日本物理学会誌 Vol. 68, No. 4, p. 239 (2013) 著者最終版

2012 年 11 月 18 日

誤解されているブラケット — 共役演算子をめぐって

北野 正雄　＜京都大学大学院工学研究科＞

kitano@kuee.kyoto-u.ac.jp

Dirac によるブラケット記法は, 量子論における標準言語として広く用いられている. 彼自身が著した教科書 [1] の冒頭付近で, その原理と使い方が系統的かつ要領よく説明されている. 基底に依存しない記述が可能, 固有値が離散, 連続どちらの場合も統一的に扱える, 式の見通しがよく, 計算が簡単になるなどの利点をもつ, 非常に優れた記法である.

現在では, 量子論に関連する文献の多くはブラケット記法を採用している. しかし, 書店の棚に並んでいる学部生向けの量子論の教科書を眺めてみると, ブラケット記法を系統的に扱っているものは意外に少ない. 本稿では, 初学者には少し難しいという配慮以外に, ブラケット記法の普及を妨げる原因となっている「誤解」の存在を指摘したい.

話を具体的にするために, 「誤解」が最も典型的に現れている例をあげよう. 有名な教科書 [2] の第 4 章に, ブラケットを用いた表式 $\langle\psi|\hat{A}|\chi\rangle$ について,

「演算子 $\hat{A}$ が自己共役 (エルミート) ならば, ケットに作用すると見てもよいし, ブラに作用すると見てもよい. Dirac の記号法が力を発揮するのは, こういうときだ.」[1]

と書かれている. もし, これが事実なら, ユニタリ演算子や生成/消滅演算子のように, エルミートでない演算子の場合, ブラケット記法には何か不都合が生じるのだろうか. 文献 [2] において, その前後を調べてみると, 共役演算子の扱いについて誤りがあることが分かる. その結果として, 上記の不可解な結論が導かれているのである. 197 ページの最後の行から数行を引用する:

「ケット $\hat{A}^\dagger|\psi\rangle$ に共役なブラを $\{\langle\psi|\hat{A}^\dagger\}$ または $\langle\hat{A}^\dagger\psi|$ と書けば, 先の式は

$$\langle\psi|\{\hat{A}|\chi\rangle\} = \{\langle\psi|\hat{A}^\dagger\}|\chi\rangle = (\langle\chi|\{A^\dagger|\psi\rangle\})^* \qquad (4.2.6)$$

と書けることになる. あるいは $\langle\psi|\hat{A}\chi\rangle = \langle\hat{A}^\dagger\psi|\chi\rangle = \langle\chi|A^\dagger\psi\rangle^*$.」

すぐ発見できる誤りは, $\hat{A}^\dagger|\psi\rangle$ に共役なブラを $\{\langle\psi|\hat{A}^\dagger\}$ としている点である. 正しくは $\{\langle\psi|\hat{A}\}$ であり, 式 (4.2.6) の中央の表式は $\{\langle\psi|\hat{A}\}|\chi\rangle$ に書き直

[1] 198 ページ, 下から 11 行目. 抜粋部分だけで意味が通るよう一部書き換えた. また, 無限次元の場合, 自己共役とエルミートは厳密には区別すべきであるが, [2] にもあるように, ここでの議論には影響しない.

す必要がある.

不思議なことに, 並行的に導入されている, もう一つの表現 $\langle \hat{A}^\dagger\psi|$ を用いた記述の方は間違っていない. 式 (4.2.6) の次の行の式

$$\langle\psi|\hat{A}\chi\rangle = \langle\hat{A}^\dagger\psi|\chi\rangle \tag{1}$$

は, 内積記法における共役演算子の定義, $(\psi, \hat{A}\chi) = (\hat{A}^\dagger\psi, \chi)$ を踏襲する「折衷記法」で書かれている. これは, ブラやケットの中に演算子を入れることを許す記法であり, 共役演算子の導入部分などにおいて, よく使われている [3].

