24. 量子論におけるブラ・ケット表記

詳説 物理化学Monographシリーズ

量子論におけるブラ・ケット表記

§0 疑問の発生

多くの量子力学のテキストに，波動関数の積の積分[1]

$$\int \psi^* \psi \mathrm{d}\tau \tag{1}$$

をブラ・ケット表記

$$\langle \psi | \psi \rangle \tag{2}$$

によりシンプルに表すことができると書かれている[2]。その際，ブラ $\langle \psi |$ とケット $| \psi \rangle$ はそれぞれ次のように波動関数に対応し，

$$\langle \psi | \equiv \psi^* \tag{3}$$

$$| \psi \rangle \equiv \psi \tag{4}$$

互いに複素共役な波動関数を表していると説明される(ことが多い)[3]。しかし，この解説に対して下記のような疑問(や要望)は生じないだろうか。

Q1. ブラとケットが互いに複素共役な波動関数を表すとして，その積である式(2)がなぜ積分という意味をもつのだろうか？ブラとケットが組み合わさるときだけ積分の意味をもつというルール[4]を設けるのだろうか？

Q2. 波動関数群が正規直交系[5]をなすとき，波動関数自身の内積が1であり，異なる波動関数間の内積が0であることを，

$$\int \psi^* \psi \mathrm{d}\tau = \langle \psi | \psi \rangle = 1 \tag{5}$$

$$\int \psi^* \phi \mathrm{d}\tau = \langle \psi | \phi \rangle = 0 \tag{6}$$

---

1 $\mathrm{d}\tau$ は波動関数を表す“座標”の体積要素である。座標は必ずしも(長さの次元をもつ)位置ではなく，角度や質量加重座標などいろいろなものがあり，分子の振動モードを表す基準座標もその1つである。

2 bracket(ブラケット)は，米語では角括弧[ ]，英語では丸括弧( )の意味であり，山形括弧〈 〉は angle bracket と呼ばれる。量子論では，〈 |がブラ(bra)，| 〉がケット(ket)である。ブラとケットは Dirac による命名である。

3 記号「≡」は，常に成立する恒等式や幾何学での合同の意味に用いられることが多いが，本書では定義の意味に用いる。「X を Y で定義する」を意味する「X := Y」や「X ≜ Y」などの数学記号と同じ意味である。なお，「:=」と「=: 」はそれぞれ，colon equals(コロンイコール)，equals colon(イコールコロン)と呼ばれ，コロンの付いた側のものをコロンのない側のもので定義するという意味である。「:=」と「=: 」は，何をどう定義するかが「≡」よりも明解なので，本書では「:=」と「=: 」を利用する。

4 「ブラとケットを組み合わせて書くと積分の意味をもつ」とか，「完全なブラケットを書いたときはいつでも積分することを意味する」と説明している成書もあるが，このルールはかなり御都合主義に感じられる。

5 規格直交系とも呼ぶ。

と表す。式(5)や式(6)の左辺の積分は数学(代数学)の内積の定義[1]を満たすから，波動関数もベクトルであるといえるが，波動関数がベクトル的に扱えることや“直交”することをもう少し(幾何ベクトルや数ベクトルのように)直感的に理解することはできないだろうか？[2]

本書は，上記2点に関連してブラ・ケット表記[3]の意味と有効性を習得し，波動関数および演算子の本質を理解するために書かれた monograph である。

§1 ブラとケットの意味

まず，Q1から考えるために，波動関数の積の積分の中身を調べてみよう。ある系の状態[4]を表す波動関数ψは，正規直交基底関数群[5] $\{u_i\}$ の線形結合により表せるから，

$$\psi = \sum_i a_i u_i \tag{7}$$

と書くことができる。別の状態を表す波動関数ϕも同様に基底関数を用いて

$$\phi = \sum_j b_j u_j \tag{8}$$

と書ける(式(7)の基底関数の添字と式(8)の基底関数の添字に異なる文字(i と j)を用いたが，基底関数は同じものである)。なお，波動関数ψとϕがいずれも規格化されているとすれば，展開係数[6]は

