エルミート内積空間のスペクトル分解，固有ベクトルと固有関数までの道のり

version 0.2

久島広幸 (h2@hisasima.jp)

2014 年 8 月 30 日
revised 2019 年 2 月 9 日,
revised 2019 年 3 月 23 日

数式の書き方についてのちょっとした註

数式について，筆者はわりと普通の書き方をしていると思ってはいるが，もしかしたら特徴的なのかもしれない，ということをここで述べておく．

「数式の定義または置き換え」については，:= を利用する．たとえば，いまここで，集合 S を $\{n^2 \mid n \text{ は自然数}\}$ の様に定義する」，という事柄を，

$$S := \{n^2 \mid n \text{ は自然数}\}$$

の様に記す．これは項の置き換えも同様で,「いまここで，f を展開してみよう．するとかくかくしかじがである．この時の A を α ，B を β とおくと,,,」と言うような場合も次の様に記す:

$$\alpha := A,$$
$$\beta := B.$$

計算の結果を直截に置き換えたい場合，=: を用いる．なんらかの計算した結果，その次のことを考えて，e^{i2t} にかかる係数を C，e^{-i2t} のそれを D としたい時には

$$2e^{i(2t+\pi/6)} = 2e^{i2t}e^{i\pi/6} =: Ce^{i2t}$$
$$2e^{-i(2t+\pi/6)} = 2e^{-i2t}e^{-i\pi/6} =: De^{-i2t}$$

と言ったような具合に記すことにする．

式の変形では，右，そして下の順序で進んでいるものとする．括弧内の数字が変形の順番である．

$$\begin{aligned} E &= F(1) = G(2) = H(3) \\ &= I(4) = J(5) \end{aligned}$$

数の集合については，

$$\begin{aligned} \text{自然数} &: \mathbf{N}, \\ \text{整数} &: \mathbf{Z}, \\ \text{有理数} &: \mathbf{Q}, \\ \text{実数} &: \mathbf{R}, \\ \text{複素数} &: \mathbf{C}, \end{aligned}$$

と書く．これは一般的なものとそうは違わないはずである．

目 次

第1章　エルミート内積ベクトル空間

抽象ベクトル空間の生成，スカラー倍に対する内積演算の定義，エルミート[1]内積の導入，空間・内積に対する線形性,「エルミート内積ベクトル空間」の導出.

1.1　抽象ベクトル空間

舞台は「ベクトル空間[2]」である．2 次元，3 次元の直交座標系をベースにしてベクトルに馴染んできたのが我々の 10 代の頃であるが，ある時，極座標を知りそのベクトル表示に若干戸惑い[3]，直交座標のありがたさを感じたものだった．とはいえ，いつまでたっても 10 代のままではいられない．ベクトルを抽象化する．

まず $|q\rangle$ のようにあらわされるものがあるとしよう．はじめに $|q\rangle$ ありき，である．この q という記号はこれらの「区別」を示すもので，$|q\rangle$ と $|p\rangle$ は異なるものであると約束する．この $|q\rangle$ の集まり（集合）に $BASE$ という名前をつけよう．集合論の表記を用いれば次のように書ける:

$$BASE := \{\,|\,q\rangle \mid \text{for all q}\}.$$

$BASE$ にはいろいろなものがあるだろう．いまここで，任意の複素数 α, β に対して

$$\alpha\,|p\rangle + \beta|q\rangle \in BASE$$

という性質がある $BASE$ だけを考えることにする．この性質を「線形性」と言おう．もちろん $BASE$ の中にはこの線形性を満たさないものもあるに違いない．なので，この線形性を満たす $BASE$ に V という名前を付けよう．$BASE$ がひとつ「深化」したと考えて差し支えあるまい．そしてこの V の要素である $|q\rangle$ をベクトルと名付ける．要素をベクトルと名付けたので，V にも「ベクトル空間」[4] という名前を与えよう．まとめると，ベクトル空間 V は，任意の複素数（集合的には C と表現）α, β に対して

$$V = \{\,|\,p\rangle, |\,q\rangle, \ldots\}$$
$$\forall \alpha, \beta \in C, \quad \alpha\,|p\rangle + \beta|q\rangle \in V$$

となるものである．

ちなみに，ベクトルを対象とするこの分野では，複素数のことを「スカラー」とも言う．したがってこの複素数とベクトルの積を「スカラー積」と呼んだりもする[5].

---

[1] Charles Hermite.

[2] 線形空間」と呼ぶこともある．いっそのこと「線形ベクトル空間」でもいいのではと思うが，ちょっと冗長に過ぎるきらいもある．

[3] ついでにいえば極座標での微分には大いにとまどった．極座標のラプラシアン，いまきちんと計算できる自信はあまりない．本論とは関係はないが.

[4] もちろん「ベクトルの集合」でもかまわない．けれど「ベクトル」と「空間」は良く似合うような気がする．

[5] ベクトルにまつわる「積」には，内積とか外積とかもあったことを思い出そう．

1.2 エルミート内積

ベクトル空間 V の上に「ベクトルの内積」（以下単純に「内積」と呼ぶ）というものを定義しよう[6].

内積に特徴的な事柄は，それがベクトルとベクトルの演算で定義され，かつその実体がスカラー（複素数）であるということである．ベクトル $|p\rangle, |q\rangle$ の内積を，

$$< |p\rangle, |q\rangle >$$

と表す．そしてここにスカラー倍に対する決めごとをひとつ加える．右側のベクトルのスカラー倍は内積の外にでるという約束である．λ をスカラーとすると，

$$< |p\rangle, \lambda|q\rangle > \quad = \quad \lambda < |p\rangle, |q\rangle >$$

となるということである．

さてここで，この内積にさらにもうひとつの条件,「エルミート内積条件」と呼ばれるものをつける．端的に言えば，内積の複素共役をとると，内積の順番が逆になるという条件である:

$$< |p\rangle, |q\rangle >^* \quad = \quad < |q\rangle, |p\rangle >$$

このエルミート内積条件をみたす内積を，若干くどいけれども，エルミート内積と呼ぶ．

ベクトルのスカラー倍について，エルミート内積をすこし計算してみよう．λ をスカラーとすれば，先にみたように

$$< |p\rangle, \lambda|q\rangle > \quad = \quad \lambda < |p\rangle, |q\rangle >$$

であった．この内積の複素共役をとり，最後にエルミート内積条件をあてはめれば,

$$< |p\rangle, \lambda|q\rangle >^* \quad = \quad (\lambda < |p\rangle, |q\rangle >)^* \quad = \quad \lambda^* < |p\rangle, |q\rangle >^* \quad = \quad \lambda^* < |q\rangle, |p\rangle >$$

である．さらにこの最左辺に対してもエルミート内積条件を適用すれば,

$$< |p\rangle, \lambda|q\rangle >^* \quad = \quad < \lambda|q\rangle, |p\rangle >$$

であるので，結局

$$< \lambda|q\rangle, |p\rangle > \quad = \quad \lambda^* < |q\rangle, |p\rangle >$$

となる．左側のベクトルのスカラー倍はその複素共役が前にでる，と言うことになる．まとめると，

$$\begin{aligned} < |p\rangle, \lambda|q\rangle > \quad &= \quad \lambda < |p\rangle, |q\rangle >, \\ < \lambda|q\rangle, |p\rangle > \quad &= \quad \lambda^* < |q\rangle, |p\rangle > \end{aligned}$$

となる．これでひとまずエルミート内積とベクトルのスカラー倍の関係が導出できた.

[6]数学書などでこのような時に「内積という構造を入れる」という記述を見ることがある．なかなか素敵な言葉である．先の線形性の性質も,「線形という構造をいれる」といってもいいのかもしれない．とにかくこうやっていろいろな性質 (制約？）を与えていき，世界を順々に組み立てていくことになる.

