物質情報学5（量子力学），担当 谷村省吾，講義ノート2

ヒルベルト空間

今回以降，量子力学の基本的な枠組みを説明する．量子力学で大切な概念は，系の状態を表す**ベクトル**と，系の物理量を表す**演算子**である．状態ベクトルには確率解釈という物理的な意味が与えられる．状態ベクトルを全部集めた集合はヒルベルト空間と呼ばれる．今回はヒルベルト空間という数学概念を中心に解説する．

古典力学と量子力学

古典力学と量子力学の共通点として，力学の構文形式がある．英語の文にSVO（主語+動詞+目的語）という型があるように，力学にも文の型がある．力学の構文型は，

「A という系 (system) が，B という状態 (state) のとき，C という物理量 (observable) が D という値 (value) を持つ」

という型である．系・状態・物理量・値の4者の他に，系の状態や物理量の時間変化の規則を，**運動法則** (law of dynamics) とか**変換則** (transformation law) という．系・状態・物理量・値・変換則の5者がそろったものを**力学系** (dynamical system) という．

例えば,「質量144グラムのボールが，時速120 kmで飛んでいるとき，ボールの運動エネルギーは，80ジュールの値を持つ」という文は力学の構文になっている.「質量144グラムのボール」は一つの**系**であり,「時速120 kmで飛んでいる」のは一つの**状態**であり,「運動エネルギー」は**物理量**の一種であり,「80ジュール」はエネルギーの取り得る**値**の一つである．

力学が扱う系は1個の粒子とは限らない．**複数の粒子**を**ひとまとまりの系**として扱うこともある．つまり,「1個の電子」も系になり得るし,「1個の陽子と1個の電子の組である水素原子」もひとまとまりの系として扱える.「3個の水素原子と1個の窒素原子でできている1個のアンモニア分子」や「固体結晶中を運動する1個の電子」や「アボガドロ数の原子の集まり」なども「系」である．

量子力学の例文を挙げると,「水素原子が基底状態 (ground state, エネルギーが一番低い状態) のときエネルギーが -13.6eV（エレクトロンボルト）になっている（陽子と電子が離れ離れになっている状態に比べて水素原子基底状態の方がエネルギーが13.6eV低い，という意味)」という文が書けるが，これも**「系Aが状態Bのとき物理量Cが値Dになっている」**という形式にのっとっている．

ここまでは古典力学と量子力学のおおまかな共通点を述べたが，相違点はどうか？ 古典力学では物理量が取り得る値は実数値であるべしという以外には取り立てて制約がないが，**量子力学では物理量が取り得る値は著しく限定される．**例えば，水素原子のエネルギーは -13.6 eV, -3.4 eV, -1.5 eVといった値は取り得るが，これらの間の値（-12eVとか -11eVとか）になることはない．**物理量の値が連続的に変化せず，飛び飛びの離散値に限定される**ことは原子や電子などのミクロの世界の特徴である．物理量の値が途切れ途切れの粒子のようになっていることが「量子」という名前の由来でもある．

また，ミクロの世界では，**正確に同じ状態の系を多数用意して，おのおのについて同じ物理量Cを測っても，同じ測定値Dを得るとは限らない．**測定するたびに $\mathrm{D}_1, \mathrm{D}_2, \cdots$ と値がば

らつくことがある．量子力学で予測できるのは，B という状態において物理量 C を測ったときに値 D を得る確率 Prob(C = D|B) だけである．

まとめると，**物理量が連続的な実数値をとらず，限定された値のみをとり，同じ状態だからといって物理量の値が一致するとは限らず，物理量の出現値は確率的にしか予測できない，というのが量子力学の特徴である．**

このような物理量の値と確率に関する計算・予測方法を修得することが，この一連の講義の主たる目的である．

ヒルベルト空間

力学では系の状態を，何らかの数学的言葉で表す．例えば，ニュートン力学では，質点の状態は質点の位置と速度で指定され，位置と速度は3次元空間の座標を使った実数値で表される．