なぜ, 折衷記法には見られない誤りが通常のブラケット記法に生じたのだろう. それは, 式 (1) を不注意に通常のブラケット記法に移して, $\langle\psi|\{\hat{A}|\chi\rangle\} = \{\langle\psi|\hat{A}^\dagger\}|\chi\rangle$ としているからだと思われる. この誤った式を根拠にして, 演算子 $\hat{A}$ がエルミート, つまり $\hat{A}^\dagger = \hat{A}$ の場合にだけ, 波括弧をはずして, $\langle\psi|\hat{A}|\chi\rangle$ と表記できるとしている. そして, こういうときにブラケット記法が力を発揮できるというのである. しかし, 正しい式は $\langle\psi|\{\hat{A}|\chi\rangle\} = \{\langle\psi|\hat{A}\}|\chi\rangle$ であって, エルミート性にかかわらず, 常に $\langle\psi|\hat{A}|\chi\rangle$ と表わすことができる. Dirac の記号法の有効性に留保をつける必要はないのである.

ところで, 教科書におけるブラケット記法の扱いは大まかに 3 つの流儀に分かれる: (a) ブラケット記法を Dirac のオリジナル通りに使う [4] ; (b) ブラケット記法を使うが, 共役演算子の導入部などにおいて, 内積との折衷記法を用いる [3] ; (c) ブラケット記法を避け, 波動関数や行列を用いた記法 (成分表示) を主に使う. 現在, 日本の教科書では (b) と (c) が大半をしめ, 特に初学者向けのものは (c) がほとんどである. 実際, 文献 [2] においても, 4 章以外の章は, (b) や (c) の流儀で書かれている. ブラケットは内積の別記法, 特に関数の内積の短縮記法や行列要素の表現手段という軽い扱いを受けている場合が多い. 摂動法だけブラケットという場合もある. また, 数理的な教科書では, ヒルベルト空間論の応用という立場から, 内積記法 $(\psi, \hat{A}\chi)$ や $\langle\psi, \hat{A}\chi\rangle$ が主に用いられる. なお, (a) のタイプの教科書で学んだ人には「誤解」の心配はないと思われるが, 本稿でオリジナル記法の優位性を再確認されたい.

本来のブラケット記法が普及しない理由として, 次のようなシナリオが考えられる: (i) 便利に見えるブラケットをとりあえず使いはじめる; (ii) しかし, 共役演算子の導入部などで, 上記の例に見られるような「誤解」や類似の思い違いによって混乱する; (iii) 対策として, 折衷記法を導入したり, 使用法の限定によって混乱を回避する, あるいはブラケットをあまり使わないようにする.

内積との折衷記法は, 必ずしもよい記法ではなく, ディラックの教科書 [1] でも使われていない. ブラケット記法は「内積構造」よりも「双対構造」に

適合するようデザインされている. ベクトルにスカラー (複素数) を線形的に対応づけるものが線形汎関数であり, 線形汎関数全体を元のベクトル空間に対する双対空間とよぶ [5]. 双対は内積より原初的な構造であり, 内積の有無にかかわらず, 線形空間に自動的に付いてくるものである.

量子論に即していうと, 状態空間 $\mathcal{H}$ の要素であるケット $|\chi\rangle$ に対して, 複素数 $\psi(|\chi\rangle)$ を線形的に割り当てる関数 $\psi(\textvisiblespace)$ が線形汎関数であり, その集合である双対空間がブラの空間 $\mathcal{H}^*$ である. $\psi(\textvisiblespace)$ を $\langle\psi|$ と表わすことで, $\psi(|\chi\rangle) = \langle\psi|\chi\rangle$ と表記するのが Dirac [1] (p. 24) の優れたアイデアである. 一方, 内積 $(|\psi\rangle, |\chi\rangle)$ はケット間の演算であり, 双対空間は陽には現れない.

本来別物である, $\mathcal{H}$ と $\mathcal{H}^*$ の要素の間に, 1 対 1 の (反線形的な) 対応関係, すなわち共役関係を導入すると, その結果としてそれぞれの空間に内積が定義される. ブラケット記法においては, 中身が同じブラとケットが互いに共役というのが暗黙の了解であるが, 共役関係を明示的に表したい場合には $|\psi\rangle = \langle\psi|^\dagger$, $\langle\chi| = |\chi\rangle^\dagger$, あるいは $|\psi\rangle \overset{\dagger}{\leftrightarrow} \langle\psi|$, $\langle\chi| \overset{\dagger}{\leftrightarrow} |\chi\rangle$ と書けばよい.