1.3　エルミート内積の線形性

ベクトル空間には線形性という性質があった．内積にもそれが適用できるように取り決めよう．今 α, β を任意のスカラー（複素数）として $|r\rangle := \alpha|p\rangle + \beta|q\rangle$ とし，内積に対して次の性質を要請する：

$$
\begin{aligned}
<|s\rangle, |r\rangle> &= <|s\rangle, \big(\alpha|p\rangle + \beta|q\rangle\big)> \\
&= <|s\rangle, \alpha|p\rangle> + <|s\rangle, \beta|q\rangle> \\
&= \alpha <|s\rangle, |p\rangle> + \beta <|s\rangle, |q\rangle>.
\end{aligned}
$$

これを内積の線形性とよぶ.

エルミート内積条件を付加すれば，上記に加えて

$$
\begin{aligned}
<|r\rangle, |s\rangle> &= <\big(\alpha|p\rangle + \beta|q\rangle\big), |s\rangle> \\
&= <\alpha|p\rangle, |s\rangle> + <\beta|q\rangle, |s\rangle> \\
&= \alpha^* <|p\rangle, |s\rangle> + \beta^* <|q\rangle, |s\rangle>
\end{aligned}
$$

も満たされる.

ベクトルの足し算は「自然に分配」され，スカラー倍は内積の外に出る，という具合である.

1.4　エルミート内積ベクトル空間

上に述べたように，線形性の性質を組み込んだのエルミート内積を取り込むことによって，ベクトル空間 V がまたひとつ深化した．このエルミート内積を組みこんだベクトル空間を「エルミート内積ベクトル空間 V_H」と呼ぶことにしよう.

第2章　エルミート作用素

ベクトルを変換するものとしての作用素の定義，作用素への線形性の要請，エルミート共役作用素・エルミート作用素の定義，エルミート作用素の場合のエルミート内積の特徴.

2.1　作用素の導入

V の構成要素であるベクトル $|q\rangle$ に何らかの働きを施し，別のベクトル $|r\rangle$ に変換するものを「作用素」と呼ぼう[1]．スカラー積の複素数と区別しやすく，かつ,「作用素」であるということを明示するために，作用素を $\hat{A}$ の様に表記する．この関係は次のように表される:

$$|r\rangle = \hat{A}\,|q\rangle\,.$$

一般的に言えば，変換されたもの $|r\rangle$ が V の要素にならない場合もあるだろう．そういう「作用素」があってもおかしくはない (その場合には違う表記を使う方が筋だ)．しかし，本稿では，変換されたベクトルも V の要素である場合のみを考えることにする.

2.2　作用素の線形性

内積の場合と同様に，作用素にも線形性を要請しよう．α,β を任意のスカラー（複素数）として $|r\rangle := \alpha\,|p\rangle + \beta\,|q\rangle$ とし，この $|r\rangle$ に作用素 $\hat{A}$ を作用させる時，次の等式が成り立つものとするのである：

$$\hat{A}\,|r\rangle = \hat{A}\left(\alpha\,|p\rangle + \beta\,|q\rangle\right) = \hat{A}\alpha\,|p\rangle + \hat{A}\beta\,|q\rangle = \alpha\hat{A}\,|p\rangle + \beta\hat{A}\,|q\rangle$$

ベクトルの足し算は「自然に分配」され，スカラー倍は作用素の働きの外に出る，という具合である.

また，作用素自身にも次のように線形性を要請しておこう:

$$\left(\hat{A}+\hat{B}\right)|q\rangle = \hat{A}\,|q\rangle + \hat{B}\,|q\rangle$$

これをもって「作用素」と定義する[2].

2.3　エルミート共役作用素，エルミート作用素

作用素の性質に名前をつけていこう．ただしここからは一般のベクトル空間 V ではなく，エルミート内積ベクトル空間 V_H の話になる.

[1] ベクトルをベクトルに変換する「関数」と言いたくもなるが（筆者だけか？）言葉遣いとして，なにかを数に写すものにたいして「関数」という言葉を使うようである．一般に「何かを何かに対応させる」ものを「写像」ということにすれば,「何かを数に対応させる写像」を「関数」と言うことになる（この伝で行けば，内積は「関数」である). 集合それぞれに対して数を与える写像は「集合関数」と言ったりもする．ゆえに，ここではその言葉遣いを尊重して「関数」を用いず,「作用素」とする． 遠い記憶では，例えば「2 次元ベクトルの回転」の行列．これもベクトルをベクトルに変換する立派な作用素である.

[2] これもまたある意味，作用素の抽象化，である.

いま作用素を $\hat{A}$ とし，エルミート内積を仲介して，次の関係が成り立つ作用素 $\hat{B}$ を $\hat{A}$ のエルミート共役作用素（別名「随伴作用素」）と定義する:

$$<\hat{A}|p\rangle,|q\rangle> \quad = \quad <|p\rangle,\hat{B}|q\rangle>.$$

そして $\hat{A}$ のエルミート共役作用素を $\hat{A}^{\dagger}$ と書くことにする．書き直せば，

$$<\hat{A}|p\rangle,|q\rangle> \quad = \quad <|p\rangle,\hat{A}^{\dagger}|q\rangle>.$$

さてここでこの複素共役をとってみよう．エルミート内積の複素共役は順番の交換であることを思い出せば，

$$\begin{aligned}(\text{左辺})^* \quad &= \quad <\hat{A}|p\rangle,|q\rangle>^* \quad = \quad <|q\rangle,\hat{A}|p\rangle>,\\(\text{右辺})^* \quad &= \quad <|p\rangle,\hat{A}^{\dagger}|q\rangle>^*,\end{aligned}$$

つまり，

$$<|q\rangle,\hat{A}|p\rangle> \quad = \quad <|p\rangle,\hat{A}^{\dagger}|q\rangle>^*$$

ということが導かれる．同値なことではあるが，もう一度複素共役をとると，

$$<|q\rangle,\hat{A}|p\rangle>^* \quad = \quad <|p\rangle,\hat{A}^{\dagger}|q\rangle>$$

となる．これがエルミート共役作用素と内積の関係である．

そして，エルミート共役作用素がもとの作用素と等しいもの，つまり，

$$\hat{H} = \hat{H}^{\dagger}$$

となるような作用素をエルミート作用素（別名「自己随伴作用素」）とよぶ．したがって，エルミート作用素の場合には，まずエルミート共役作用素の定義より，

$$<\hat{H}|p\rangle,|q\rangle> \quad = \quad <|p\rangle,\hat{H}|q\rangle>$$

であるから，複素共役をとることによって，内積の順番に関して次の法則を得る：

$$<|q\rangle,\hat{H}|p\rangle>^* \quad = \quad <|p\rangle,\hat{H}|q\rangle>.$$

第3章　ブラケット記法

記述の簡便性

エルミート内積の記法の簡便化をはかろう．いままでは，内積を

$$< |p\rangle, |q\rangle >$$

と書いてきた．基本はこれにあることを忘れずに，つぎの記法[1]を導入しよう：

$$\langle p|q\rangle := < |p\rangle, |q\rangle > .$$

エルミート内積条件は，

$$\langle p|q\rangle^* = \langle q|p\rangle .$$

これをもちいると，$|s\rangle$ と $|r\rangle := \alpha |p\rangle + \beta |q\rangle$ の内積は

$$\langle s|r\rangle = < |s\rangle, |r\rangle > = \langle s| \left(\alpha |p\rangle + \beta |q\rangle\right) = \alpha \langle s|p\rangle + \beta \langle s|q\rangle$$

と書けるし，$|r\rangle$ と $|s\rangle$ の内積はエルミート内積条件を用いて

$$\langle r|s\rangle = < |r\rangle, |s\rangle > = \langle s|r\rangle^* = \alpha^* \langle p|s\rangle + \beta^* \langle q|s\rangle$$

と書ける．

作用素がはいってくると少しややこしくなる．$|p\rangle$ と $|r\rangle := \hat{A}|q\rangle$ の内積を考えてみよう．ストレートフォワードに行けば，

$$< |p\rangle, |r\rangle > = < |p\rangle, \hat{A}|q\rangle >$$

であるので，

$$\langle p|r\rangle = \langle p| \left(\hat{A}|q\rangle\right)$$

となる．これを踏まえて括弧をも省略する．つまり，

$$\langle p|\hat{A}|q\rangle := \langle p| \left(\hat{A}|q\rangle\right)$$

と書くようにするのである．したがって，

$$\langle p|r\rangle = \langle p|\hat{A}|q\rangle .$$

[1] この記法の方が簡略化されていて書きやすいし見やすい．なにより綺麗であると筆者は思う．後に述べる射影作用素の記述にも便利である．さらに加えて，筆者は P.A.M. Dirac のファンでもある．