量子力学では系の状態を「ヒルベルト空間のベクトル $|\psi\rangle$」で表す．**ヒルベルト空間** (Hilbert space) とは，ベクトル空間であり，内積が備わっており，完備であるような集合である．つまり，集合 $\mathscr{H}$ がヒルベルト空間であるための条件は，任意のベクトル $|\psi_1\rangle, |\psi_2\rangle \in \mathscr{H}$ の**和**

$$|\psi_1\rangle + |\psi_2\rangle \in \mathscr{H} \tag{1}$$

と，任意の複素数 $c \in \mathbb{C}$ による任意のベクトル $|\psi\rangle \in \mathscr{H}$ の**スカラー倍**

$$c|\psi\rangle \in \mathscr{H} \tag{2}$$

が定まり，任意のベクトル $|\psi\rangle, |\chi\rangle \in \mathscr{H}$ の**内積**

$$\langle\chi|\psi\rangle \in \mathbb{C} \tag{3}$$

が定まっていて，極限操作について閉じていることである．内積 $\langle\chi|\psi\rangle$ の左側の $\langle\chi|$ を**ブラ (bra) ベクトル**, 右側の $|\psi\rangle$ を**ケット (ket) ベクトル**ともいう．内積は

$$\langle\chi|\psi_1 + \psi_2\rangle = \langle\chi|\psi_1\rangle + \langle\chi|\psi_2\rangle \tag{4}$$
$$\langle\chi|c\psi\rangle = c\langle\chi|\psi\rangle \tag{5}$$
$$\langle\chi_1 + \chi_2|\psi\rangle = \langle\chi_1|\psi\rangle + \langle\chi_2|\psi\rangle \tag{6}$$
$$\langle c\chi|\psi\rangle = c^*\langle\chi|\psi\rangle \tag{7}$$
$$\langle\psi|\chi\rangle = \langle\chi|\psi\rangle^* \tag{8}$$
$$\langle\psi|\psi\rangle \text{ は実数} \tag{9}$$
$$\langle\psi|\psi\rangle \;\geq\; 0 \tag{10}$$
$$\langle\psi|\psi\rangle \;=\; 0 \;\Leftrightarrow\; |\psi\rangle = 0 \tag{11}$$

を満たすものとする．また，

$$\Big\||\psi\rangle\Big\| := \sqrt{\langle\psi|\psi\rangle} \tag{12}$$

をベクトル $|\psi\rangle$ の長さとか**ノルム** (norm) という．**一般に，内積の値は複素数だが，ノルムは必ず非負の実数になる**．

$\||\psi\rangle\| = 1$ であるようなベクトル $|\psi\rangle$ を**単位ベクトル** (unit vector) または**規格化ベクトル** (normalized vector) という．

ベクトルの内積が $\langle\chi|\psi\rangle = 0$ になるとき $|\chi\rangle$ と $|\psi\rangle$ は**直交している** (orthogonal, perpendicular) といい，$|\chi\rangle \perp |\psi\rangle$ と書く．

問 1．ヒルベルト空間の任意のベクトル $|\psi\rangle$ が $|\psi\rangle \neq 0$ であるとき，複素数 c によるスカラー倍ベクトル $|\chi\rangle = c|\psi\rangle$ が $\||\chi\rangle\| = 1$ を満たすような c の値を求めよ．この c は**規格化因子** (normalization factor) とか規格化乗数と呼ばれる．

問 2． ヒルベルト空間の任意のベクトル $|\psi_1\rangle$, $|\psi_2\rangle$ に対して

$$\begin{aligned} &\||\psi_1\rangle + |\psi_2\rangle\|^2 \\ &= \||\psi_1\rangle\|^2 + \||\psi_2\rangle\|^2 + 2\mathrm{Re}\langle\psi_1|\psi_2\rangle \end{aligned} \tag{13}$$

が成り立つことを証明せよ．実ベクトルに対しては，この関係式は**余弦定理**と同等である．

問 3．　ヒルベルト空間の任意のベクトル $|\psi_1\rangle, |\psi_2\rangle$ に対して

$$\begin{aligned} &\||\psi_1\rangle + |\psi_2\rangle\|^2 + \||\psi_1\rangle - |\psi_2\rangle\|^2 \\ &= 2\||\psi_1\rangle\|^2 + 2\||\psi_2\rangle\|^2 \end{aligned} \tag{14}$$

