# ブラケット記法の機微— 双対構造と内積構造


北野 正雄

京都大学工学研究科


2013 年 1 月 5 日

第 2 回 QUATUO 研究会

(質問, 議論を反映した修正版)

# Dirac のブラケット記法 $\langle\psi|\hat{A}|\chi\rangle$

- 量子論における標準言語
- 基底に依存しない記述が可能 (成分より実体)
- 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

# Dirac

*In mathematical thoeries the question of notation, while not of primary importance, is yet worthy of careful consideration, since a good notation can be of great value in helping the development of a theory, by making it easy to write down those quantities or combination of quantities that are important, and difficult or impossible to write down those that are unimportant.*

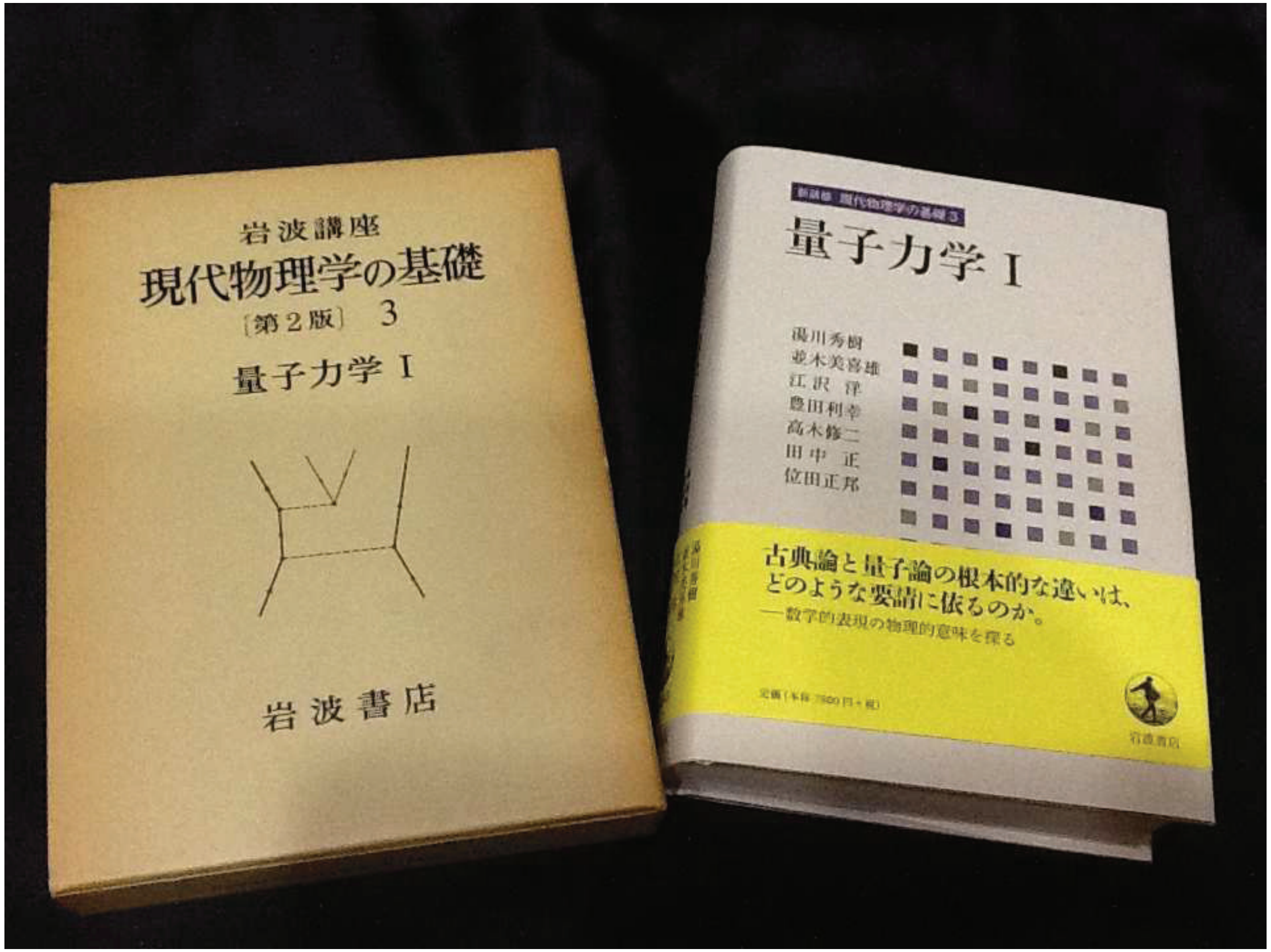
P.A.M. Dirac: “A new notation for quantum mechanics,”
Math. Proc. Cambridge Phil. Soc. **35**, 416 (1939)

# ブラケット記法の現実

- 量子論の文献の多くはブラケット記法を採用
  — 特に量子情報関係では不可欠
- 学部生向けの量子論の教科書で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.
  — 初学者には少し難しいという親心？
- ブラケット記法の普及を妨げる「誤解」の存在
  — 教える側の問題 (記法の意味が十分理解されていない)

# 誤解の典型例

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, 復刻版 2011) pp. 197–199.



# 岩波本 第 4 章 198 ページ

- 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.」

量子論にはエルミートでない演算子も登場する (ユニタリ演算子や生成/消滅演算子). これらに対して, ブラケット記法に何か不都合が?