では $|r\rangle = \hat{A}|q\rangle$ と $|p\rangle$ の内積はどうか？エルミート共役作用素を用いると，

$$< |r\rangle, |p\rangle > \quad = \quad < \hat{A}|q\rangle, |p\rangle > \quad = \quad < |q\rangle, \hat{A}^{\dagger}|p\rangle >$$

であった．したがって，

$$\langle r|p\rangle = \langle q|\hat{A}^{\dagger}|p\rangle$$

となる．ここでエルミート内積条件に注目してみよう．エルミート内積条件を適用すると，

$$\langle p|r\rangle^{*} = \langle r|p\rangle$$

なので，

$$\langle p|\hat{A}|q\rangle^{*} = \langle q|\hat{A}^{\dagger}|p\rangle$$

という関係も導かれる．さらにエルミート作用素の場合には，

$$\langle p|\hat{H}|q\rangle^{*} = \langle q|\hat{H}|p\rangle$$

となる．

第4章　エルミート作用素のもとでの固有値方程式

固有値方程式の定義，エルミート作用素の場合の固有値・固有ベクトルの特徴の導出，線形独立，直交性，完全性，正規直交完全基底ベクトル．

4.1　固有値方程式

作用素 $\hat{A}$ が，作用の結果そのベクトルを変えず，単に複素数倍するだけの場合があるとして，それを考える[1]．これは，作用素 $\hat{A}$ の固有値方程式と呼ばれ，その方程式を書き下すと

$$\hat{A}\,|p\rangle = \alpha_p\,|p\rangle$$
$$\hat{A}\,|q\rangle = \alpha_q\,|q\rangle$$

などとなる方程式である．複素数 α_p, α_q を固有値，$|p\rangle$，$|q\rangle$ を固有ベクトルと呼ぶ．これが固有値，固有値方程式という言葉の意味である．定義であるといって差し支えない．

けれども，これだけでは一般的すぎて漠然としている感が否めない．次からはこの作用素がエルミート作用素である場合に集中し，その特徴をみていこう[2]．

4.2　エルミート作用素に対する固有値の特徴

エルミート作用素に対する固有値の特徴を見よう．エルミート作用素を $\hat{H}$ とし，$|p\rangle$ をその固有ベクトル，固有値を λ_p とする．$|p\rangle$ と $\hat{H}\,|p\rangle$ の内積を計算すると，

$$\langle p|\hat{H}|p\rangle = \lambda_p\,\langle p|p\rangle$$

となる．ここで，上の両辺の複素共役をとってみる．その際に，$\hat{H}$ のエルミート性つまり $\hat{H}^\dagger = \hat{H}$ とエルミート内積条件（$\langle p|p\rangle^* = \langle p|p\rangle$）を使う．すると，

$$(\text{左辺})^* = \langle p|\hat{H}|p\rangle^* = \langle p|\hat{H}^\dagger|p\rangle = \langle p|\hat{H}|p\rangle = \lambda_p\,\langle p|p\rangle$$
$$(\text{右辺})^* = \left(\lambda_p\,\langle p|p\rangle\right)^* = \lambda_p^*\,\langle p|p\rangle^* = \lambda_p^*\,\langle p|p\rangle$$

となる．つまり，$\lambda_p^* = \lambda_p$．これは λ_p が実数であることを示している．エルミート作用素に対しては「固有値は実数である」，という特徴があるのである．

[1] 作用素の種類によっては，これが成り立つベクトルがない場合もありえよう．
[2] エルミートというだけで実に興味深い特徴が出てくることに驚く．

4.3　エルミート作用素に対する固有ベクトルの特徴，直交完全系

つぎに固有ベクトルに関する特徴を見てみよう．$|p\rangle, \lambda_p$ と同様に，$|q\rangle, \lambda_q$ も固有ベクトル，固有値であるとする．$|p\rangle$ と $\hat{H}|q\rangle$ の内積を計算すると，

$$\langle p|\hat{H}|q\rangle = \lambda_q \langle p|q\rangle$$

となる．固有値の特徴を見た場合と同様に，両辺の内積の複素共役をとり，$\hat{H}$ のエルミート性，固有値が実数であること，エルミート内積条件を利用すると，

$$(\text{左辺})^* = \langle p|\hat{H}|q\rangle^* = \langle q|\hat{H}^\dagger|p\rangle = \langle q|\hat{H}|p\rangle = \lambda_p \langle q|p\rangle$$
$$(\text{右辺})^* = \langle p|\hat{H}|q\rangle^* = \left(\lambda_q \langle p|q\rangle\right)^* = \lambda_q^* \langle p|q\rangle^* = \lambda_q \langle q|p\rangle$$

を得る．つまり，

$$\lambda_p \langle q|p\rangle = \lambda_q \langle q|p\rangle \iff (\lambda_p - \lambda_q)\langle q|p\rangle = 0.$$

この式の意味する所は，λ_p と λ_q が異なれば，$\langle q|p\rangle$ は 0，すなわち，異なる固有値に対応する固有ベクトルの内積は 0 ということである．これを「直交性」と呼ぶ．定式化すれば，

$$\langle q|p\rangle = 0 \quad (\text{where } |q\rangle \neq |p\rangle).$$

以上より，異なる固有値に対応する固有ベクトルはおのおの「線形独立」である，と言えることになる[3]．そして，この $\hat{H}$ に関する線形独立な固有ベクトルをすべて集めた集合（それを $\{\,|h\rangle\}$ とあらわそう）は「完全系」をなす，ということが知られている（その導出は⋯⋯この備忘録には手にあまる問題なので，ここではそれを認めていただくことにしたい[4]）．

「完全系をなす」とは，任意のベクトル $|f\rangle$ がこの線形独立な固有ベクトル全ての線形結合で表すことができる，ということである．いろいろな用語があって恐縮であるが[5] $\{\,|h\rangle\}$ を「直交完全系」「直交完全基底 (ベクトル)」などという．

さてこの直交完全基底ベクトルによるベクトルの線形結合展開の実相を次からみていくのだが，固有値が離散的である場合と連続的である場合の見通しのよさにはだいぶ差がある．ここまでの議論では，固有値に対して離散，連続の区別は何もなかったが,「線形結合」を表現する際においてはそれが大きな差を生む．簡単に言えば，和で表現できるか否か．である，和で表現できない場合には積分を持ってくることになり[6]，それにまつわって δ 関数（超関数として知られている）のお世話にならなければならなくなる．ついでに言えば，抽象化されたベクトルとその作用素に関しても，離散的な場合には列ベクトルと行列による表現（モデル）が利用できるが，連続的な場合にはなかなかそうはいかない．かような事情もあるので，離散と連続を分けて考えていくことにしよう[7]．

---

[3]同一固有値にたいして複数の固有ベクトルルが存在する「縮退」というものを考えなくてはいけない場合もあろうが，ここでは縮退のない理想的（？）なものを対象にするようにしよう．

[4]いつか稿をあらためてまとめてみたい．しかし，CCR は Someday never comes と唄っている．

[5]誰に対して恐縮なのか？

[6]実に「連続的」である．

[7]V_H の要素が有限個である場合（有限次元のベクトル空間の場合），固有値は必ず離散的になる（証明は別途そのうち）．無限の場合には，離散，連続両方の場合がある．

第5章　離散固有値の場合の正規直交展開，スペクトル分解

エルミート作用素にもとづくスペクトル展開への道筋．固有値は離散．

5.1　固有値が離散的な場合の正規直交完全系

エルミート作用素 $\hat{H}$ の直交完全基底ベクトルを $\{\,|h\rangle\}$ とする．この基底ベクトルに対する固有値方程式は

$$\hat{H}\,|h\rangle = \lambda_h\,|h\rangle$$

で表せる．さていま，この固有値 λ_h が離散的であるとする．とはいっても「離散的」という言葉の意味があいまいなきらいもある．ここでは「可算無限」であるということ，つまり，自然数と 1 対 1 に対応させることができる，というふうに定義する[1]．