$$\sum_i |a_i|^2 = 1 \tag{9}$$

$$\sum_j |b_j|^2 = 1 \tag{10}$$

---

[1] 任意のベクトル $\boldsymbol{a}, \boldsymbol{b}, \boldsymbol{c}$ が，次の(i)～(iv)の条件，(i) $(\boldsymbol{a},\boldsymbol{b}) = (\boldsymbol{b},\boldsymbol{a})^*$, (ii) $(\boldsymbol{a}+\boldsymbol{b},\boldsymbol{c}) = (\boldsymbol{a},\boldsymbol{c})+(\boldsymbol{b},\boldsymbol{c})$, (iii) $(k\boldsymbol{a},\boldsymbol{b}) = (\boldsymbol{a},k^*\boldsymbol{b}) = k(\boldsymbol{a},\boldsymbol{b})$, (iv) $(\boldsymbol{a},\boldsymbol{a})$ は0または正の実数(ただし，「*」は複素共役，k は定数を表す)，を満たすとき，$(\boldsymbol{x},\boldsymbol{y})$ をベクトル $\boldsymbol{x}$ と $\boldsymbol{y}$ の内積と定義する。内積が定義されるベクトル空間を計量ベクトル空間(あるいは，内積空間，Hilbert 空間(ヒルベルト空間，厳密には前ヒルベルト空間))と呼ぶ。

[2] 代数学でのベクトルに精通している人にとって，Q2は疑問(要望)とはならないであろう。

[3] 文献1, 2は表記法を「内積記法」，「折衷記法」，「ブラケット記法」の3つに分類している。

内積記法	(ψ,χ)	$(\psi,\hat{A}\chi)$	$(\hat{A}^\dagger\psi,\chi)$
折衷記法	$\langle\psi\|\chi\rangle$	$\langle\psi\|\hat{A}\chi\rangle$	$\langle\hat{A}^\dagger\psi\|\chi\rangle$
ブラケット記法	$\langle\psi\|\chi\rangle$	$\langle\psi\|\hat{A}\|\chi\rangle$	$\langle\psi\|\hat{A}\|\chi\rangle$

内積記法は数学での内積表記法であり，ブラケット記法は創始者である Dirac オリジナルの表記法である。折衷記法は内積記法を模してブラやケットの中に演算子を記すことを許した上でブラ・ケットを用いる表記法である(Dirac オリジナルのブラケット記法では演算子をブラやケットの中に書かない)。本書は，文献3がブラケット記法と同じ優れた特徴(演算子がブラにもケットにも作用できる)をもつ表記法として紹介している「行列記法」も利用している。行列記法は文献4にも紹介されている。

[4] 系の固有状態を考える必要はなく，固有状態を重ね合わせた状態でも構わない。

[5] 球面調和関数や規格化された Hermite(エルミート)多項式などである。

[6] 線形結合の係数は展開係数とも呼ばれる。

を満たす。式(6)のψとϕに式(7)と式(8)を代入すると，

$$\int \psi^* \phi \mathrm{d}\tau = \int \sum_i \sum_j a_i^* b_j u_i^* u_j \mathrm{d}\tau \tag{11-1}$$

$$= \sum_i \sum_j a_i^* b_j \int u_i^* u_j \mathrm{d}\tau \tag{11-2}$$

$$= \sum_i \sum_j a_i^* b_j \delta_{ij} \tag{11-3}$$

$$= \sum_i a_i^* b_i \tag{11-4}$$

となる(δ_{ij}はKronecker(クロネッカー)のデルタ)。式(7)と式(8)を行列表現すると，それぞれ

$$\psi = (u_1, u_2, \cdots)\begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ \vdots \end{pmatrix} \tag{12}$$

$$\phi = (u_1, u_2, \cdots)\begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \\ \vdots \end{pmatrix} \tag{13}$$

となるから[1]，式(11)-4は式(12)および式(13)の展開係数の行列を用いて

$$\sum_i a_i^* b_i = (a_1^*, a_2^*, \cdots)\begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \\ \vdots \end{pmatrix} \tag{14}$$