が成り立つことを証明せよ．この関係式は**中線定理**とか**平行四辺形の定理**と呼ばれる．

問 4．$|\psi_1\rangle \perp |\psi_2\rangle$ ならば

$$\begin{aligned} &\||\psi_1\rangle + |\psi_2\rangle\|^2 \\ &= \||\psi_1\rangle - |\psi_2\rangle\|^2 \\ &= \||\psi_1\rangle\|^2 + \||\psi_2\rangle\|^2 \end{aligned} \tag{15}$$

が成り立つことを証明せよ．この関係式は**ピタゴラスの定理**とか**三平方の定理**と呼ばれる．

問 5．　ヒルベルト空間の任意のベクトル $|\psi_1\rangle, |\psi_2\rangle$ に対して

$$\Big|\langle\psi_1|\psi_2\rangle\Big| \;\le\; \Big\||\psi_1\rangle\Big\| \cdot \Big\||\psi_2\rangle\Big\| \tag{16}$$

が成り立つことを証明せよ．また，等号が成立するための必要十分条件を言え．この関係式は**コーシー・シュワルツの不等式** (Cauchy-Schwarz inequality) と呼ばれる．

問 6．　ヒルベルト空間の任意のベクトル ψ_1, ψ_2 に対して

$$\||\psi_1\rangle + |\psi_2\rangle\| \le \||\psi_1\rangle\| + \||\psi_2\rangle\| \tag{17}$$

が成り立つことを証明せよ．これは**三角不等式**と呼ばれる．

確率解釈

$\||\psi\rangle\| = 1$, $\||\chi\rangle\| = 1$ のとき，状態 $|\psi\rangle$ から状態 $|\chi\rangle$ が見出される確率は

$$\mathrm{Prob}\Big(|\chi\rangle \leftarrow |\psi\rangle\Big) = \Big|\langle\chi|\psi\rangle\Big|^2 \tag{18}$$

に等しい．このことを**ボルン (Born) の確率解釈**という．内積（複素数値）$\langle\chi|\psi\rangle$ のことを**確率振幅** (probability amplitude) ともいう．

「状態 $|\psi\rangle$ から状態 $|\chi\rangle$ が見出される確率」とはわかりにくい考え方だが，$|\psi\rangle$ だと思っていた状態でも多少は状態 $|\chi\rangle$ が混じっていることがあり，例えば確率が 3/10 なら，状態 $|\psi\rangle$ の系を 100 回観測すれば，そのうち 30 回くらいは $|\chi\rangle$ という状態に見えることがある，というふうにイメージしてほしい．

ヒルベルト空間の例

例 1．n 次元複素ユークリッド空間 $\mathbb{C}^n$．n 個の複素数を縦に並べたベクトルの和とスカラー倍を

$$|\psi_a\rangle + |\psi_b\rangle = \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ \vdots \\ a_n \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \\ \vdots \\ b_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a_1 + b_1 \\ a_2 + b_2 \\ \vdots \\ a_n + b_n \end{pmatrix} \tag{19}$$

$$c|\psi_a\rangle = c\begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ \vdots \\ a_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} c\,a_1 \\ c\,a_2 \\ \vdots \\ c\,a_n \end{pmatrix} \tag{20}$$

で定め，内積を

$$\begin{aligned} \langle\psi_b|\psi_a\rangle \;&:=\; (b_1^*, b_2^*, \cdots, b_n^*)\begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ \vdots \\ a_n \end{pmatrix} \\ &=\; b_1^* a_1 + b_2^* a_2 + \cdots + b_n^* a_n \end{aligned} \tag{21}$$

で定めた集合 $\mathbb{C}^n$ はヒルベルト空間になっている．**内積 $\langle\psi_b|\psi_a\rangle$ を求めるとき，左側のベクトル ψ_b の成分の複素共役を作ることに注意せよ**．

例 2. ノルム有限な無限数列空間 ℓ^2．無限次元ベクトル

$$|\psi\rangle = \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ a_3 \\ \vdots \end{pmatrix} \tag{22}$$

に対して無限級数

$$\Big\| |\psi\rangle \Big\|^2 := |a_1|^2 + |a_2|^2 + |a_3|^2 + \cdots \tag{23}$$