さきにもみたように，固有ベクトルは線形独立であった．つまり，ある固有値には，ひとつの固有ベクトルが対応するのであった．したがって，固有値が離散的であれば，固有ベクトルも離散的である，ということが分かる．それを踏まえて，直交完全基底ベクトルを m,n を自然数として次のように表記しよう:

$$\{\,|h_n\rangle\},$$
$$\langle h_m|h_n\rangle = 0 \quad \text{where } m \neq n.$$

任意のベクトル $|q\rangle$ はこの直交完全基底ベクトルによる線形結合で表される．離散固有値の場合を扱っているので，その線形結合は和で表すことができる．つまり，α_n を複素数として

$$|q\rangle = \sum_n \alpha_n\,|h_n\rangle$$

と展開できるというわけである．ここで，$|h_m\rangle$ と $|q\rangle$ のエルミート内積を計算してみよう．$|h_n\rangle$ の直交性を用いると

$$\langle h_m|q\rangle = \sum_n \alpha_n\,\langle h_m|h_n\rangle = \alpha_m\,\langle h_m|h_m\rangle$$

となる．

さて，$\langle h_m|h_m\rangle$，つまり同一の基底ベクトル（もちろん基底ベクトルは固有ベクトルである）どうしの内積はどうもとまるのか？ということで，固有ベクトルの複素数倍のことを考えてみよう．たとえば，β を複素数とすると，作用素の線形性から，

$$\hat{H}(\beta\,|h_n\rangle) = \beta\hat{H}\,|h_n\rangle = \beta\lambda_{h_n}\,|h_n\rangle = \lambda_{h_n}(\beta\,|h_n\rangle)$$

[1] ようは，ひとつ，ふたつ，と数えられるということだ．

となり，$\beta|h_n\rangle$ も λ_{h_n} を固有値とする固有ベクトルになる．固有ベクトルには複素数倍の不定性があるのだ．これを利用すれば，各固有ベクトルに適当な複素数をかけて調節することによって，$\langle h_n|h_n\rangle = 1$ とすることができる．例えば，

$$|h'_n\rangle = \frac{|h_n\rangle}{\sqrt{\langle h_n|h_n\rangle}}$$

とすれば，

$$\langle h'_n|h'_n\rangle = \frac{\langle h_n|h_n\rangle}{\langle h_n|h_n\rangle} = 1$$

となるから，あらたに固有ベクトルとして $|h'_n\rangle$ を採用すればその内積が 1 になる．このような操作を「1 に規格化する」などと言う．つまるところ，いつでも 1 に規格化できるのであるから，あらかじめそれを見越して折込済みであるとしてしまおう．こうすることによって直交性は

$$\langle h_m|h_n\rangle = \delta(h_m, h_n) = \begin{cases} 1 & (\text{where } |h_m\rangle = |h_n\rangle), \\ 0 & (\text{otherwise}). \end{cases}$$

とクロネッカーの δ をもちいてまとめることができる．これを正規直交関係と呼ぶ．またこの規格化された直交完全系を「正規直交完全系」「正規直交完全基底（ベクトル）」などとも言う．

したがって，先のエルミート内積は

$$\langle h_m|q\rangle = \sum_n \alpha_n \langle h_m|h_n\rangle = \alpha_m \langle h_m|h_m\rangle = \alpha_m$$

となる．これにより，$|q\rangle$ の基底ベクトルによる展開は

$$|q\rangle = \sum_n \alpha_n |h_n\rangle = \sum_n |h_n\rangle \langle h_n|q\rangle$$

とも記せる．ここから，ベクトル表記の上手い書き方をもちいて形式的に

$$\hat{1} = \sum_n |h_n\rangle \langle h_n|$$

と表すことができる[2]．$\hat{1}$ は「何もしない作用素」である[3]．

5.2 射影作用素，スペクトル分解

「射影作用素」というものを定義しよう．といってもそれは簡単なもので，基底ベクトル $|h_n\rangle$ への射影作用素は，

$$\hat{P}_{h_n} := |h_n\rangle \langle h_n|$$

と定義される．任意のベクトル $|q\rangle$ にこの射影作用素を作用させると

$$\hat{P}_{h_n} |q\rangle = |h_n\rangle \langle h_n|q\rangle$$

[2] 実はこの書き方をしたかったと，いうことがブラケット記法を使いたかった個人的理由である．数学的な内積の書き方ではこうはいかない．これは断然見やすい，と筆者は思うのだが，いかがだろうか？

[3] 単位行列を思い出そう．

となり，$|q\rangle$ から $|h_n\rangle$ に関わるもののみを取り出すことに相当する．この結果から $\langle h_n|q\rangle$ は $|h_n\rangle$「方向の成分[4]」であるとも言う．そして，射影作用素をすべての基底ベクトルに関して重ね合わせたもの

$$|q\rangle = \sum_n \hat{P}_{h_n}|q\rangle = \sum_n |h_n\rangle\langle h_n|q\rangle$$

が正規直交完全基底による展開である．

簡便的な記述をしてみれば，まず，

$$\hat{1} = \sum_n |h_n\rangle\langle h_n|$$

であり，これに対して $|q\rangle$ を両辺に右側から掛けると

$$\hat{1}|q\rangle = \sum_n |h_n\rangle\langle h_n|q\rangle$$

であり，$\hat{1}$ はなにも変換しない作用素であるから省いて

$$|q\rangle = \sum_n |h_n\rangle\langle h_n|q\rangle$$

を得る．ブラケット記法は簡便である．

エルミート作用素 $\hat{H}$ の固有値は実数であった．その全体を集合的に $\{\lambda_{h_n}\}$ とあらわそう．これを $\hat{H}$ の固有スペクトルという．そして特定の固有値方程式から固有ベクトル $\{\,|h_n\rangle\}$ を求めたり，固有スペクトル $\{\lambda_{h_n}\}$ を導きだしたりすることを「スペクトル分解」と名付けている．ここで述べたものは，丁寧に言えば,「離散スペクトル分解」である．

[4] 10 代のころ馴染んだベクトルの用語を用いた．

第 **6** 章　連続固有値の場合の正規直交展開，スペクトル分解

連続固有値の場合のエルミート作用素にもとづくスペクトル展開への道筋．この節での議論は多分に形式的である．理路は，可能な限り離散的な場合と同様にする，という動機に基づいている．

6.1　固有値が連続的な場合の正規直交完全系

つぎに固有値が連続的な場合を考えてみよう．エルミート作用素 $\hat{H}$，直交完全基底ベクトル $\{\,|\,h\rangle\}$，固有値方程式は変わらず

$$\hat{H}\,|h\rangle = \lambda_h\,|h\rangle$$

で表せる．この固有値 λ_h が「連続的」な場合を考えるのである.「離散的」な場合と違って，ひとつ，ふたつ，と数えることはできない．

繰り返しになるが，固有ベクトルは線形独立であった．つまり，ある固有値には，ひとつの固有ベクトルが対応するのであった．したがって，固有値が連続的であれば固有ベクトルも連続的になる．ゆえにもちろん基底ベクトルも連続である．