と表せる。式(11) = 式(14)であるから，積分$\int \psi^* \phi \mathrm{d}\tau$は，積分される波動関数を基底関数で展開した係数を使って計算できる。そこで，展開係数の行列表現(列ベクトル表記)をケット記号で表すと，

$$\boxed{|\psi\rangle \equiv \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ \vdots \end{pmatrix}} \tag{15}$$

となり[2]，ケットの共役を転置複素共役行列[3]に対応させて，これをブラ記号で表すと

[1] 基底関数(基底ベクトル)を行ベクトル，成分を列ベクトルで書くのが数学的に正しい表記である。この点に関しては文献7および拙書(文献11)を参照。
[2] 行列の成分$\{a_i\}$は基底関数に依存するので，系の1つの状態について一義的に決まるわけではない。
[3] 転置して複素共役をとることをHermite共役(エルミート共役)と呼ぶ。行列$\boldsymbol{A}$のHermite共役は$\boldsymbol{A}^\dagger$で表すこと

$$\boxed{\langle\psi| \equiv (a_1^*, a_2^*, \cdots)} \tag{16}$$

となるから[1]，式(14)は

$$\sum_i a_i^* b_i = (a_1^*, a_2^*, \cdots)\begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \\ \vdots \end{pmatrix} \equiv \langle\psi|\phi\rangle \tag{17}$$

と表せる[2]。式(11) = 式(17)であるから，

$$\int \psi^* \phi \mathrm{d}\tau = \langle\psi|\phi\rangle \tag{18}$$

が成り立ち，波動関数の積の積分がブラとケットの積に等しくなる(Q1が解決)。式(18)の等号は関数の積の積分と行列の積の“値が等しい”という意味であり，$\langle\bigcirc|\triangle\rangle$という表記自体に$\bigcirc^*$と△の積を“積分する”というルールが組み込まれているわけではない。ブラ・ケット表記における重要ポイントは，ケットを基底関数による展開係数の列ベクトルに(式(15))，ブラをその転置複素共役行列(行ベクトル)に(式(16))対応させることができ[3]，その結果として，波動関数の積の積分(式(18)左辺)が2つの数ベクトル(式(15), (16))の内積(式(17))に等しくなるということである(Q2が解決)。言い換えると，ブラ・ケット表記は行列力学(代数学)的表現であり，波動関数表記は波動力学(解析学)的表現である。つまり，式(18)の左辺がSchrödinger の波動力学に，右辺が Heisenberg の行列力学に対応しており，両者が同じ結果を与えることを示している。以上より，波動関数とψ とケット$|\psi\rangle$は同じものではないから，$|\psi\rangle$を波動関数と呼ぶのは不適切である。ブラもケットもベクトルに対応するから，$|\psi\rangle$と$\langle\psi|$は「状態ベクトル[4]」と呼ばれる。

が多く($\boldsymbol{A}^\dagger={}^t\boldsymbol{A}^*$ である。ここで，${}^t\boldsymbol{A}$ は $\boldsymbol{A}$ の転置行列，$\boldsymbol{A}^*$ は $\boldsymbol{A}$ の複素共役行列である)，$\boldsymbol{A}^\dagger$ は随伴行列(adjoint matrix)とも呼ばれる。 行列 $\boldsymbol{A}$ から $\boldsymbol{A}^\dagger$ を作ることを「随伴をとる」と表現することもある。なお，列(行)ベクトルの転置は行(列)ベクトルになる。

[1] 文献7, p. 83の記述を借りて線形代数学的に表現すると，「U の正規直交基を $\boldsymbol{a}_1, \boldsymbol{a}_2, \cdots, \boldsymbol{a}_n$ としたとき，