が収束すれば $|\psi\rangle$ は集合 ℓ^2 の元になっているという．

例 3. $\mathbb{R}$ 上の 2 乗可積分関数空間 $L^2(\mathbb{R})$．複素数値関数

$$\psi : \mathbb{R} \to \mathbb{C}, \qquad x \mapsto \psi(x) \tag{24}$$

に対して広義積分

$$\|\psi\|^2 := \int_{-\infty}^{\infty} |\psi(x)|^2 \, dx \tag{25}$$

が収束すれば ψ は集合 $L^2(\mathbb{R})$ の元だという．関数 $\psi_1(x), \psi_2(x)$ の内積を

$$\langle \psi_1 | \psi_2 \rangle := \int_{-\infty}^{\infty} \psi_1(x)^* \psi_2(x) \, dx \tag{26}$$

で定める．

$L^2(\mathbb{R})$ は次のように解釈される．$L^2(\mathbb{R})$ は 1 次元空間中を動く粒子の状態を記述するヒルベルト空間である．$\psi(x)$ は**波動関数** (wavefunction) と呼ばれる．ある粒子の状態が波動関数 $\psi(x)$ で表されるとき，その粒子が座標 x について $a \le x \le b$ のどこかに見つかる確率は

$$\mathrm{Prob}(a \le x \le b \,|\psi) = \int_a^b |\psi(x)|^2 \, dx \tag{27}$$

に等しい．とくに Δx を微小量とすると，その粒子が数直線上の x_0 と $x_0 + \Delta x$ の間に見つかる確率は

$$\mathrm{Prob}(x_0 \le x \le x_0 + \Delta x|\psi) = |\psi(x_0)|^2 \, \Delta x \tag{28}$$

に等しい．このことから $|\psi(x)|^2$ は**確率密度**（単位長さあたりの存在確率）と呼ばれる．

例 4. 同様に $L^2(\mathbb{R}^3)$ も定義される．これは 3 次元空間中を動く粒子の状態を記述するヒルベルト空間である．3 つの実数変数 (x, y, z) を持つ複素数値関数

$$\psi : \mathbb{R}^3 \to \mathbb{C}, \qquad (x, y, z) \mapsto \psi(x, y, z) \tag{29}$$

において広義積分

$$\|\psi\|^2 := \int_{-\infty}^{\infty} |\psi(x, y, z)|^2 \, dxdydz \tag{30}$$

が収束すれば ψ は $L^2(\mathbb{R}^3)$ の元だという．内積は

$$\langle \psi_1 | \psi_2 \rangle := \int_{-\infty}^{\infty} \psi_1(x, y, z)^* \psi_2(x, y, z) \, dxdydz \tag{31}$$

で定める．$\Delta x, \Delta y, \Delta z$ を微小量として，粒子の位置を観測したとき，x 座標の値が x と $x + \Delta x$ の間にあり，かつ，y 座標の値が y と $y + \Delta y$ の間にあり，かつ，z 座標の値が z と $z + \Delta z$ の間にあるような確率は

$$|\psi(x, y, z)|^2 \, \Delta x \, \Delta y \, \Delta z \tag{32}$$

に等しい．$|\psi(x, y, z)|^2$ も**確率密度**（単位体積あたりの存在確率）と呼ばれる．

問 7. 複素数ベクトル

$$|\phi_1\rangle = \begin{pmatrix} 1 + 2i \\ 3 + 4i \end{pmatrix} \quad |\phi_2\rangle = \begin{pmatrix} 5 + 6i \\ 7 + 8i \end{pmatrix} \tag{33}$$

の内積を定義式 (21) どおりに計算しよう：

$$\begin{aligned} \langle \phi_1 | \phi_2 \rangle &= (1 + 2i, 3 + 4i)^* \begin{pmatrix} 5 + 6i \\ 7 + 8i \end{pmatrix} \\ &= (1 - 2i, 3 - 4i) \begin{pmatrix} 5 + 6i \\ 7 + 8i \end{pmatrix} \\ &= (1 - 2i)(5 + 6i) + (3 - 4i)(7 + 8i) \\ &= 5 + 12 + 6i - 10i \\ &\quad\ +21 + 32 + 24i - 28i \\ &= 70 - 8i \end{aligned} \tag{34}$$