# 誤解の原因

- 197 ページの最後の行:

  「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, $\langle\psi|\{\hat{A}|\chi\rangle\}$ 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 $\langle\psi|\hat{A}\chi\rangle = \langle\hat{A}^\dagger\psi|\chi\rangle = \langle\chi|A^\dagger\psi\rangle^*$．」

- 式 (4.2.6) を根拠に, 198 ページ下から 11 行:

  「演算子 $\hat{A}$ が自己共役 $\hat{A}^\dagger = \hat{A}$ ならば, (4.2.6) は簡単に $\langle\psi|\hat{A}|\chi\rangle$ として誤解を生じない．この $\hat{A}$ は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のである．Dirac の記号法が力を発揮するのはこういうときだ．」

# 誤りの修正

- 197 ページの最後の行:

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

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

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

- 式 (4.2.6) を根拠に, 198 ページ下から 11 行:

  「演算子 $\hat{A}$ が自己共役$\cancel{\hat{A}^\dagger = \hat{A}}$ ~~ならば,~~ かどうかによらず, (4.2.6) は簡単に $\langle\psi|\hat{A}|\chi\rangle$ として誤解を生じない．この $\hat{A}$ は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のである．~~Dirac の記号法が力を発揮するのはこういうときだ.~~」

# 関連する誤り (1)

- 198 ページ, 上 5 行 : $(\alpha\hat{A})^\dagger = \alpha^*\hat{A}^\dagger$ を示す部分に誤りがある.

$$
\begin{aligned}
\langle\psi|\{\alpha\hat{A}|\chi\rangle\} &= \alpha\{\langle\psi|\hat{A}^\dagger\}|\chi\rangle \\
&= \{\langle\psi|(\hat{A}^\dagger\alpha^*)\}|\chi\rangle)
\end{aligned}
$$

- 中辺, 右辺が正しくない. 修正すると,

$$
\begin{aligned}
\langle\psi|\{\alpha\hat{A}|\chi\rangle\} &= \alpha\{\langle\psi|\hat{A}\}|\chi\rangle \\
&= \alpha(\langle\chi|\hat{A}^\dagger|\psi\rangle)^* = \langle\chi|\alpha^*\hat{A}^\dagger|\psi\rangle^*
\end{aligned}
$$

左辺が $\langle\chi|(\alpha\hat{A})^\dagger|\psi\rangle^*$ に等しいことを考慮すると, $(\alpha\hat{A})^\dagger = \alpha^*\hat{A}^\dagger$ である.

# 関連する誤り (2)

- 198 ページ, 上 13 行 : $\hat{A}|\psi\rangle$ の絶対値に関する式

$$\langle\psi|\{\hat{A}^\dagger\hat{A}|\psi\rangle\} = \{\langle\psi|\hat{A}\}\{\hat{A}|\psi\rangle\} = ||\hat{A}|\psi\rangle||^2 \geq 0$$

- 2 番目の式が誤っている.

$$\langle\psi|\{\hat{A}^\dagger\hat{A}|\psi\rangle\} = \{\langle\psi|\hat{A}^\dagger\}\{\hat{A}|\psi\rangle\} = ||\hat{A}|\psi\rangle||^2 \geq 0$$

のように修正すべきである.

# 関連する誤り (3)

- 199 ページ, 上 12 行. 自己共役演算子の固有値に関して:
  「異なる固有値に属するする固有ベクトルがあれば直交する. すなわち, $\nu$ と $\nu'$ が同じでも異なっても

  $$\langle a'', \nu' | a', \nu \rangle = 0, \quad a' = a'' \text{ のとき.}$$

  これは, 自己共役な $\hat{A}$ はケット側に作用させてもブラ側に作用させてもよいことから

  $$\begin{aligned} \langle a'', \nu' | \hat{A} | a', \nu \rangle &= a' \langle a', \nu' | a'', \nu' \rangle \\ &= a'' \langle a', \nu' | a'', \nu' \rangle \end{aligned}$$

  を得て, 右辺同士の差をつくれば証明される.」
- 自己共役でない演算子もケット側にも, ブラ側にも作用させることができる. むしろ, 重要なことは, ブラ $\langle a', \nu|$ が左から作用する演算子 $\hat{A}$ の固有値 $a'$ の固有ブラになっていることである. すなわち, 自己共役性を利用すると, $\hat{A}|a', \nu\rangle = a'|a', \nu\rangle$ から $\langle a', \nu|\hat{A} = a'\langle a', \nu|$ がいえる.

# 関連する誤り (4)

- 195 ページ, 11 行目
  「~~これは~~ブラ記法では~~書きにくいが~~, $\alpha|\psi\rangle$ の共役~~を仮に~~$\cancel{\{\langle\psi|\alpha\}}$~~と書けば,~~$\cancel{\{\langle\psi|\alpha\} = \alpha^*\langle\psi|}$ は $\alpha^*\langle\psi|$ となる．そして

$$f_{\alpha|\psi\rangle+\beta|\varphi\rangle}(|\chi\rangle)\,\cancel{\{\langle\psi|\alpha+\langle\varphi|\beta\}|\chi\rangle} = \alpha^*\langle\psi|\chi\rangle + \beta^*\langle\varphi|\chi\rangle \tag{4.1.4}$$

  となるが, この事実を “(4.1.3) は $|\psi\rangle$ の関数と見たとき反線形である” と言い表す, 汎関数 $\langle\psi|$ が $\alpha|\chi\rangle$ でとる値をていねいに $\langle\psi|\{\alpha|\chi\rangle\}$ と書けば, $\langle\psi|\{\alpha|\chi\rangle\} = \cancel{\{\langle\psi|\alpha^*\}|\chi\rangle}\ f_{\alpha^*|\psi\rangle}(|\chi\rangle)$ となることに注意しよう．」

# 誤解の原因 (再掲)

- 197 ページの最後の行:

  「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, $\langle\psi|\{\hat{A}|\chi\rangle\}$ 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 $\langle\psi|\hat{A}\chi\rangle = \langle\hat{A}^\dagger\psi|\chi\rangle = \langle\chi|A^\dagger\psi\rangle^*$. 」

- 赤字 の部分と違って, 青字の部分には誤りがない.
- $\langle\hat{A}^\dagger\psi|$ のように, ブラやケットの中に演算子を含める記法を内積記法とブラケット記法の「折衷記法」とよぶことにする.