$\boldsymbol{x} = x_1\boldsymbol{a}_1 + x_2\boldsymbol{a}_2 + \cdots + x_n\boldsymbol{a}_n$ に対して成分を対応させる対応 $\boldsymbol{x} \to \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_n \end{pmatrix}$ は U から n 次元数ベクトル空間 V への一対一写像であった。いま，$\boldsymbol{x} \to (x_i)$，$\boldsymbol{y} \to (y_i)$ とするとき，内積の性質(i) ~ (iv)を繰り返し用いて $(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y}) = (\Sigma x_i\boldsymbol{a}_i, \Sigma y_i\boldsymbol{a}_i) = \Sigma x_i\overline{y}_i$ を得る。すなわち，$(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y})$ は対応する数ベクトル (x_i)，(y_i) の内積と一致する。したがって n 次元計量ベクトル空間 U は一組の正規直交系をきめておけば，計量空間としての n 次元ベクトル空間 V と同一視することができる」となるが，この表現は難解に感じられるのではないだろうか(筆者は，大学初年度に線形代数学を学んだ時点では，この表現のありがたみを理解することができなかった)。

[2] ブラやケットを行列と同一視しているだけであり，行列と同一ではない。つまり，行列記法はブラとケットの表し方の1つにすぎず，ブラやケットが展開係数を成分とする行列そのものと考えてはならない。

[3] ブラとケットがベクトルを表すことを明示するために，ブラをブラベクトル，ケットをケットベクトルと呼ぶこともある(文献5, 6)。

[4] 状態ベクトルはベクトルという言葉を含んでいるが，向きと大きさをもった矢印としてのベクトルに結びつける必要はなく，数学的に定義されるベクトル空間を形成する(＝ベクトル空間が定義される演算を満たす)要素

2つのベクトルの内積が0であればベクトルは“直交”するから，波動関数の積の積分が0であるとき(式(6))，波動関数が直交するといえる。なお，式(17)で$\psi = \phi$のときは，ベクトル自身の内積

$$(a_1^*, a_2^*, \cdots)\begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ \vdots \end{pmatrix} = \sum_i |a_i|^2 = 1 = \langle \psi | \psi \rangle \tag{19}$$

となるので式(5)になる。式(18)だけを眺めると，式(3), (4)に示した，$\langle \psi | \equiv \psi^*$，$| \phi \rangle \equiv \phi$という対応(定義)が妥当に見えるが，記号の置き換えと考えるのは正しくない。ϕは式(13)であり，ψの複素共役(行列に対しては転置複素共役)は

$$\psi^* \equiv (a_1^*, a_2^*, \cdots)\begin{pmatrix} u_1^* \\ u_2^* \\ \vdots \end{pmatrix} \tag{20}$$

であるから，式(13)と式(20)を$\int \psi^* \phi \, \mathrm{d}\tau$に代入すると，

$$\int \psi^* \phi \, \mathrm{d}\tau = \int (a_1^*, a_2^*, \cdots)\begin{pmatrix} u_1^* \\ u_2^* \\ \vdots \end{pmatrix} \left(u_1, u_2, \cdots\right) \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \\ \vdots \end{pmatrix} \mathrm{d}\tau \qquad \text{(21)-1}$$

$$= (a_1^*, a_2^*, \cdots)\left[\int \begin{pmatrix} u_1^* \\ u_2^* \\ \vdots \end{pmatrix} \left(u_1, u_2, \cdots\right) \mathrm{d}\tau \right] \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \\ \vdots \end{pmatrix} \qquad \text{(21)-2}$$

$$= (a_1^*, a_2^*, \cdots)\begin{pmatrix} \int u_1^* u_1 \mathrm{d}\tau & \int u_1^* u_2 \mathrm{d}\tau & \cdots \\ \int u_2^* u_1 \mathrm{d}\tau & \int u_2^* u_2 \mathrm{d}\tau & \cdots \\ \cdots & \cdots & \cdots \end{pmatrix} \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \\ \vdots \end{pmatrix} \qquad \text{(21)-3}$$

$$= (a_1^*, a_2^*, \cdots)\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & \cdots \\ 0 & 1 & 0 & \cdots \\ 0 & 0 & 1 & \cdots \\ \cdots & \cdots & \cdots & \ddots \end{pmatrix} \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \\ \vdots \end{pmatrix} \qquad \text{(21)-4}$$