直交完全基底ベクトルを $\{\,|\,h\rangle\}$ と記そう．任意のベクトル $|q\rangle$ は直交完全基底ベクトルによる線形結合で表されるのであった．連続的な場合は，個別個別に記してもかならず「隙間」がでてしまう．なので，もはや和（$\sum$）では表せない．ここででてくるのが $\int$，つまり積分である．解析の力を借りねばならない．ということで，線形結合を

$$|q\rangle = \int_h \alpha_h\,|h\rangle\,dh$$

と展開できるとしてしまう[1]．ここで出てくる積分変数 dh には,「連続性の素」となっている変数を持ってこなければならない．今の場合，基底ベクトルを h という指標によって連続的に表現しているので，dh を用いている．そのうえで，$|h'\rangle$ と $|q\rangle$ のエルミート内積を形式的に計算してみると，

$$\langle h'|q\rangle = \int_h \alpha_h\,\langle h'|h\rangle\,dh$$

となることが見て取れる．

ここで，離散的な場合と同様な議論ができるようにしたい，という動機が生まれてくる．上記の式から $\alpha_{h'}$ が出てくるようにしたいのである．そのためには，

$$\langle h'|h\rangle = 0 \quad (\text{where } |h'\rangle \neq |h\rangle).$$

が必要である．直交性の表現である．

[1] $\sum$ から $\int$ への移り変わりは高校時代に経験がある．Reiman 和の極限，で積分を定義した例のあれである．

では，$|h'\rangle = |h\rangle$ の場合はどうか？一瞬これも積分展開して $|h'\rangle = \int_h \alpha_h |h\rangle\, dh$ とし，これと $|h'\rangle$ の内積をとろうという考えがかすめるけれど，それは無理である．基底ベクトルは各々が線形独立であったので，ある基底ベクトルを，その自分自身以外の基底ベクトルの線形結合であらわすことはできない．よってこの理路は成り立たない．

一方，ベクトルの複素数倍についての不定性の議論は，固有値方程式のみからの帰結であり固有値の離散性，連続性とは関係がない．なのでこの連続の場合でもなにも問題なく適用できる．したがって，規格化も折り込み済みであるとして

$$\langle h|h\rangle = 1$$

としてよい．

以上をまとめるにあたって，Dirac が用意してくれた δ 関数[2] の力を借りよう．δ 関数を用いれば（その意味内容はすべて δ 関数に任せるとして）連続の場合の正規直交関係を，

$$\langle h'|h\rangle = \delta(h'-h)$$

とする．離散的な場合と同様に，この正規直交関係を満たす $\{\,|\,h\rangle\}$ を,「正規直交完全系」,「正規直交完全基底（ベクトル）」と呼ぶ．この正規直交関係を用いることにより，

$$\langle h'|q\rangle = \int_h \alpha_h \langle h'|h\rangle\, dh = \int_h \alpha_h \delta(h'-h) dh = \alpha_{h'}$$

となり，$|q\rangle$ の基底ベクトルによる展開は

$$|q\rangle = \int_h \alpha_h |h\rangle\, dh = \int_h |h\rangle \langle h|q\rangle\, dh$$

とあらわせる．ベクトル表記の上手い書き方をもちいれば形式的に

$$\hat{1} = \int_h |h\rangle\, dh\, \langle h|$$

と表せる[3]．

6.2 射影作用素，スペクトル分解

「射影作用素」の定義も離散的な固有値の場合と同様である．基底ベクトル $|h\rangle$ への射影作用素は，

$$\hat{P}_h := |h\rangle \langle h|$$

と定義され，任意のベクトル $|q\rangle$ にこの射影作用素を作用させると

$$\hat{P}_h |q\rangle = |h\rangle \langle h|q\rangle$$

となり，$|q\rangle$ から $|h\rangle$ 方向のもののみを取り出すことに相当する．$\langle h|q\rangle$ は $|h\rangle$ 方向の「成分」に他ならないことも同様．この射影作用素をすべての基底ベクトルに関して積分で重ね合わせたもの

$$|q\rangle = \int \hat{P}_h |q\rangle\, dh = \int |h\rangle \langle h|q\rangle\, dh$$

[2] クロネッカーの δ の連続版と思っておいてそうは困らない．留意するべきことは最後には必ず積分とセットになるということである．とにかく普通の関数ではないので「超関数」と呼ばれる．また興味深いいろいろな性質をもっている．正確な定義，種々の性質については後藤らの本 [5, p.254–260] が参考になる．

[3] この積分の書き方はメシア [1] 流である．

が，正規直交完全基底による展開となる．

簡便的記述も同様で，まず

$$\hat{1} = \int_h |h\rangle \, dh \, \langle h|$$

であり，$|q\rangle$ を両辺に右側から掛けて $\hat{1}$ を省けば

$$|q\rangle = \int_h |h\rangle \, dh \, \langle h|q\rangle$$

となる．

この連続固有値の場合でもスペクトル分解という言葉の意味はかわらない．ただ固有スペクトルが $\{\lambda_h\}$ と連続量となっていることが異なっている．

第7章　ベクトルと関数の関係：モデル（表現）を通して

抽象化したベクトルのひとつの具体化としての行列表現モデル．まず自然数モデルを構築し，そこから実数モデルへ敷衍．表現 $\{\,|x\rangle\}$．目的は，ベクトルと実変数関数の結びつけにある．

7.1　実数対応モデルの構築

7.1.1　前準備：自然数モデル

まず行列で表現しやすい自然数のモデルを考えよう．n を自然数として，ベクトル $|n\rangle$ を

$$|n\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ \vdots \\ 0 \\ 1 \\ 0 \\ \vdots \end{pmatrix} \qquad \text{(1 は，上から数えて } n \text{ 番目に現れる．0 番目も考慮することに注意)}$$

とモデル化（表現）することにする.「列ベクトル」という懐かしい表現形式である．具体例をあげると，

$$|0\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ \vdots \end{pmatrix}, \quad |1\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \\ \vdots \end{pmatrix}, \quad |2\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \\ \vdots \end{pmatrix}, \quad \cdots.$$

エルミート内積は，この列ベクトルを転置しかつ複素共役をとった「行ベクトル（これも懐かしい）」との積と定める．今の場合はすべて実数（0,1）なので複素共役をとっても変わらない．書き下せば，

$$\langle m|n\rangle = \begin{pmatrix} 0 & \cdots & 0 & 1 & 0 & \cdots \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ \vdots \\ 0 \\ 1 \\ 0 \\ \vdots \end{pmatrix}$$

となる．ここから直ちに，

$$\langle m|n\rangle = \delta(m,n)$$

が導かれる[1].

　さらにここに次の作用素 $\hat{n}$ を導入しよう:

$$\hat{n} = \begin{pmatrix} 0 & & & & & \\ & 1 & & & & \\ & & 2 & & & \\ & & & \ddots & & \\ & & & & n & \\ & & & & & \ddots \end{pmatrix}.$$

これを作用させると,

$$\hat{n}\,|n\rangle = n\,|n\rangle,$$
$$\hat{n}\,|m\rangle = m\,|m\rangle$$

となる[2].エルミート内積演算を計算すると,

$$\langle m|\hat{n}|n\rangle = n\,\langle m|n\rangle = n\delta(m,n),$$
$$\langle n|\hat{n}|m\rangle = m\,\langle n|m\rangle = m\delta(n,m).$$

クロネッカーの δ をぐっとにらむと

$$\langle m|\hat{n}|n\rangle = \langle n|\hat{n}|m\rangle$$

である.ここまでの話は,成分すべて実数なので内積も実数.したがって,

$$\langle m|\hat{n}|n\rangle^* = \langle m|\hat{n}|n\rangle$$

でもあるから,これより $\hat{n}$ はエルミート作用素であることも見て取れた.つまり,$\{\,|\,n\rangle\}$ は正規完全直交系なのである[3].まとめると,正規直交性,完全性,射影作用素はおのおの次の通り:

$$\langle m|n\rangle = \delta(m,n),$$
$$\hat{1} = \sum_n |n\rangle\,\langle n|,$$
$$\hat{P}_n = |n\rangle\,\langle n|.$$

7.1.2　実数モデル

　x, x', x'' などは実数をあらわすとして,先の自然数モデルを実数に拡張することを試みよう.$|n\rangle$ の列ベクトルによる表現は,縦に自然数が並んでいるものであった.これを縦に実数が並んでいるもの(r 軸と呼ぼう)

[1] 成分が有限個,例えば 3 個として,$|0\rangle, |1\rangle, |2\rangle$ おのおののエルミート内積を計算すると「確証」が得られよう(筆者は書くのをさぼってしまった).「例示は理解の試金石」と結城 [4] も言っている.けだし至言である.

[2] これも「例示は理解の試金石」で確証をうるべし.