# 折衷記法

- 内積記法とブラケット記法の折衷

$$
\begin{aligned}
(\psi,\, \chi) &= \langle \psi | \chi \rangle \\
(\psi,\, \hat{A}\chi) &= \langle \psi | \hat{A}\chi \rangle \\
(\hat{B}\psi,\, \chi) &= \langle \hat{B}\psi | \chi \rangle
\end{aligned}
$$

ブラケット記法が内積記法の変形だと思えば，自然な記法である．

# 記法の比較

- 3 つの流儀

| | | | |
|---|---|---|---|
| 内積 | $(\psi, \chi)$ | $(\psi, \hat{A}\chi)$ | $(\hat{A}^\dagger\psi, \chi)$ |
| 折衷 | $\langle\psi\|\chi\rangle$ | $\langle\psi\|\hat{A}\chi\rangle$ | $\langle\hat{A}^\dagger\psi\|\chi\rangle$ |
| ブラケット | $\langle\psi\|\chi\rangle$ | $\langle\psi\|\hat{A}\|\chi\rangle$ | $\langle\psi\|\hat{A}\|\chi\rangle$ |

- 内積記法は数学者に好まれる.
  - 量子論はヒルベルト空間論 (内積空間) の応用問題だから.
- 折衷記法は「安全さ」のため, 利用者が多い.
  - 上記のような失敗を恐れて...
- Dirac は純正のブラケット記法を用いた.
  - 折衷記法の必要性は感じていなかった.

# 記法の現状

- 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:
  (a) ブラケット記法を Dirac のオリジナル通りに使う.
  (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は, 折衷記法を用いる.
  (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.
- 特に初学者向けのものは (c) がほとんど.
- 岩波本においても, 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. 摂動法だけブラケットという場合も多い.
- 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, 内積記法の場合が多い.

# 本来のブラケット記法が普及しない理由

(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.

ブラケット記法を貫徹するのは結構大変

# ディラックはデュアルを意識していた

- P.A.M. ディラック:「量子力学」原書第 4 版, 第 6 節

  「どんな数学的理論においても, 一組のベクトルがあるときはいつでも必ずもう一つ別の組のベクトルをつくりあげることができるが, これを数学者はデュアル・ベクトル (dual vector) とよんでいる. デュアル・ベクトルを作る手続きを, もとのベクトルがいま考えているケット・ベクトルである場合について述べてみよう. 」

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.

# 双対空間

- ベクトル $\boldsymbol{x} \in V$ にスカラー (複素数) $\phi(\boldsymbol{x}) \in \mathbb{C}$ を線形的に対応づけるものが線形汎関数.
- 線形汎関数全体を元のベクトル空間 $V$ に対する双対空間 $V^*$ とよぶ.
- $(V^*)^* \simeq V$ (双対といわれるゆえん)

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.

# 量子論における双対空間

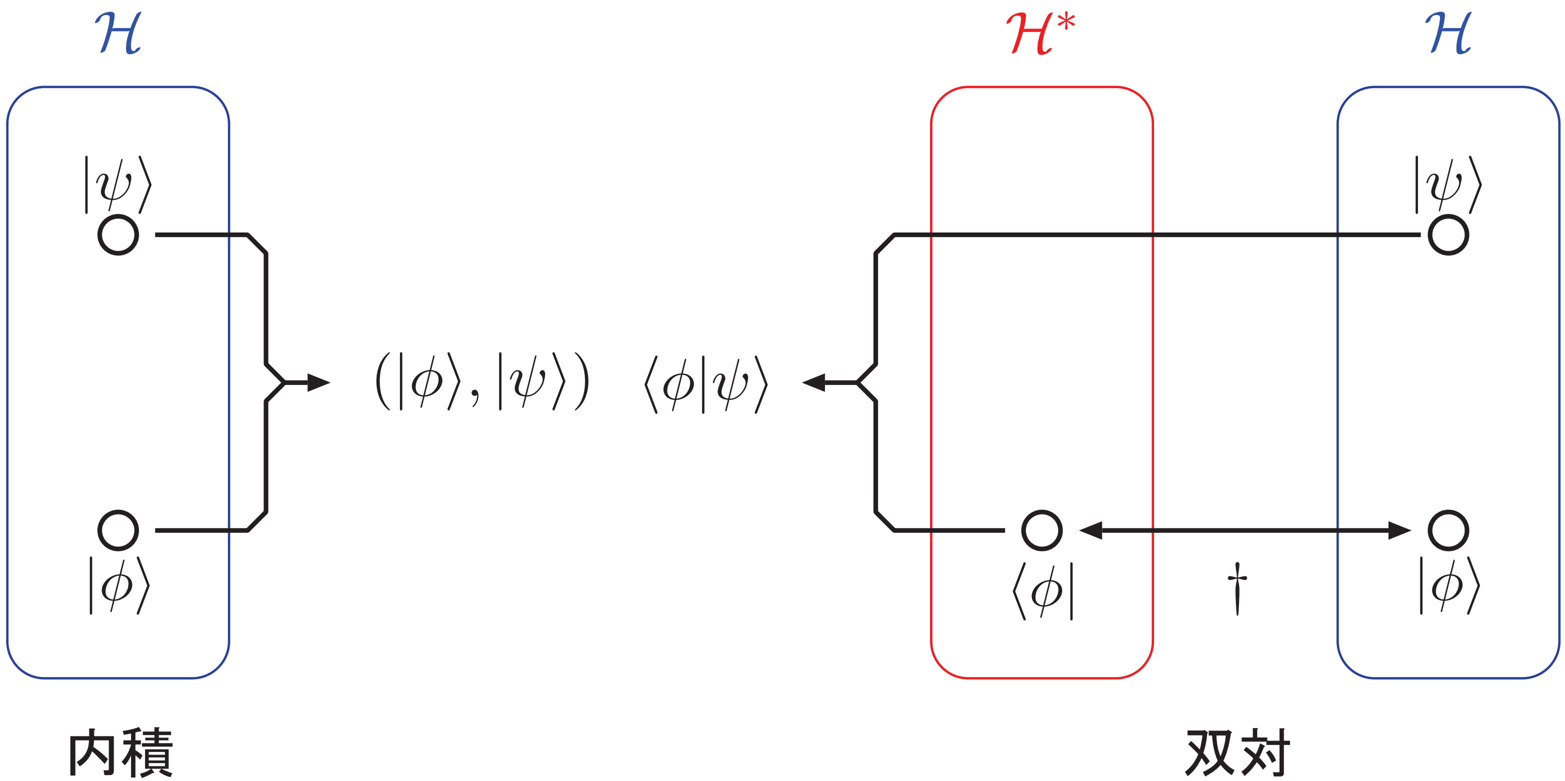
- 状態 (ケット) 空間 $\mathcal{H}$ の要素であるケット $|\chi\rangle$ に対して, 複素数 $\psi(|\chi\rangle)$ を線形的に割り当てる関数 $\psi(\sqcup)$ が線形汎関数.