である。なお，線形代数学の観点から厳密に表現すると，ブラは「ケットに作用して数(複素数)を与える線形写像」であり，線形汎関数(linear functional)と呼ばれる。線形汎関数は線形形式(linear form)，1次形式(linear form)，1-形式(one-form)，余(よ)ベクトル(covector)とも呼ばれる。ブラが作るベクトル空間をケットが作るベクトル空間の双対(そうつい)空間という。同様の見方でケットを表現すると，「数に作用してベクトルを与える線形写像」となる。また，ベクトルに作用して別のベクトルを与える線形写像が演算子(別名：線形作用素)である。

$$= (a_1^*, a_2^*, \cdots)\begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \\ \vdots \end{pmatrix} \tag{21-5}$$

$$= \sum_i a_i^* b_i = \langle \psi \mid \phi \rangle \tag{21-6}$$

となり，(当然ながら)式(11)と同じ結果が得られる(式(21)-4の中央の単位行列(対角成分がすべて1の行列)は式(11)-2の Kronecker のデルタに対応している)。したがって，展開に用いた基底関数をあらわに考えなくても，(基底関数同士の積の部分が単位行列になるので)展開係数だけを行および列ベクトルとして扱っても問題はない。このことが，式(15), (16)のように，ブラ・ケットを展開係数の行列に対応[1]させて扱える理由である。

§2 基底ベクトルのブラ・ケット表記

式(7)の両辺に左からu_j^*をかけて積分すると，

$$\int u_j^* \psi \, \mathrm{d}\tau = \int \sum_i a_i u_j^* u_i \, \mathrm{d}\tau \tag{22-1}$$

$$= \sum_i a_i \int u_j^* u_i \, \mathrm{d}\tau \tag{22-2}$$

$$= \sum_i a_i \delta_{ji} \tag{22-3}$$

$$= a_j \tag{22-4}$$

となるから，式(7)の展開係数a_iは

$$a_i = \int u_i^* \psi \, \mathrm{d}\tau \tag{23}$$

と表せる。式(23)の右辺はブラ・ケット表記により

$$a_i = \langle u_i \mid \psi \rangle \tag{24}$$

と書けるから(直下の付記参照)，式(15)は

$$\mid \psi \rangle \equiv \begin{pmatrix} \langle u_1 \mid \psi \rangle \\ \langle u_2 \mid \psi \rangle \\ \vdots \end{pmatrix} \tag{25}$$

と表すこともできる。式(25)からも，式(15)と式(16)について指摘したように，ブラやケットの成分が基底関数$\{u_i\}$に依存することがわかる[2]。

[1] 便宜上，行列に対応させて表記しているだけであり，ブラやケットは行列自身ではない。

[2] 逆に，基底関数を決めなければ状態ベクトルを行列表示することはできない。

(付記)

式(23)が式(24)により表される根拠を，式(3)や式(4)のように，

$$|\psi\rangle \equiv \psi \tag{26}$$

$$\langle u_i| \equiv u_i^* \tag{27}$$

という形式的な対応で考えるべきではない。式(15)と式(16)のように，波動関数を基底関数で展開した係数を成分とする1行あるいは1列の行列をブラおよびケットをに対応させるのであれば，基底関数のブラ $\langle u_i|$ およびケット $|u_i\rangle$ も，それぞれ行ベクトルおよび列ベクトルに対応しなければならない。 u_i に対応するブラまたはケットを知るには基底関数による展開を行う必要があるが，u_i は基底関数自身なので，基底関数を基底関数で展開する必要が生じる。(そんなことできるのだろうかと少々戸惑うが)式(12)や式(13)の表記に忠実に展開すると，たとえば， u_1 は

$$u_1 = (u_1, u_2, \cdots, u_i, \cdots)\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ \vdots \end{pmatrix} \tag{28}$$

と表され， u_2 は

$$u_2 = (u_1, u_2, \cdots, u_i, \cdots)\begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ \vdots \end{pmatrix} \tag{29}$$

