\uparrow\rangle$  か  $|\downarrow\rangle$  のどちらかを渡されていた場合、式 (6.10') を使えば、いずれの状態でも確率 1/2 で  $|\leftarrow\rangle$  を、確率 1/2 で  $|\rightarrow\rangle$  を観測する。この時点では 2 つの状況に違いはない。

この測定によって Alice が  $|\leftarrow\rangle$  を観測したとしよう。このとき Alice は Bob の測定結果を予言することができるだろうか？ まず、式 (6.9) = 式 (6.9') のエンタングル状態の場合、Alice が  $|\leftarrow\rangle_A$  を観測すれば、Bob のもつ状態は  $|\leftarrow\rangle_B$  に収束する。したがって、Bob がスピン B を測定すれば、必ず状態  $|\leftarrow\rangle_B$  が得ることがわかる。一方、Carol のシチュエーションでは、Alice は自身が  $|\uparrow\rangle$  を持っていたか  $|\downarrow\rangle$  を持っていたか知ることはできない。どちらの状態を測定しても、 $|\leftarrow\rangle$  が得られる可能性があるからである。Bob がスピン B を測定すれば、Alice の測定結果にかかわらず、確率 1/2 で  $|\leftarrow\rangle$  が、確率 1/2 で  $|\rightarrow\rangle$  が得られる。

28) Alice に  $|\uparrow\rangle$  を渡す確率は 1/2 であるとする。

29) Alice が  $|\uparrow\rangle$  を観測する確率は、(Carol にとってはともかく) Alice にとっては 1/2 である。



このように、エンタングルメントによる状態の相関は、Carol が用意したような古典的な相関よりもはるかに強い。

## 6.3 量子テレポーテーション

送信者 Alice が持っている量子系 X の状態

$$|\xi\rangle_X = a|\uparrow\rangle + b|\downarrow\rangle \quad (6.11)$$

を、遠方にいる受信者 Bob に送りたいとする。もし式 (6.11) が既知の状態であれば（つまり、係数  $a$  と  $b$  がわかっていれば）、古典通信で Bob に  $a$  と  $b$  を教えれば、Bob が現地で式 (6.11) の状態を再現することができる。問題なのは、式 (6.11) が未知の状態であるときである。まず、Alice が測定によって  $a$  と  $b$  を決定することはできない。単に状態  $|\uparrow\rangle$  と  $|\downarrow\rangle$  のどちらかを観測するだけである。

**ベル基底** まず準備として、**ベル基底** (Bell basis) を

$$|\Phi^+\rangle_{A,B} := \frac{1}{\sqrt{2}} \left( |\uparrow\rangle_A \otimes |\uparrow\rangle_B + |\downarrow\rangle_A \otimes |\downarrow\rangle_B \right) \quad (6.12a)$$

$$|\Phi^-\rangle_{A,B} := \frac{1}{\sqrt{2}} \left( |\uparrow\rangle_A \otimes |\uparrow\rangle_B - |\downarrow\rangle_A \otimes |\downarrow\rangle_B \right) \quad (6.12b)$$

$$|\Psi^+\rangle_{A,B} := \frac{1}{\sqrt{2}} \left( |\uparrow\rangle_A \otimes |\downarrow\rangle_B + |\downarrow\rangle_A \otimes |\uparrow\rangle_B \right) \quad (6.12c)$$

$$|\Psi^-\rangle_{A,B} := \frac{1}{\sqrt{2}} \left( |\uparrow\rangle_A \otimes |\downarrow\rangle_B - |\downarrow\rangle_A \otimes |\uparrow\rangle_B \right) \quad (6.12d)$$

で定義する。これらは  $\mathcal{H} \otimes \mathcal{H}$  の正規直交基底になっている。正規直交系であることは、テンソル積の内積（式 (5.11)）を使って容易に計算できる。

**量子テレポーテーションの手順** Alice と Bob が式 (6.12a) のエンタングル状態を所有しているとする。このとき Alice がもつ状態（式 (6.11)）を、次のような手順で Bob に転送することができる。

系 X, A, B を合わせた系の状態は、テンソル積によって  $|\xi\rangle_X \otimes |\Phi^+\rangle_{A,B}$  と書ける。これを式変形すると、

$$\begin{aligned} |\xi\rangle_X \otimes |\Phi^+\rangle_{A,B} &= \frac{1}{2} |\Phi^+\rangle_{X,A} \otimes (a|\uparrow\rangle_B + b|\downarrow\rangle_B) + \frac{1}{2} |\Phi^-\rangle_{X,A} \otimes (a|\uparrow\rangle_B - b|\downarrow\rangle_B) \\ &\quad + \frac{1}{2} |\Psi^+\rangle_{X,A} \otimes (b|\uparrow\rangle_B + a|\downarrow\rangle_B) + \frac{1}{2} |\Psi^-\rangle_{X,A} \otimes (-b|\uparrow\rangle_B + a|\downarrow\rangle_B) \end{aligned}$$

まず Alice は、系 X と系 A を合わせた状態に対して、ベル基底  $|\Phi^+\rangle_{X,A}$ ,  $|\Phi^-\rangle_{X,A}$ ,  $|\Psi^+\rangle_{X,A}$ ,  $|\Psi^-\rangle_{X,A}$  による測定を行う。