$$\psi(\sqcup) : |\chi\rangle \in \mathcal{H} \quad \mapsto \quad \psi(|\chi\rangle) \in \mathbb{C}$$

- 線形汎関数の集合である双対空間がブラの空間 $\mathcal{H}^*$ である.
- $\psi(\sqcup)$ 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 の優れたアイデアである.
- 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.

$$(\sqcup, \sqcup) : |\psi\rangle, |\chi\rangle \in \mathcal{H} \quad \mapsto \quad (|\psi\rangle, |\chi\rangle) \in \mathbb{C}$$

# 内積 vs 双対



$\mathcal{H}$
$|\psi\rangle$
$|\phi\rangle$
$(|\phi\rangle, |\psi\rangle)$
$\langle\phi|\psi\rangle$
$\mathcal{H}^*$
$\mathcal{H}$
$|\psi\rangle$
$\langle\phi|$
$\dagger$
$|\phi\rangle$
内積
双対

# 内積と双対の導入の順序

内積優先

- $\mathcal{H}$ に内積 $(|\psi\rangle, |\chi\rangle)$ の存在を前提
- 線形汎関数を $\psi(|\chi\rangle) = (|\psi\rangle, |\chi\rangle)$ により定義
- $\langle\psi| := \psi(\textvisiblespace)$ を $|\psi\rangle$ の共役ブラとよぶ

双対優先

- $\mathcal{H}$ と $\mathcal{H}^*$ の間に 1 対 1 の関係を設定
  $|\psi\rangle \overset{\dagger}{\leftrightarrow} \langle\psi|$ あるいは $|\psi\rangle^\dagger = \langle\psi|$, $\langle\psi|^\dagger = |\psi\rangle$
- 内積を $(|\psi\rangle, |\chi\rangle) = \langle\psi|\chi\rangle$, $\langle\psi| = |\psi\rangle^\dagger$ で定義

ブラケット記法は $\mathcal{H}^*$ を自立させる方向なので，後者の方が自然.

# 共役関係

- $\mathcal{H}$ 上の内積は「$\mathcal{H}$ と $\mathcal{H}^*$ の間の共役関係」と等価である.

  $\mathcal{H}$ と $\mathcal{H}^*$ 間の反線形的 1 対 1 対応

$$\alpha|\psi\rangle + \beta|\phi\rangle \quad \overset{\dagger}{\longleftrightarrow} \quad \alpha^*\langle\psi| + \beta^*\langle\phi|$$

- 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.

  |これ$\rangle$ の共役は $\langle$ これ |

  $\langle$ あれ | の共役は |あれ$\rangle$.

- 共役関係を明示的に表したい場合には

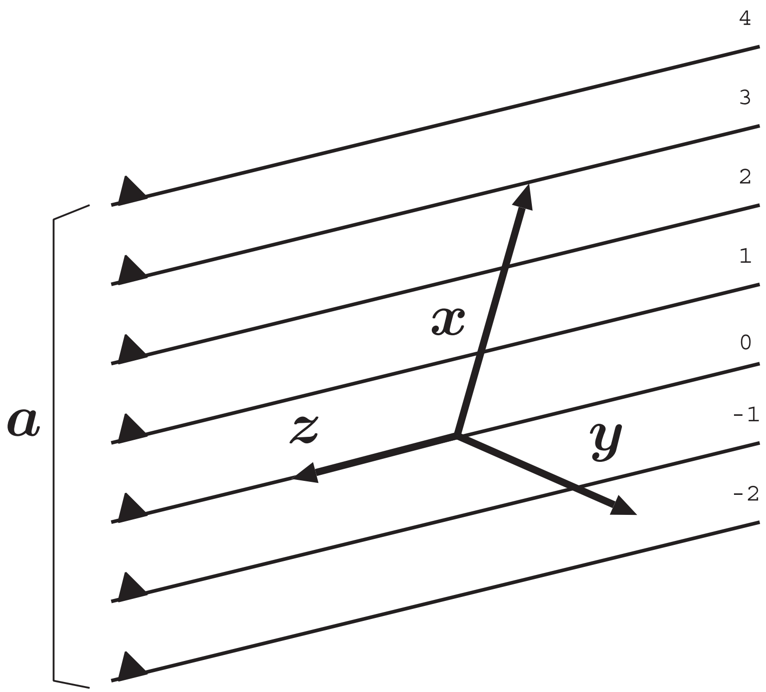
$$|\psi\rangle = \langle\psi|^\dagger, \quad \langle\chi| = |\chi\rangle^\dagger, \quad \text{あるいは}$$

$$|\psi\rangle \overset{\dagger}{\longleftrightarrow} \langle\psi|, \quad \langle\chi| \overset{\dagger}{\longleftrightarrow} |\chi\rangle$$