内積は $(|\psi\rangle, |\chi\rangle) := \langle\psi|\chi\rangle$, $\langle\psi| = |\psi\rangle^\dagger$ によって定義される. 文献 [2] でも, Dirac [1] (p. 26) にしたがって, 共役関係を内積に先だって導入している. 逆に, $\mathcal{H}$ 上の内積から, 共役関係を定義することもできる. つまり, $(|\psi\rangle, |\chi\rangle)$ を $|\chi\rangle$ に対する汎関数と見たものを $\langle\psi|$ とするのである. これはよく用いられる方法であるが, ブラケット記法との整合性は悪い.

双対空間を導入した場合, 演算子 $\hat{A}$ は $\mathcal{H}$ 上の演算子, $\mathcal{H}^*$ 上の演算子という 2 重の意味を担うことになる. 後者は前者の「双対演算子」とよばれる. これらは同じ文字で表されているが別物である. しばらく, $\underrightarrow{\hat{A}}$, $\underleftarrow{\hat{A}}$ のように区別しよう. 両者の間には, $\langle\psi|\underrightarrow{\hat{A}}|\chi\rangle = \langle\psi|\underleftarrow{\hat{A}}|\chi\rangle$ が成り立つ. 文献 [2] の間違いは, $\underleftarrow{\hat{A}}$ を慌てて $\underrightarrow{\hat{A}}$ の「共役演算子」だと思ったことにある.

もう少していねいに見ておこう. 表式 $\langle\psi|\underrightarrow{\hat{A}}|\chi\rangle$ は $|\chi\rangle \in \mathcal{H}$ に対する線形汎関数と見なせるので, $\langle\psi'| \in \mathcal{H}^*$ を選んで $\langle\psi'|\chi\rangle$ と表せる. この $\langle\psi'|$ は $\langle\psi|$ に線形的に依存するので, $\mathcal{H}^*$ 上の演算子 $\underleftarrow{\hat{A}} : \langle\psi| \mapsto \langle\psi'| = \langle\psi|\underleftarrow{\hat{A}}$ が定義できる. これが双対演算子である. ここまでは内積は関係しない. このブラ間の関係を対応するケット間, すなわち, $|\psi'\rangle = \langle\psi'|^\dagger$ と $|\psi\rangle = \langle\psi|^\dagger$ の関係に書き直したものが, $|\psi'\rangle = \underrightarrow{\hat{A}}^\dagger|\psi\rangle$ である. $\underrightarrow{\hat{A}}^\dagger$ は $\mathcal{H}$ 上の演算子である. ここではじめて共役関係, すなわち内積が関係してくる. 同様にして, $\mathcal{H}^*$ 上の $\underleftarrow{\hat{A}}^\dagger$ も得られる. このように双対構造を考える場合, 矢印なしでは 2 つに見える, 4 種類の演算子 $\underleftarrow{\hat{A}}$, $\underrightarrow{\hat{A}}$, $\underrightarrow{\hat{A}}^\dagger$, $\underleftarrow{\hat{A}}^\dagger$ が登場する. 内積記法や折衷記法の場合は, $\underrightarrow{\hat{A}}$, $\underrightarrow{\hat{A}}^\dagger$ の 2 種類しか現れない.

使っている人が何となく満足してしまっている内積との折衷記法は $\langle\hat{A}\psi|\chi\rangle$ の

ように, 演算子をブラやケットの中に入れることを許す. しかし, $\langle\hat{A}\psi|\hat{B}|\hat{C}\chi\rangle = \langle\psi|\hat{A}^\dagger\hat{B}\hat{C}|\chi\rangle$ のような, 演算規則を余分に追加しなければならない. ブラやケットはその中身を自由に工夫できるという, ひそかなメリットがある: $|\boldsymbol{x}, t\rangle$, $|$元気な猫$\rangle$. しかし, 折衷記法はその自由度と両立しない. また, 本来のブラケット記法との混用は誤解や混乱の原因になりやすい. そもそも, 双対構造に内積構造を接木する折衷記法は合理的ではなく, 美しさに欠ける.