[3] 学生時代に馴染んだユークリッド空間(座標空間)でのベクトルは,この成分が 2 個や 3 個のものなのであった(2 次元,3 次元とも言っていた.ただし内積の定義にわざわざエルミート内積条件をつけなかったが,すべて実数を対象にしていたので問題はなかった.).たとえば 2 次元の場合,x 軸方向の単位ベクトルは $\vec{e}_x$ と書いたが,それは $\vec{e}_x = |0\rangle$ と表現できるのである.その場合には,y 軸の単位ベクトルは,$\vec{e}_y = |1\rangle$. ここでの議論は n 次元のベクトル空間の表現であるとみてもいい.

と考えてみる．そして $|x\rangle$ を

$$
|x\rangle = \begin{pmatrix} \vdots \\ \vdots \\ 1 \\ \vdots \\ \vdots \end{pmatrix}
$$

と表現することにする．この表現は，

　1 は，実数 r 軸上で，$r=x$ となる「点」に乗っている．他の点にはすべて 0 が乗っている

ということを意図したものである．

　エルミート内積も同じように表現する．

$$
\langle x'|x\rangle = \begin{pmatrix} \cdots & \cdots & \cdots & 1 & \cdots \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \vdots \\ \vdots \\ 1 \\ \vdots \\ \vdots \end{pmatrix}
$$

　また，作用素 $\hat{x}$ も $\hat{n}$ を拡張して，対角線上に実数がならんでおり，対角線以外の部分はすべて 0 であるとイメージし，

$$
\hat{x} = \begin{pmatrix} \ddots & & & \\ & \ddots & & \\ & & \ddots & \\ & & & \ddots \end{pmatrix}
$$

と表す．

　一般に行列表現は，自然数モデルで見たように，個別離散的にあらわすものに向いている表現である．ここではその行列表現を，実数というべったりと連続している様相を持つものに拡張して，あくまでも便宜的に「行列」的に記した．イメージの中では，各「点」は独立して存在しその「点」がべったりと連なっているという直感のもとに行列的な記述をしたということである．内積は同一の点どうしで行われるし，作用素も同一の点にのみ作用する，というイメージである[4]．

　ここからエルミート内積に関して

$$
\langle x'|x\rangle = \delta(x'-x)
$$

と正規直交性を仮定してしまおう．仮定するとは言ってもそれなりに理由もある．先のエルミート内積の表現から，$x' \neq x$ の場合には $\langle x'|x\rangle = 0$ は想像しやすい．「点」が異なっているのだから値を持つ部分は存在しない．一方，$x' = x$ の場合には，素直にいけば 1 になると想像できる．しかし，各々無限個の積を「足し合わせる」ということを考慮せねばならない．ゆえに，δ 関数で表現しておくのである[5]

[4]ただし連続で無限．それはつねに留意していたい．

[5]都合のよい話であるが，このご利益はかならずある．

$\hat{x}$ の作用は，

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

となる．ここから，

$$\langle x''|\hat{x}|x'\rangle = x'\,\langle x''|x'\rangle = x'\delta(x''-x'),$$
$$\langle x'|\hat{x}|x''\rangle = x''\,\langle x'|x''\rangle = x''\delta(x'-x'')$$

となり，δ 関数の性質をぐっとにらむと，

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

となる．すべて実数であったので複素共役をとっても何もかわならない．したがって，

$$\langle x''|\hat{x}|x'\rangle^* = \langle x'|\hat{x}|x''\rangle$$

となり，これより $\hat{x}$ もエルミート作用素であることも見て取れた．それゆえ，この固有ベクトル全体 $\{\,|x\rangle\}$ が正規完全直交基底ベクトルであることが保証されたのである．

この基底ベクトル $\{\,|x\rangle\}$ の正規直交性，完全性，射影作用素を記せば，

$$\langle x'|x\rangle = \delta(x'-x),$$
$$\hat{1} = \int |x\rangle\,dx\,\langle x|,$$
$$\hat{P}_x = |x\rangle\,\langle x|$$

となる．

7.2 ベクトルの関数表現

これまでの議論で，正規直交完全基底ベクトル $\{\,|x\rangle\}$ を手に入れることができた．これを使ってベクトル $|f\rangle(\in V_H)$ を表現してみよう．$|f\rangle$ をこの基底ベクトルで展開すれば，

$$|f\rangle = \int |x\rangle\,dx\,\langle x|f\rangle$$

となる．エルミート内積 $\langle x|f\rangle$ は，x ごとに決まる．この物言いは「x の関数」の定義そのものだ．したがってお馴染みの関数的な記法を用いて，$\langle x|f\rangle =: f(x)$ としてよいだろう．結果，$|f\rangle$ の展開は，

$$|f\rangle = \int |x\rangle\,dx\,f(x)$$

と表せる[6]．このように，$|f\rangle$ を $f(x)$ として表現すること，これを「$\{\,|x\rangle\}$ に依る表現」（簡略化するときは「表現 $|x\rangle$」）と呼ぶ．$|f\rangle$ と $f(x)$ が 1 対 1 に対応していることは明らかだ[7]．

[6] $f(x)$ であるが，射影作用素を用いると，$\hat{P}_x\,|f\rangle = |x\rangle\,\langle x|f\rangle = |x\rangle\,f(x)$ であり，射影作用素の意味を振り返ると，$|x\rangle$ 方向の成分が $f(x)$ であるということを意味している．正規直交基底ベクトル $|x\rangle$ が実数空間上の点 x と 1 対 1 対応していることは先の実数モデルの構築より明らかであるから，$|x\rangle$ 方向の成分が $f(x)$ であるということは，点 x の上に $f(x)$ が乗っかっている，とイメージできる．これは関数そのものだ（グラフを思い描けばよろしい）．

[7] いま，$\langle x|f\rangle = g(x)$ だったとする．すると，$g(x) = f(x)$ となり，それは異なるものではない．つまり 1 対 1 の対応としかなり得ない，という導出はどうだろうか．

7.3 $|x\rangle$ のみで構成される作用素の表現

表現 $|x\rangle$ を用いることにより，ベクトルと関数に

$$|f\rangle \quad \longleftrightarrow \quad f(x)$$

という 1 対 1 対応を生成できた．では，作用素はどうか？作用素の $|x\rangle$ による表現はどうなるか？これがこの節の課題である．

まず，$\hat{x}$ についてみてみる．$|f\rangle$ に $\hat{x}$ を作用させると，$|x\rangle$ は固有値 x の固有ベクトルであったので，

$$\hat{x}|f\rangle = \hat{x}\int |x\rangle\, dx\, f(x) = \int \hat{x}|x\rangle\, dx\, f(x) = \int x|x\rangle\, dx\, f(x)$$

と表せる．さらに，x は実数であったので積の中で自由に移動できるから[8]最終的に，

$$\hat{x}|f\rangle = \int |x\rangle\, dx\, (xf(x))$$

となり，次の 1 対 1 対応関係が生まれてくる:

$$\hat{x}|f\rangle \quad \longleftrightarrow \quad xf(x).$$

ここでひとつ作用素を具体化してその働きをみてみよう．α,β,γ を任意の複素数として，作用素 $\hat{x}$ のみから構成される作用素 $\hat{A}$ を

$$\hat{A}(\hat{x}) := \alpha\hat{x}\hat{x} + \beta\hat{x} + \gamma$$

としてみる．$|f\rangle$ に作用させると，

$$\begin{aligned}
\hat{A}(\hat{x})|f\rangle &= \hat{A}(\hat{x})\int |x\rangle\, dx\, f(x) \\
&= \left(\alpha\hat{x}\hat{x} + \beta\hat{x} + \gamma\right)\int |x\rangle\, dx\, f(x) \\
&= \int \left(\alpha\hat{x}\hat{x} + \beta\hat{x} + \gamma\right)|x\rangle\, dx\, f(x) \\
&= \int \left(\alpha\hat{x}\hat{x}|x\rangle + \beta\hat{x}|x\rangle + \gamma|x\rangle\right) dx\, f(x) \\
&= \int \left(\alpha x\hat{x}|x\rangle + \beta x|x\rangle + \gamma|x\rangle\right) dx\, f(x) \\
&= \int \left(\alpha x^2|x\rangle + \beta x|x\rangle + \gamma|x\rangle\right) dx\, f(x) \\
&= \int |x\rangle\, dx\, \left(\alpha x^2 + \beta x + \gamma\right) f(x)
\end{aligned}$$