これらの記法はブラケットの運用にときどき必要

# コベクトルの図的表現

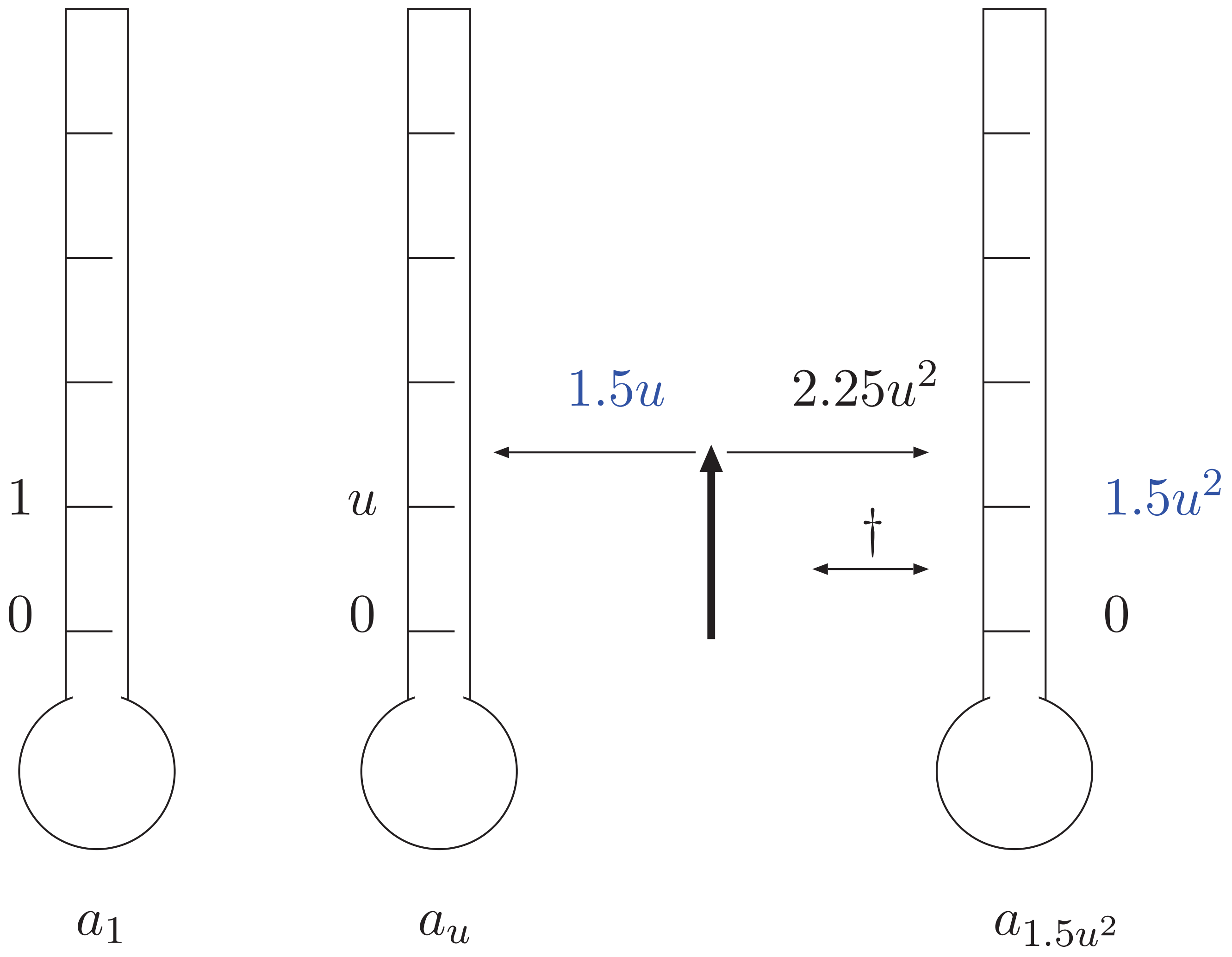
- 双対ベクトル (コベクトル) の図的表現 (2 次元の場合).
- 双対ベクトル $\boldsymbol{a}$ は対応する線形関数 $\phi \in V^*$ の等高線として表現できる．ベクトルが横切る等高線の数が関数の値となる.
- 2 次元の矢印で与えられる $\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y}, \boldsymbol{z} \in V$ に対し, $\boldsymbol{a} \cdot \boldsymbol{x} = 3$, $\boldsymbol{a} \cdot \boldsymbol{y} = -1.5$, $\boldsymbol{a} \cdot \boldsymbol{z} = 0$ である．等高線に付随する三角形は関数 $\phi$ の値が増える方向を示す.