と表されるから， u_i は

$$u_i = (u_1, u_2, \cdots, u_i, \cdots)\begin{array}{l} \left(\begin{array}{c} 0 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \\ 1 \\ 0 \\ \vdots \end{array}\right) \end{array} \begin{array}{l} \leftarrow \text{第}1\text{行} \\ \leftarrow \text{第}2\text{行} \\ \\ \leftarrow \text{第}(i-1)\text{行} \\ \leftarrow \text{第}i\text{行} \\ \leftarrow \text{第}(i+1)\text{行} \\ \\ \end{array} \tag{30}$$

という構造をもつ。式(28)～(30)の展開係数行列(列ベクトル)部をケットに対応させると，

$$|u_1\rangle \equiv \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ \vdots \end{pmatrix}, \qquad |u_2\rangle \equiv \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ \vdots \end{pmatrix} \tag{31}$$

および,

$$|u_i\rangle \equiv \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \\ 1 \\ 0 \\ \vdots \end{pmatrix} \begin{array}{l} \leftarrow 第1行 \\ \leftarrow 第2行 \\ \\ \leftarrow 第(i-1)行 \\ \leftarrow 第 i 行 \\ \leftarrow 第(i+1)行 \\ \\ \end{array} \tag{32}$$

となる。$\langle u_i|$ は $|u_i\rangle$ の転置複素共役行列となるから，

$$\langle u_i| \equiv (0, 0, \cdots 0, \underset{\substack{\uparrow \\ 第 i 列}}{1}, 0, \cdots) \tag{33}$$

と表せる(成分がすべて実数であるから転置するだけでよい)。$|\psi\rangle$ は式(15)により次式

$$|\psi\rangle \equiv \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ \vdots \\ a_i \\ \vdots \end{pmatrix} \tag{34}$$

で与えられるから，式(33)と式(34)から $\langle u_i|\psi\rangle$ を作ると，

$$\langle u_i|\psi\rangle \equiv (0, 0, \cdots 0, 1, 0, \cdots) \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ \vdots \\ a_i \\ \vdots \end{pmatrix} = a_i \tag{35}$$

つまり，式(24)が得られる。以上のことから，(式(18)について述べたのと同様に)式(23)と式(24)の同等性

$$a_i = \int u_i^* \psi \, \mathrm{d}\tau = \langle u_i|\psi\rangle \tag{36}$$

は $\langle u_i| \equiv u_i^*$ と $|\psi\rangle \equiv \psi$ という定義(約束)にもとづくわけではなく，数学的に2つの関数 u_i^* と ψ の積の積分の値が式(33)で表される $\langle u_i|$ と式(34)で表される $|\psi\rangle$ の積の値に等しいことを表しているのである。前節で波動関数 ψ と状態ベクトル $|\psi\rangle$ を区別したように，基底関数 u_i とそのケット $|u_i\rangle$ も区別する必要がある。ブラは行ベクトル，ケットは列ベクトルに対応するから，$\langle u_i|$ と $|u_i\rangle$ を[1]「基底ベクトル[2]」と呼ぶ。

---

1 $\langle u_i|$ の集合 $\{\langle u_i|\}$ は $\{|u_i\rangle\}$ の双対(そうつい)基底と呼ばれる。

2 第2版第7刷以前は「基底ベクトル」を「固有ベクトル」と記していましたが，1次独立なベクトルの組という意味にもとづいて，第2版第8刷以降は「基底ベクトル」と記します。

§3 単位演算子と射影演算子

式(17)

$$\langle \psi | \phi \rangle = \sum_i a_i^* b_i \tag{37}$$

に，

$$a_i^* = \langle u_i | \psi \rangle^* = \langle \psi | u_i \rangle \tag{38}$$

および

$$b_i = \langle u_i | \phi \rangle \tag{39}$$

を代入すると，

$$\langle \psi | \phi \rangle = \sum_i \langle \psi | u_i \rangle \langle u_i | \phi \rangle \tag{40}$$

となり，式(40)で左からかけられている$\langle \psi |$を除くと，

$$| \phi \rangle = \sum_i | u_i \rangle \langle u_i | \phi \rangle = \sum_i \langle u_i | \phi \rangle | u_i \rangle \tag{41}$$