折衷記法が好まれる場面として, 波動関数 $\psi(x)$, $\chi(x)$ の微分演算子を介した内積の式

$$\int_{-\infty}^{\infty}\psi^*\frac{\mathrm{d}\chi}{\mathrm{d}x}\mathrm{d}x = -\int_{-\infty}^{\infty}\frac{\mathrm{d}\psi^*}{\mathrm{d}x}\chi\mathrm{d}x \tag{2}$$

がある. 微分演算子を $\hat{d}$ と表すと, 折衷記法では $\langle\psi|\hat{d}\chi\rangle = \langle\hat{d}^\dagger\psi|\chi\rangle = -\langle\hat{d}\psi|\chi\rangle$ となる. 反エルミート性 $\hat{d}^\dagger = -\hat{d}$ を用いた[2]. 一方, ブラケット記法では, $|\psi\rangle^\dagger(\hat{d}|\chi\rangle) = \langle\psi|(\hat{d}|\chi\rangle) = (\langle\psi|\hat{d})|\chi\rangle = (\hat{d}^\dagger|\psi\rangle)^\dagger|\chi\rangle = -(\hat{d}|\psi\rangle)^\dagger|\chi\rangle$ である. この式変形がうまくできず, ブラケットを投げ出すケースも多い. 後者の方が複雑に見えるが, それは, もとの式が内積的表現だからである. これらの式は, ブラケット記法では 1 つの式 $\langle\psi|\hat{d}|\chi\rangle$ に集約されている.

逆に, $\langle\psi|\hat{A}\hat{B}|\chi\rangle$ に相当する $\langle\psi|(\hat{A}\hat{B}|\chi\rangle) = (\langle\psi|\hat{A})(\hat{B}|\chi\rangle) = (\langle\psi|\hat{A}\hat{B})|\chi\rangle$ を内積的に表すと, $\langle\psi|\hat{A}\hat{B}\chi\rangle = \langle\hat{A}^\dagger\psi|\hat{B}\chi\rangle = \langle\hat{B}^\dagger\hat{A}^\dagger\psi|\chi\rangle$ となって, 表現の冗長性のため見通しが悪くなる. 折衷記法にはない, シンプルな「結合則」がブラケット記法のパワーの源と一つといってよい.

もう一つのメリットは, 演算子を $|\psi\rangle\langle\chi|$ の形の和として表せることである. つまり, $\mathcal{H}$ 上の演算子を $\mathcal{H}\otimes\mathcal{H}^*$ の要素と見なすことが自然にできる. また, ブラケット記法において大活躍する「1 の分解」 $\hat{1} = \sum_i |e_i\rangle\langle e_i|$ も導入できる.

さて, 演算子 $\hat{A}$ に対する固有値 a の固有ケットを $|a\rangle$ と表すのは便利な書き方である: $\hat{A}|a\rangle = a|a\rangle$. しかし, その共役ブラ $\langle a|\ (= |a\rangle^\dagger)$ の解釈にあたって注意が必要である. $\hat{A}$ がエルミートなら, $\langle a|$ は $\hat{A}$ (正確には $\underleftarrow{\hat{A}}$) の固有値 a の固有ブラでもある: $\langle a|\hat{A} = a\langle a|$. ところが, $\hat{A}$ がエルミートでない場合は, 一般にこの性質は成り立たない. 状況を確認するために, $\hat{A}$ の固有値の全体を $\{a_i\}$ $(i = 1, 2, \ldots)$ とし, 対応する固有ケットからなる, 直交とは限らない基底を $\{|a_i\rangle\}$ とおく. その双対基底 $\{\langle a^i|\}$ は, $\langle a^i|a_j\rangle = \delta^i_j$ を満たすブラ

[2] 微分演算子は $\hat{d} = \lim_{a\to 0}\dfrac{\hat{D}(a) - \hat{1}}{a}$. ここで, $\hat{D}(a)$ は距離 a の移動を表すユニタリ演算子であり, $\hat{D}^\dagger(a) = \hat{D}^{-1}(a) = \hat{D}(-a)$ を満たす. これらから, 反エルミート性 $\hat{d}^\dagger = -\hat{d}$ を示すことができる. 運動量演算子 $\hat{p} = -\mathrm{i}\hbar\hat{d}$ はエルミートである.