となる．**内積を求める際，左側のベクトルの成分の複素共役を作ることに注意**．ベクトル $|\phi_1\rangle$ のノルム 2 乗は

$$\begin{aligned}\||\phi_1\rangle\|^2 &= \langle\phi_1|\phi_1\rangle \\ &= |1+2i|^2+|3+4i|^2 \\ &= 1^2+2^2+3^2+4^2 \\ &= 1+4+9+16 \\ &= 30\end{aligned} \tag{35}$$

に等しい．**どのようなベクトルでも，そのノルム 2 乗は正の実数または 0 になり，ノルムの計算結果には虚数 i は残らない**．もしも i が残っていたら計算間違いである．$|\phi_1\rangle$ の**ノルム**は

$$\||\phi_1\rangle\| = \sqrt{30} \tag{36}$$

である．

上の例にならって，以下のベクトル $|\psi_1\rangle$, $|\psi_2\rangle$ について $\langle\psi_1|\psi_2\rangle$, $\||\psi_1\rangle\|$, $\||\psi_2\rangle\|$ をそれぞれ求めよ．また，内積の絶対値 $\Big|\langle\psi_1|\psi_2\rangle\Big|$ とノルムの積 $\||\psi_1\rangle\|\cdot\||\psi_2\rangle\|$ を求めて，両者の大小を比べよ．

$$|\psi_1\rangle = \begin{pmatrix} 4+i \\ -1+2i \end{pmatrix} \quad |\psi_2\rangle = \begin{pmatrix} 3-2i \\ -3i \end{pmatrix} \tag{37}$$

問 8. 次の数列ベクトルについてノルム 2 乗 (23) 式を計算し，各ベクトルが ℓ^2 空間の元になっているかそうでないか判定せよ．ℓ^2 の元である場合は，そのノルムも求めよ．

$$|\phi_1\rangle = \begin{pmatrix} -1 \\ 1 \\ -1 \\ 1 \\ \vdots \end{pmatrix} \tag{38}$$

$$|\phi_2\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 1/\sqrt{2} \\ 1/2 \\ 1/(2\sqrt{2}) \\ \vdots \end{pmatrix} \tag{39}$$

$$|\phi_3\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 1/\sqrt{2} \\ 1/\sqrt{3} \\ 1/\sqrt{4} \\ \vdots \end{pmatrix} \tag{40}$$

$$|\phi_4\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ z \\ z^2/\sqrt{2!} \\ z^3/\sqrt{3!} \\ z^4/\sqrt{4!} \\ \vdots \end{pmatrix} \quad z \in \mathbb{C} \tag{41}$$

問 9. α は正の実数とする．次の関数のグラフを書け．また，定義式 (25) どおりに $k=1,2$ について $\|\psi_k\|^2$ を計算せよ．ψ_k が L^2 空間の元になるための α についての条件を書け．

$$\psi_1(x) = \begin{cases} 1 & (-1 \le x \le 1) \\ \frac{1}{|x|^\alpha} & (x \le -1 \text{ または } x \ge 1) \end{cases} \tag{42}$$

$$\psi_2(x) = \begin{cases} \frac{1}{|x|^\alpha} & (-1 \le x < 0 \text{ または } 0 < x \le 1) \\ & (x < -1 \text{ または} \\ 0 & x = 0 \text{ または } x > 1) \end{cases} \tag{43}$$

問 10. (i) 任意の複素数 z, w に対して

$$|\phi_z\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ z \\ z^2/\sqrt{2!} \\ z^3/\sqrt{3!} \\ z^4/\sqrt{4!} \\ \vdots \end{pmatrix} \quad z \in \mathbb{C} \tag{44}$$

とおいたとき，式(21)に従って内積$\langle\phi_z|\phi_w\rangle$の値を求めよ．
(ii) $|\langle\phi_z|\phi_w\rangle|^2$を求めよ．
(iii) $\langle\phi_z|\phi_z\rangle$を求めよ．
(iv) $|\langle\phi_z|\phi_w\rangle|^2 \leq \langle\phi_z|\phi_z\rangle\langle\phi_w|\phi_w\rangle$が成り立っていることを示せ．また，等号成立条件を示せ．