を得る[1]。この式の構成要素の意味を考えると，$\langle u_i | \phi \rangle$は(式(24)からわかるように)，状態ベクトル$| \phi \rangle$の中の基底ベクトル$| u_i \rangle$方向への射影成分である。その射影成分$\langle u_i | \phi \rangle$を基底ベクトル全体$\{| u_i \rangle\}$にかけて和をとると，元の状態ベクトル自身$| \phi \rangle$が得られることを式(41)は表している。ベクトルを成分に分けてから再び和をとると元のベクトルに戻るのは当然であり，式(41)は式(24)を用いて式(8)を書き換えただけに見えるかもしれない。しかし，式(41)の中辺には，(式(8)型の表記では得られない)次式が含まれている。

$$\sum_i | u_i \rangle \langle u_i | \tag{42}$$

式(42)は演算子の1つであり，式(41)からわかるように，状態ベクトルに作用しても何ら変化を与えないので「単位演算子」と呼ばれる[2]。作用しても何も効果がない演算子なので意味がないように感じられるかもしれないが，(後述するように)状態ベクトルや波動関数の記述で威力を発揮する重要なものである。なお，すでに述べたように，式(42)の要素

$$| u_i \rangle \langle u_i | \tag{43}$$

は，状態ベクトルに作用すると基底ベクトル$| u_i \rangle$方向への射影ベクトルを与えるので，「射影演算子」と呼ばれる[3]。

---

[1] $\langle u_i | \phi \rangle$は数であるから，式の中のどこに配置してもよい。

[2] 単位射影演算子とも呼ばれる。

[3] 素射影子とも呼ばれる。

(付記)

射影演算子

$$|u_i\rangle\langle u_i| \tag{44}$$

は，式(32)および式(33)の表記に従うと，

$$|u_i\rangle\langle u_i| \equiv \begin{array}{r} \text{第}1\text{行}\rightarrow \\ \text{第}2\text{行}\rightarrow \\ \\ \text{第}(i-1)\text{行}\rightarrow \\ \text{第}i\text{行}\rightarrow \\ \text{第}(i+1)\text{行}\rightarrow \\ \\ \end{array} \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \\ 1 \\ 0 \\ \vdots \end{pmatrix} \underset{\substack{\uparrow \\ \text{第}i\text{列}}}{\left(0, 0, \cdots, 0, 1, 0, \cdots\right)} = \begin{array}{c} \begin{array}{ccccccc} & & & & \text{第}i\text{列} & & \\ & & & & \downarrow & & \end{array} \\ \begin{pmatrix} 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 & 0 & \cdots \\ 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 & 0 & \cdots \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 & 0 & \cdots \\ 0 & 0 & \cdots & 0 & 1 & 0 & \cdots \\ 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 & 0 & \cdots \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \end{pmatrix} \end{array} \begin{array}{l} \\ \\ \\ \\ \\ \\ \leftarrow \text{第}i\text{行} \\ \\ \\ \end{array} \tag{45}$$

により表される i 行 i 列成分のみが1の行列である。射影演算子 $|u_i\rangle\langle u_i|$ を状態ベクトル $|\phi\rangle$ に作用させると，

$$|u_i\rangle\langle u_i|\phi\rangle \equiv \begin{pmatrix} 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 & 0 & \cdots \\ 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 & 0 & \cdots \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 & 0 & \cdots \\ 0 & 0 & \cdots & 0 & 1 & 0 & \cdots \\ 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 & 0 & \cdots \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \end{pmatrix} \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \\ \vdots \\ b_{i-1} \\ b_i \\ b_{i+1} \\ \vdots \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \\ b_i \\ 0 \\ \vdots \end{pmatrix} = b_i \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \\ 1 \\ 0 \\ \vdots \end{pmatrix} \equiv b_i|u_i\rangle \tag{46}$$