と計算できる．ここで，$\underline{A}(x) := \alpha x^2 + \beta x + \gamma$ とおいて書き直すと，

$$\hat{A}(\hat{x})|f\rangle = \int |x\rangle\, dx\, \underline{A}(x) f(x)$$

となり，いままでの議論と同様に，

$$\hat{A}(\hat{x})|f\rangle \quad \longleftrightarrow \quad \underline{A}(x)f(x)$$

という 1 対 1 対応関係が生まれる．これを思い切って敷衍して，次のように言い切ってみる:

[8] 作用素はあくまでベクトルに作用するものであったので，ベクトルの前からは移動できない．$\hat{A}|q\rangle$ を $|q\rangle\hat{A}$ などと書き換えることはできないのである．

作用素 $\hat{x}$ からのみ構成される任意の作用素 $\hat{X}(\hat{x})$ の $|x\rangle$ による表現は，$\hat{X}$ 内の $\hat{x}$ を x に変えた $\underline{X}(x)$ である．

《正直にいうと，この命題の正当性を筆者はいまだ証明できずにいる．たとえば，$1/\hat{x}$ のようなものはどう考えればいいのか分かっていない．また $\underline{X}(x) = d/dx$ のような微分に対応する $\hat{X}(\hat{x})$ は，記号的には $\hat{X}(\hat{x}) = d/d\hat{x}$ となるが，それはいったいいかなるものなのか，とかも分かっていない[9]．これは何らかの方法で導出できるものであろうか（導出のための前提が足りていない？）．それとも「仮定（要請）」してしまってかまわないものなのか‥‥.》

7.4 エルミート内積の表現

表現 $|x\rangle$ でエルミート内積を表現してみよう．計算は次の通り:

$$\begin{aligned}
\langle g|f\rangle &= \langle g| \int |x\rangle\, dx\, f(x) \\
&= \int \langle g|x\rangle\, dx\, f(x) \\
&= \int \langle x|g\rangle^*\, dx\, f(x) \\
&= \int g^*(x) f(x) dx.
\end{aligned}$$

このようにして，エルミート内積の表現が得られるのである．練習のために先の $\hat{A}(\hat{x})$ を用いた例もみてみよう:

$$\begin{aligned}
\langle g|\hat{A}(\hat{x})|f\rangle &= \langle g| \int |x\rangle\, dx\, \underline{A}(x) f(x) \\
&= \int \langle g|x\rangle\, dx\, \underline{A}(x) f(x) \\
&= \int \langle x|g\rangle^*\, dx\, \underline{A}(x) f(x) \\
&= \int g^*(x) \underline{A}(x) f(x) dx.
\end{aligned}$$

[9] メシア [1] の p.275 あたりの記述がこの命題に言及しているようなのだが十分に理解できていない．またたさらに，この微分 $\underline{X}(x) = d/dx$ は フーリエ解析で大活躍するものであるのだけれども‥‥.

第8章　固有関数，関数空間

関数を主体にみる．記法を通じてベクトルと関数が 1 対 1 に対応．関数がベクトル空間の要素にもなる．関数空間，固有関数．

8.1　ベクトルと関数の表記の関係性

具体的な例を見ていこう．いままでの議論から，表現 $|x\rangle$ のもとで，ベクトルと関数，作用素には

$$|f\rangle \quad \longleftrightarrow \quad \langle x|f\rangle = f(x),$$
$$\hat{A}(\hat{x})|f\rangle \quad \longleftrightarrow \quad \underline{A}(x)f(x)^{1},$$

という 1 対 1 の対応関係があることが分かった．さらにエルミート内積は

$$\langle g|f\rangle = \int g^*(x)f(x)dx$$

と表現できた． これらの関係をもとに，種々の具体例を表記してみよう．なおここからは,「$\longleftrightarrow$」は 1 対 1 対応を,「$\Longleftrightarrow$」は同値関係をあらわすものとして区別して使っていく．

8.1.1　ベクトルと関数

ベクトルと関数の対応関係から，$\langle x|f\rangle = f(x)$ となる $|f\rangle$ を

$$|f\rangle = |f(x)\rangle$$

と書いても良いことは素直に認められよう． 2 つのベクトル $|f)\rangle, |g\rangle$ が等しいということを関数の方にまで適用すれば，相当に関して次の同値関係を得る:

$$|f\rangle = |g\rangle \quad \Longleftrightarrow \quad |f(x)\rangle = |g(x)\rangle \quad \Longleftrightarrow \quad f(x) = g(x)$$

$f(x) := e^{inx}$ とした場合には，次のような記述になる:

$$|f\rangle = |e^{inx}\rangle \quad \longleftrightarrow \quad \langle x|f\rangle = e^{inx}.$$

これを踏まえてすこし複雑な場合を考えてみよう．

$$|f(x)\rangle = \sum_{n=-\infty}^{\infty} |e^{inx}\rangle \langle e^{inx}|f(x)\rangle$$

[1] 23 ページで思い切って言い切った作用素に関する言説をそのまま採用していく．

に対して $|x\rangle$ との内積をとると，

$$\langle x|f(x)\rangle = \sum_{n=-\infty}^{\infty} \langle x|e^{inx}\rangle \langle e^{inx}|f(x)\rangle = \sum_{n=-\infty}^{\infty} e^{inx} \langle e^{inx}|f(x)\rangle$$

であり，$|f(x)\rangle \longleftrightarrow \langle x|f(x)\rangle$ であったから，

$$|f(x)\rangle = \sum_{n=-\infty}^{\infty} |e^{inx}\rangle \langle e^{inx}|f(x)\rangle \quad \longleftrightarrow \quad f(x) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} e^{inx} \langle e^{inx}|f(x)\rangle$$

似たような例をもう一つ．

$$|f(x)\rangle = \frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty} |e^{i\omega x}\rangle \langle e^{i\omega x}|f(x)\rangle \, d\omega$$

に対して $|x\rangle$ との内積をとると，

$$\langle x|f(x)\rangle = \frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty} \langle x|e^{i\omega x}\rangle \langle e^{i\omega x}|f(x)\rangle \, d\omega$$

であるので，

$$|f(x)\rangle = \frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty} |e^{i\omega x}\rangle \langle e^{i\omega x}|f(x)\rangle \, d\omega \quad \longleftrightarrow \quad f(x) = \frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty} e^{i\omega x} \langle e^{i\omega x}|f(x)\rangle \, d\omega.$$

8.1.2 エルミート内積

エルミート内積にも適用する．$|g\rangle = |g(x)\rangle = |e^{i\alpha x}\rangle$，　$|f\rangle = |f(x)\rangle = |e^{i\beta x}\rangle$ とすると，

$$\langle g|f\rangle = \langle g(x)|f(x)\rangle = \int e^{-i\alpha x} e^{i\beta x} \, dx.$$

まえの例を用いれば，

$$\langle e^{i\omega x}|f(x)\rangle = \int e^{-i\omega x} f(x) \, dx.$$

8.1.3 作用素

$\hat{x}$ のみからなる作用素についても簡便化してみよう．まず先の作用素の例

$$\hat{A}(\hat{x}) := \alpha\hat{x}\hat{x} + \beta\hat{x} + \gamma$$

をもちいてみよう．対応関係は

$$\left(\hat{A}(\hat{x})|f(x)\rangle \longleftrightarrow \underline{A}(x)f(x)\right) \quad \Longleftrightarrow \quad \left((\alpha\hat{x}\hat{x} + \beta\hat{x} + \gamma)|f(x)\rangle \longleftrightarrow (\alpha x^2 + \beta x + \gamma)f(x)\right)$$