# 双対を利用した計量の操作論的導入

- 双対空間にはベクトルを「測る」機能が備わっている．コベクトル $\boldsymbol{a} \in V^*$ があれば，未知の $\boldsymbol{x} \in V$ に対してスカラー量 $\boldsymbol{a} \cdot \boldsymbol{x}$ を調べることで，$\boldsymbol{x}$ の「相対的な」量が分かる．
- コベクトルは校正されていない測定装置（例えば，目盛だけでスケールのない気圧計）のようなものである．「絶対的な」値を決めることはできない．
- 1 次元の長さの場合 $(V = \mathbb{R}\mathrm{m})$ を例に考えよう．任意の $a \in V^*$ は $x \in V$ の長さを $a \cdot x$ によって見積るのに利用することができる．ただし，$a$ の選び方によって値が変わるので，普遍的な尺度ではない．
- 規約として $a_1 \in V^*$ (装置) と $u = \sqrt{g} > 0$ (スケール) をそれぞれ 1 つ選定し，$x$ の長さの 2 乗を $|x|^2 := u^2 \times (a_1 \cdot x)^2$ と定義する．これにより，$V$ に長さ (計量) が導入されたことになる．
- 共役関係は $a_u = ua_1$ を用いて，$x \overset{\dagger}{\longleftrightarrow} (a_u \cdot x)a_u$．

# 測定器の校正



# 双対空間を利用した計量の導入

- 一般の次元の場合に対して，計量を双対空間を経由して導入することを考えよう．
- $N$ 個の独立なコベクトル $\{\boldsymbol{a}_1, \boldsymbol{a}_2, \cdots \boldsymbol{a}_N\}$ と対称な係数 $h_{ij}$ を選定する．
- $2N$ 個の測定データ $X_i = \boldsymbol{a}_i \cdot \boldsymbol{x}$, $Y_i = \boldsymbol{a}_i \cdot \boldsymbol{y}$ から

$$(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y}) := h_{ij} X_i Y_i = h_{ij} (\boldsymbol{a}_i \cdot \boldsymbol{x})(\boldsymbol{a}_j \cdot \boldsymbol{y}) = h_{ij} \boldsymbol{a}_i \boldsymbol{a}_j : \boldsymbol{x}\boldsymbol{y} = \mathsf{h} : \boldsymbol{x}\boldsymbol{y}$$

  によって $V$ の内積を定義する．このように測定装置の組と測定後のデータ処理を定めることで，$V$ に計量が導入される．
- $\mathsf{h} = h_{ij} \boldsymbol{a}_i \boldsymbol{a}_j \in V^* \otimes V^*$ は計量テンソルに相当する．
- 任意の $\boldsymbol{x} \in V$ に対して，その共役元 $\boldsymbol{x}^\dagger = \mathsf{h} \cdot \boldsymbol{x} \in V^*$ が一意に決まる．

# 双対演算子

- 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.
- 後者は前者の「双対演算子」とよばれる. 通常, 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, $\underrightarrow{\hat{A}}$, $\underleftarrow{\hat{A}}$ のように区別する.
- 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.

岩波本の間違いは, 双対演算子 $\underleftarrow{\hat{A}}$ を慌てて $\underrightarrow{\hat{A}}$ の「共役演算子」だと思ったことにある.

# 双対演算子

- $\langle\psi|\underrightarrow{\hat{A}}|\chi\rangle$ は $|\chi\rangle \in \mathcal{H}$ に対する線形汎関数と見なせる. $\langle\psi'| \in \mathcal{H}^*$ を選んで $\langle\psi'|\chi\rangle$ と表せる.
- $\langle\psi'|$ は $\langle\psi|$ に線形的に依存するので, $\mathcal{H}^*$ 上の演算子

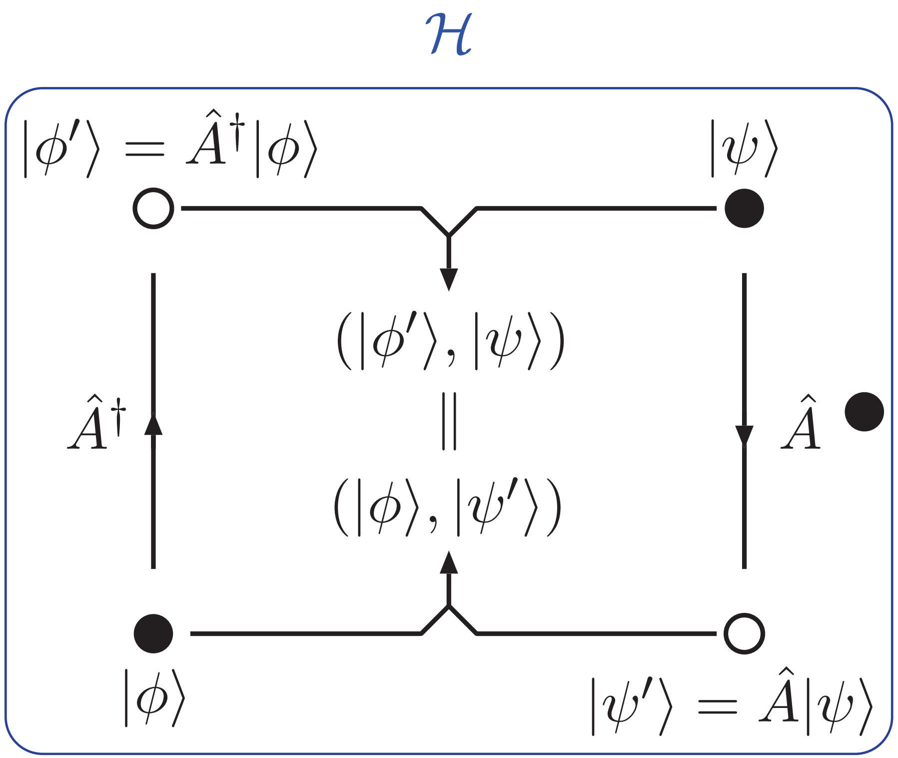
$$\underleftarrow{\hat{A}} : \langle\psi| \mapsto \langle\psi'| = \langle\psi|\underleftarrow{\hat{A}}$$