からなる. 双対基底は内積, あるいは共役関係とは独立に定義されるものであり, 一般に $\langle a^i| \neq |a_i\rangle^\dagger$ である. これらを用いて, 演算子は $\hat{A} = \sum_i a_i |a_i\rangle\langle a^i|$ と表現できる. $|a_i\rangle$ と $\langle a^i|$ がそれぞれ $\hat{A}$ の固有値 $a_i\,(= a^i)$ の固有ケット, 固有ブラであることが分かる. また, 共役演算子 $\hat{A}^\dagger = \sum_i a_i^* |a^i\rangle\langle a_i|$ の固有値 a_i^* の固有ケット, 固有ブラがそれぞれ, $|a^i\rangle$, $\langle a_i|$ である. 4 種類の固有ベクトルが関係している.

このように双対構造を陽に扱う場合, ブラケット記法が有利である. ただし, $\hat{A}$ が正規 (normal) 演算子, すなわち, $[\hat{A}^\dagger, \hat{A}] = 0$ の場合は, $\{|a_i\rangle\}$ を正規直交にできるので, 共役関係を利用して双対基底 $|a^i\rangle = \langle a_i|^\dagger = |a_i\rangle$ が構成できる. そして, $\hat{A} = \sum_i a_i |a_i\rangle\langle a_i|$ のように, 添字の上下の区別はなくなり, 双対構造は見えにくくなる. 正規演算子にはエルミート演算子, ユニタリ演算子が含まれる. 特に, エルミートの場合は固有値 a_i が実数になる.

一般的にいって, ブラケットは内積記号を少し変形したものにすぎないと見なされている. Dirac が教科書 [1] で多くのページを割いて説明しているにもかかわらず, ブラ空間 (双対空間) やブラに後ろから作用する演算子 (双対演算子), あるいは共役関係の積極的な意味を深く考えないで, 計算ルールを半ば経験的に習得して運用しているのが現状であろう. ブラケット記法は, それを裏打ちしている双対構造を意識しながら学ぶべきである. 初学者に双対空間という抽象的概念を教えることには抵抗があるかも知れない. しかし, 双対は線形代数をはじめとする数学において, 当然扱われるべきテーマであり, 物理でも, 固体物理における逆格子ベクトル, 相対論におけるテンソル (下添字成分) などとして登場している. したがって, 双対空間の典型例であるブラ空間を手順を追っていねいに説明しておくことは, 教育上有意義であろう.

本稿が, ブラケット記法にまつわる「誤解」を解消し, Dirac の記号法の本来の力を取り戻すきっかけとして役立てば幸いである.

参考文献

[1] P.A.M. Dirac (著), 朝永振一郎 他 (訳): 「量子力学 原著第 4 版」 (岩波書店, 1968) 第 II 章.

[2] 湯川秀樹, 豊田利幸 (編): 「現代物理学の基礎 (第 2 版) 3, 量子力学 I」 (岩波書店, 1972) pp. 197–199. 復刻版が 2011 年に発刊された.

[3] たとえば, 中嶋貞雄: 「物理入門コース 6, 量子力学 II」 (岩波書店, 1984) p. 234; 清水 明: 「新版 量子論の基礎」(サイエンス社, 2004) p. 40.

[4] たとえば, J.J. Sakurai (著), 桜井明夫 (訳): 「現代の量子力学 上」 (吉岡書店, 1989) p. 19; 猪木 慶治, 川合 光: 「量子力学 I」 (講談社, 1994) p. 177; 北野 正雄: 「量子力学の基礎」 (共立出版, 2010) p. 35.

[5] S. MacLane (著), 彌永昌吉 (監訳): 「数学 — その形式と機能」(森北出版, 1992) p. 250.

Masao Kitano
"Dirac's bra-ket notation misunderstood and deformed
in terms of adjoint operators"