であった．さてこの $\underline{A}(x)f(x) = (\alpha x^2 + \beta x + \gamma)f(x)$ であるが，これもひとつの関数に他ならない．よって今それを $g(x) := \underline{A}(x)f(x)$ とおいてみると，この対応関係は

$$\hat{A}(\hat{x})|f(x)\rangle \longleftrightarrow g(x)$$

である．そして $|g(x)\rangle \longleftrightarrow g(x)$ という対応もなりたつので，

$$\hat{A}(\hat{x})|f(x)\rangle \longleftrightarrow g(x) \longleftrightarrow |g(x)\rangle$$

すなわち，

$$\hat{A}(\hat{x})\,|f(x)\rangle\rangle = |g(x)\rangle\rangle \quad \Longleftrightarrow \quad \hat{A}(\hat{x})\,|f(x)\rangle\rangle = |\underline{A}(x)f(x)\rangle\rangle$$

つまり,「作用素の対応物をベクトルの中に入れる」ことも可能となるのである．これをまとめると，

$$\hat{X}(\hat{x}) \longleftrightarrow \underline{X}(x) \quad \text{の対応があるとき，} \quad \hat{X}(\hat{x})\,|f(x)\rangle\rangle = |\underline{X}(x)f(x)\rangle\rangle \quad \text{がなりたつ．}$$

ということになる．これにより，次のような表記も可能になる:

$$\frac{d}{d\hat{x}}\,|f(x)\rangle\rangle = \left|\frac{d}{dx}f(x)\right\rangle\!\!\right\rangle.$$

8.2　固有関数，固有関数展開

立場を少し変えてみよう．いままではベクトルを中心に据えて来た．そしてそのもとで，ベクトル，作用素，内積などがどのように「関数的」に表現できるかをみてきた．そしてそれらの性質をすべて引き継いだ上で，ベクトルに代わって関数を中心に据えて考えるのである．それを「エルミート内積が定義された関数空間」と呼ぶ．そして作用素 $\hat{A}$ に取って代わるものが $\underline{A}$ であり，場合によっては「演算子」などと呼んだりもする．この立場では固有ベクトルは「固有関数」という名前になる．

今，$\{\,|\,q_n\rangle\,|\,n \text{ is integer}\}$ が離散固有値に対する正規直交完全基底ベクトルであるとしよう．任意のベクトル $|f\rangle$ はこの基底ベクトルで展開できて，

$$|f\rangle = \sum_n |q_n\rangle\,\langle q_n|f\rangle$$

となる．これは「表現 $|q_n\rangle$」である．$\langle x|q_n\rangle = q_n(x)$ であるから,「表現 $|q_n(x)\rangle\rangle$」ともいえる．全体に対して $|x\rangle$ とのエルミート内積をとると，

$$\begin{aligned}
\langle x|f\rangle = \sum_n \langle x|q_n\rangle\,\langle q_n|f\rangle \quad &\Longleftrightarrow \quad f(x) = \sum_n q_n(x)\,\langle q_n|f\rangle \\
&\Longleftrightarrow \quad f(x) = \sum_n q_n(x)\left(\int q_n(x)^* f(x)\,dx\right)
\end{aligned}$$

と表現できる．この時の $q_n(x)$ を固有関数と呼び，$q_n(x)$ で展開されたものを $q_n(x)$ による固有関数展開という．

連続固有値の場合も同様で，その正規直交完全基底ベクトルを $\{\,|\,p\rangle\}$ とすると，

$$|f\rangle = \int |p\rangle\,dp\,\langle p|f\rangle$$

であるから，

$$\begin{aligned}
\langle x|f\rangle = \int \langle x|p\rangle\,dp\,\langle p|f\rangle \quad &\Longleftrightarrow \quad f(x) = \int p(x)\,dp\,\langle p|f\rangle \\
&\Longleftrightarrow \quad f(x) = \int p(x)\,dp\left(\int p(x)^* f(x)\,dx\right)
\end{aligned}$$

と $p(x)$ で固有関数展開される．ただし，積分変数が dp であることに留意．

8.3　ベクトルと関数再び

ベクトルから始めて，ベクトル空間を定義し，作用素とエルミート内積を導入してエルミート内積空間 V_H を構成して来た．これまで見てきたように，V_H の登場人物と実数変数関数の間には，表現 $|x\rangle$ を介して

$$
\begin{aligned}
&|f\rangle = |f(x)\rangle \quad \longleftrightarrow \quad \langle x|f\rangle = f(x),\\
&\hat{A}(\hat{x})|f\rangle \quad \longleftrightarrow \quad \underline{A}(x)f(x),\\
&\langle g|f\rangle = \int g^*(x)f(x)dx
\end{aligned}
$$

という関係があるのだった．そしてベクトルと関数，作用素と演算子の間は自由自在に行き来できることも分かった．場合と目的と必要に応じて適当な表現をもちいればよいだろう．

しかしながら，線型代数的な記述のみではどうにも抽象化されすぎている感もいなめない．それになにより，ある量の変化を直接的にあらわす関数の方が「リアル」でもある．解析的な操作（微分，積分など）については関数表記の方が断然便利であり分かりやすい．

関数にベクトル的な性質（直交したり，展開できたり）を見いだし，それの背景に線形代数的な構造をみて論を進めるというのが筋なのかもしれない．フーリエ解析や量子力学ははその格好の題材なのだろう．

ということで，ここに記述したことをある種の前提として,「フーリエ解析備忘録」（別紙）に進みたい．

あとがき

本書は，始めフーリエ変換・フーリエ級数についての事柄ををまとめていたノート（『フーリエ解析備忘録』[3]）のひとつの章として書き始めていたものであった．書き始めていくうちにそれなりの量になってしまったことと，本題のフーリエ解析とはちょっと焦点がずれるものであることがわかって来たので，この様に別のドキュメントとして独立させせることにした．

とまあ書いてはみたものの，すくなからず不満な点がある．なかでも、本文 4.3 節のところでもふれたように，固有ベクトルの集合の「完全性」については不問にしてしまったことである．いまだその完全性を導出する (証明する？）道筋がみえていない．宿題である。さらに,「有限次元のベクトル空間の場合には固有値が離散的になる」ということも今後の課題として放置してしまった．宿題が増えた。

本書を書くにあたっては,『メシア量子力学１』 [1] の

第７章：量子論の形式的一般論：A. 数学的な枠組み
第８章：量子論の形式的一般論：B. 物理現象の記述

を大いに参考にした．学生時代に講義でお世話になった本でもあるので，非常に懐かしく，かつ、当時どの程度理解できていたのかを想像し、冷や汗かきながらの執筆となった．またそれと同時に，清水著『新版 量子論の基礎』 [6] も参考にした．この本は大変有益であった．学生時代にこの本があったらなぁ，と何度も思った．

TEX については，奥村著『[改訂第 5 版] $\LaTeX 2_\varepsilon$ 美文書作成入門』 [2] と生田著『$\LaTeX 2_\varepsilon$ 文典』 [7] に大変お世話になった．この 2 冊がなければここまでは書けなかっただろう．

上記著者の皆様に感謝致します．そして Internet と Internet 上に有意義なコンテンツを載せておられるたくさんの方々にも．

参考文献

[1] A. メシア. 『メシア量子力学 1 』. 東京図書株式会社, 1971. （第 8 刷（1980）を参照した）.

[2] 奥村 晴彦. 『[改訂第 5 版] $\LaTeX 2_\varepsilon$ 美文書作成入門』. 株式会社技術評論社, 第 5 版, 2012. （第 5 版第 4 刷（2012）を参照した）.

[3] 久島 広幸. 『フーリエ解析備忘録』. http://www.hisasima.jp/studynote/fourier.pdf, 2014.

[4] 結城 浩. 『数学ガール』シリーズ. ソフトバンク クリエイティブ株式会社, 2007 - 2012.

[5] 後藤 憲一, 山本 邦夫, 神吉 健. 『詳解 物理／応用 数学演習』. 共立出版株式会社, 初版, 1979. （初版第 1 刷（1979）を参照した）.

[6] 清水 明. 『新版 量子論の基礎』. 株式会社　サイエンス社, 2004.

[7] 生田 誠三. 『$\LaTeX 2_\varepsilon$ 文典』. 株式会社朝倉書店, 初版, 2007. （初版第 7 刷（2007）を参照した）.