  が定義できる. これが双対演算子. (ここまでは内積は関係しない.)
- 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,

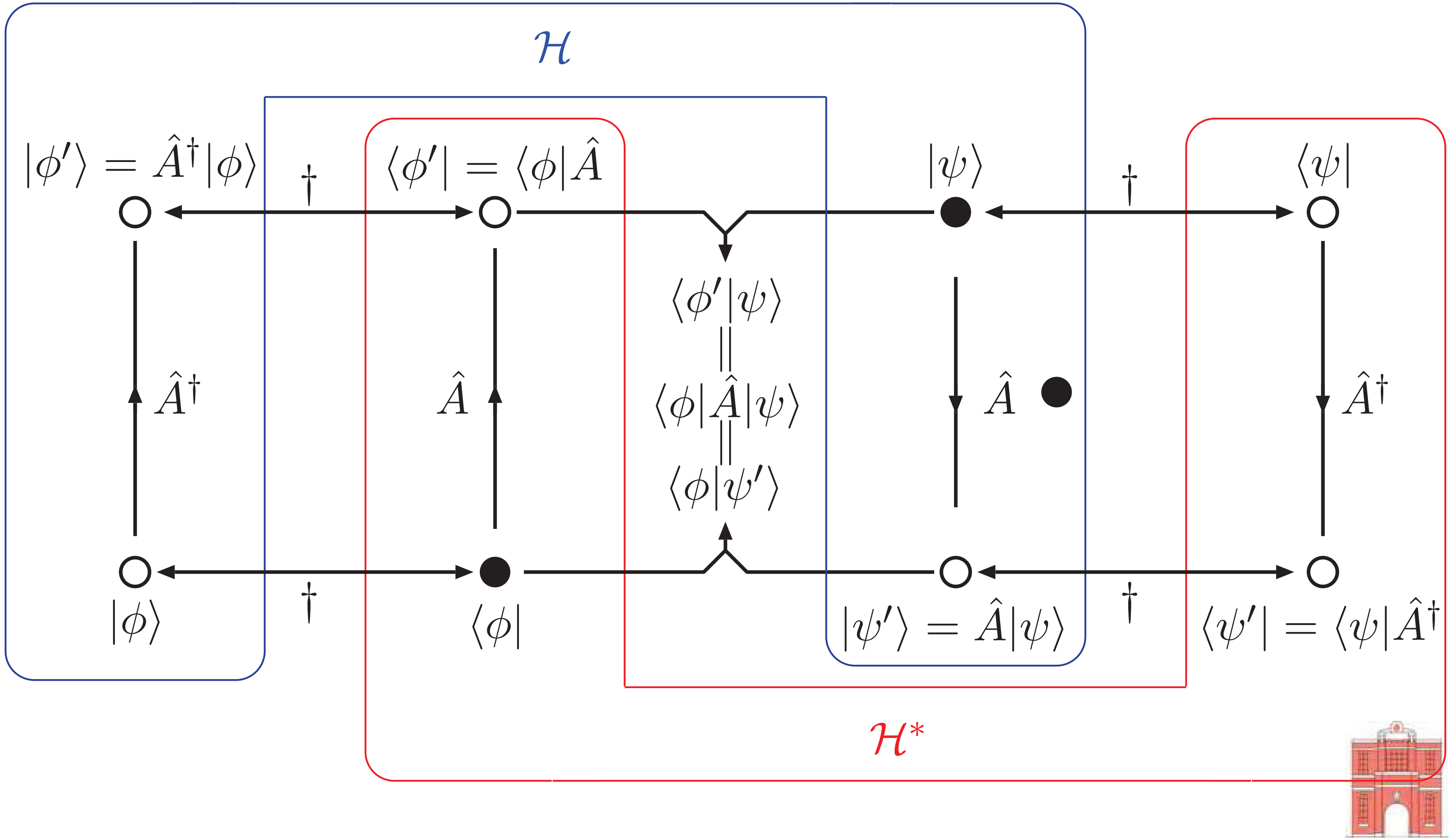
$$|\psi'\rangle = \underrightarrow{\hat{A}}^\dagger|\psi\rangle$$

  $\underrightarrow{\hat{A}}^\dagger$ は $\mathcal{H}$ 上の演算子である.
- 同様に, $\mathcal{H}^*$ 上の $\underleftarrow{\hat{A}}^\dagger$ も得られる.

# 共役演算子の内積的理解



# 共役演算子の双対的理解



# 双対演算子

- 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 $\underset{\longleftarrow}{\hat{A}}$, $\underset{\longrightarrow}{\hat{A}}$, $\underset{\longrightarrow}{\hat{A}}^{\dagger}$, $\underset{\longleftarrow}{\hat{A}}^{\dagger}$ が登場する.
- 内積記法や折衷記法の場合は, $\underset{\longrightarrow}{\hat{A}}$, $\underset{\longrightarrow}{\hat{A}}^{\dagger}$ の 2 種類しか現れない.

# 折衷記法の問題

- $\langle \hat{A}\psi|\chi\rangle$ 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.
- $\langle \hat{A}\psi|\hat{B}|\hat{C}\chi\rangle = \langle \psi|\hat{A}^\dagger\hat{B}\hat{C}|\chi\rangle$ 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:

$$|\boldsymbol{x}, t\rangle, \quad |\text{元気な猫}\rangle, \quad \ldots$$

  折衷記法はその自由度と両立しない.
- 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.

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であるが, 双対構造に内積構造を接木する記法は合理的ではなく, 美しさに欠ける.