基底

複素数を係数体とするベクトル空間$\mathscr{H}$と，ベクトルの組$\{|\chi_1\rangle, |\chi_2\rangle, \cdots, |\chi_n\rangle\}$があり，任意のベクトル$|\psi\rangle \in \mathscr{H}$に対して

$$|\psi\rangle = a_1|\chi_1\rangle + a_2|\chi_2\rangle + \cdots + a_n|\chi_n\rangle \tag{45}$$

となるような複素数 $a_1, a_2, \cdots, a_n$ が一意的に存在するとき，ベクトルの組$\{|\chi_1\rangle, |\chi_2\rangle, \cdots, |\chi_n\rangle\}$は$\mathscr{H}$の**基底** (basis) だと言う．(45)のような式をベクトル$|\psi\rangle$の**展開式**といい，複素数$a_1, a_2, \cdots, a_n$を**展開係数**という．また，基底の元の個数nをベクトル空間$\mathscr{H}$の**次元** (dimension) という．

さらに，条件

$$\langle\chi_r|\chi_s\rangle = \delta_{rs} = \begin{cases} 1 & (r = s) \\ 0 & (r \neq s) \end{cases} \tag{46}$$

を満たすような基底$\{|\chi_1\rangle, |\chi_2\rangle, \cdots, |\chi_n\rangle\}$を$\mathscr{H}$の**正規直交基底** (orthonomal basis) と言う．どんなベクトルでも$\{|\chi_1\rangle, |\chi_2\rangle, \cdots, |\chi_n\rangle\}$で展開できるというニュアンスを強調して，$\{|\chi_1\rangle, |\chi_2\rangle, \cdots, |\chi_n\rangle\}$を**完全正規直交系** (complete orthonormal set, CONS) とも言う．このとき，展開式

$$|\psi\rangle = \sum_{s=1}^{n} a_s|\chi_s\rangle \tag{47}$$

の両辺に$\langle\chi_r|$を内積して

$$\begin{aligned} \langle\chi_r|\psi\rangle &= \sum_{s=1}^{n} a_s\langle\chi_r|\chi_s\rangle \\ &= \sum_{s=1}^{n} a_s\delta_{rs} \\ &= a_r \end{aligned} \tag{48}$$

により展開係数$a_r = \langle\chi_r|\psi\rangle$を得る．つまり，

$$|\psi\rangle = \sum_{r=1}^{n} a_r|\chi_r\rangle = \sum_{r=1}^{n} |\chi_r\rangle\langle\chi_r|\psi\rangle \tag{49}$$

が成り立つ．このことを形式的に

$$\sum_{r=1}^{n} |\chi_r\rangle\langle\chi_r| = 1 \tag{50}$$

とも書く．

問 11. $\{|\chi_1\rangle, |\chi_2\rangle, \cdots\}$が正規直交基底であるとき，

$$|\psi\rangle = a_1|\chi_1\rangle + a_2|\chi_2\rangle + \cdots \tag{51}$$
$$|\phi\rangle = b_1|\chi_1\rangle + b_2|\chi_2\rangle + \cdots \tag{52}$$

に対して

$$\langle\phi|\psi\rangle = b_1^* a_1 + b_2^* a_2 + \cdots \tag{53}$$

が成り立つことを示せ．

参考文献

[1] 北野正雄「量子力学の基礎」(共立出版)

[2] ファインマン，レイトン，サンズ「ファインマン物理学5：量子力学」(岩波書店)

[3] シッフ「量子力学」(吉岡書店)

[4] 上田正仁「現代量子物理学」(培風館)

[5] 谷村省吾「21世紀の量子論入門」(現代数学社『理系への数学』2010年5月号から2012年4月号まで連載)

[6] 竹内外史「線形代数と量子力学」(裳華房)

[7] 佐藤文隆「量子力学ノート」(サイエンス社)

[8] 新井朝雄「ヒルベルト空間と量子力学」(共立出版)

[9] 江沢洋「だれが原子をみたか」(岩波書店)