# 微分演算子

- 折衷記法が好まれる場面：波動関数 $\psi(x)$, $\chi(x)$ の微分演算子を介した内積の式は部分積分の公式で簡単に求まる:

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

- 折衷記法では, 微分演算子を $\hat{d}$ と表すと, 反エルミート性 $\hat{d}^\dagger = -\hat{d}$ から

$$\langle\psi|\hat{d}\chi\rangle = \langle\hat{d}^\dagger\psi|\chi\rangle = -\langle\hat{d}\psi|\chi\rangle$$

- ブラケット記法では,

$$|\psi\rangle^\dagger(\hat{d}|\chi\rangle) = \langle\psi|(\hat{d}|\chi\rangle) = (\langle\psi|\hat{d})|\chi\rangle = (\hat{d}^\dagger|\psi\rangle)^\dagger|\chi\rangle = -(\hat{d}|\psi\rangle)^\dagger|\chi\rangle$$

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, もとの式が内積的表現だからである.

# 微分演算子の反エルミート性

- 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.

# ブラケット記法と微分演算子

- ずらしの演算子 $\hat{D}(a)$ はユニタリ: $\hat{D}^\dagger(a) = \hat{D}^{-1}(a)$. さらに, $\hat{D}(a+b) = \hat{D}(a)\hat{D}(b)$, $\hat{D}(-a) = \hat{D}(a)^{-1}$ が成り立つ.
- 位置の固有ケット $|q\rangle$ に対する作用は $\hat{D}(a)|q\rangle = |q-a\rangle$. 共役をとると, $\langle q|\hat{D}^\dagger(a) = \langle q-a|$. $\hat{D}^\dagger(a) = \hat{D}(a)^{-1} = \hat{D}(-a)$ なので, 位置の固有ブラに対する作用は $\langle q|\hat{D}(a) = \langle q+a|$.
- 演算子 $\hat{d}(a) := (\hat{D}(a) - \hat{1})/a$ は, $a \to 0$ で微分演算子になる.
- $\hat{d}(a)|\chi\rangle$ の $q$-表示は

$$\langle q|\hat{d}(a)|\chi\rangle = \langle q|\frac{\hat{D}(a)-\hat{1}}{a}|\chi\rangle = \frac{\langle q+a| - \langle q|}{a}|\chi\rangle$$
$$= \frac{\chi(q+a)-\chi(q)}{a} \to \langle q|\hat{d}|\chi\rangle = \frac{\mathrm{d}\chi}{\mathrm{d}q}(q) \quad (a \to 0)$$

- $\langle\psi|\hat{d}(a)$ の $q$-表示は

$$\langle\psi|\hat{d}(a)|q\rangle = \langle\psi|\frac{\hat{D}(a)-\hat{1}}{a}|q\rangle = \langle\psi|\frac{|q-a\rangle - |q\rangle}{a}$$
$$= \frac{\psi^*(q-a)-\psi^*(q)}{a} \to \langle\psi|\hat{d}|q\rangle = -\frac{\mathrm{d}\psi^*}{\mathrm{d}q}(q) \quad (a \to 0)$$

# 結合則

- $\langle\psi|\hat{A}\hat{B}|\chi\rangle$ に相当する

$$\langle\psi|(\hat{A}\hat{B}|\chi\rangle) = (\langle\psi|\hat{A})(\hat{B}|\chi\rangle) = (\langle\psi|\hat{A}\hat{B})|\chi\rangle$$

を折衷記法で内積的に表すと,

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

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.

# 双対ベクトルによる演算子の表現

- 双対空間を導入する，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

$$\mathscr{L}(\mathcal{H}\,;\mathcal{H}) \simeq \mathcal{H} \otimes \mathcal{H}^*$$

- ブラケット記法において大活躍する「1 の分解」や，演算子のスペクトル分解

$$\hat{1} = \sum_i |e_i\rangle\langle e_i|, \quad \hat{A} = \sum_i a_i |a_i\rangle\langle a_i|$$

も簡潔に表現できる.

# 固有ケットと固有ブラ

- 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
  $\langle a|$ は $\hat{A}$ (正確には $\underleftarrow{\hat{A}}$) の固有ブラとは限らない.
- $\langle a|$ は, $\hat{A}^\dagger$ の (固有値 $a^*$ の) 固有ブラである:

$$\langle a|\hat{A}^\dagger = a^*\langle a|$$

- $\hat{A}$ がエルミートなら, $\langle a|$ は $\hat{A}$ の固有値 $a$ の固有ブラでもある:

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

# 双対基底とスペクトル分解

- $\hat{A}$ 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 $\hat{A} = \sum_i a_i |a_i\rangle\langle a^i|$
- $|a_i\rangle$ 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.
- 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, $|a^i\rangle$, $\langle a_i|$.

# 正規直交基底

- $\hat{A}$ が正規 (normal) 演算子, $[\hat{A}^\dagger, \hat{A}] = 0$ の場合.（正規演算子にはエルミート演算子, 反エルミート演算子, ユニタリ演算子が含まれる.）
- 基底 $(|a_i\rangle)$ を正規直交にできる. 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.
- 正規演算子のスペクトル分解は

$$\hat{A} = \sum_i a_i |a_i\rangle\langle a_i|$$

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.

- 特に, エルミートの場合は固有値 $a_i$ が実数になる.

# まとめ (1)

- 折衷記法はあまりよい記法とはいえない.
- ブラケットは内積記号を少し変形したものではない.
- 折衷記法は双対構造の存在をあいまいにする.
- 折衷記法とオリジナル記法の混在は誤りの原因になる.

「演算子の後置記法」と「共役関係」を認識すれば, 折衷記法は不要.

# まとめ (2)

- Dirac が教科書で多くのページを割い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.
- 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.
- 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.