となり，その名の通り，射影演算子 $|u_i\rangle\langle u_i|$ が状態ベクトル $|\phi\rangle$ から基底ベクトル $|u_i\rangle$ 方向の射影ベクトル $b_i|u_i\rangle$ を抜き出している。式(42)は，式(44)つまり式(45)の $i = 1, 2, \cdots$ に関する和であるから，

$$\sum_i |u_i\rangle\langle u_i| \equiv \begin{pmatrix} 1 & 0 & \cdots & 0 & 0 & 0 & \cdots \\ 0 & 1 & \cdots & 0 & 0 & 0 & \cdots \\ \cdots & \cdots & \ddots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ 0 & 0 & \cdots & 1 & 0 & 0 & \cdots \\ 0 & 0 & \cdots & 0 & 1 & 0 & \cdots \\ 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 & 1 & \cdots \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \ddots \end{pmatrix} \tag{47}$$

となるが，これは単位行列であるから，式(42)は単位行列 $\boldsymbol{E}$ に等しい。単位演算子は単位行列であるから，行列の積の中に挿入しても何ら影響がない[1]。

§4 状態ベクトルと波動関数の関係

4.1 波動関数の本質

式(7)や式(8)では，i によって区別された離散的固有値をもつ基底関数 $\{u_i\}$ で波動関数 ψ や ϕ を表したが，連続量の固有値をもつ基底関数で展開することはできないだろうか。以下で

[1] ブラやケットあるいは演算子の積のどこにでも挿入することができる。

は，位置演算子の固有関数による展開を考える。位置(あるいは座標) $\boldsymbol{r}$ 自身は演算子(位置演算子)であり(以降，演算子として書くときは「^」を付けて $\hat{\boldsymbol{r}}$ と記す)，固有値 r と固有ベクトル $|\boldsymbol{r}\rangle$ をもっており[1]，

$$\hat{\boldsymbol{r}}|\boldsymbol{r}\rangle = r|\boldsymbol{r}\rangle \tag{48}$$

の関係がある(r は連続量である)。固有ベクトル $|\boldsymbol{r}\rangle$ は正規直交系をなしているから系の任意の状態を表現するための基底ベクトルとなりうる。たとえば，x 軸に関する位置演算子 $\hat{x}$ は固有値 x をもち($\hat{x}|x\rangle = x|x\rangle$)，固有ベクトル $|x\rangle$ は

$$\langle x|x'\rangle = \delta(x-x') \tag{49}$$

により規格直交系をなしている(固有値 x が連続量であるから，$\delta(x-x')$ は Dirac のデルタ関数である[2])。$|\boldsymbol{r}\rangle$ を基底ベクトルとして単位演算子を作ると，

$$\sum_{\boldsymbol{r}}|\boldsymbol{r}\rangle\langle\boldsymbol{r}| \tag{50}$$

となるが，$|\boldsymbol{r}\rangle$ の固有値 r は(離散的ではなく)連続量であるから，和ではなく積分表記して

$$\int \mathrm{d}\boldsymbol{r}\,|\boldsymbol{r}\rangle\langle\boldsymbol{r}| \tag{51}$$

と書く[3]。これを系の状態ベクトル $|\phi\rangle$ に作用させると

$$|\phi\rangle = \int \mathrm{d}\boldsymbol{r}\,|\boldsymbol{r}\rangle\langle\boldsymbol{r}|\phi\rangle = \int \mathrm{d}\boldsymbol{r}\langle\boldsymbol{r}|\phi\rangle|\boldsymbol{r}\rangle \tag{52}$$

となる(離散固有値をもつ基底ベクトル[4]による展開式(41)に相当)。ここで，$\langle\boldsymbol{r}|\phi\rangle$ は状態ベクトル $|\phi\rangle$ の特定の位置 $\boldsymbol{r}$ での値，つまり，特定の位置 $\boldsymbol{r}$ での波動関数の値 $\phi(\boldsymbol{r})$ を与えるから，

$$\boxed{\phi(\boldsymbol{r}) = \langle\boldsymbol{r}|\phi\rangle} \tag{53}$$

となる(離散基底系の式(24)に相当)。式(52)と(53)から得られる

$$|\phi\rangle = \int \mathrm{d}\boldsymbol{r}\,|\boldsymbol{r}\rangle\phi(\boldsymbol{r}) = \int \mathrm{d}\boldsymbol{r}\,\phi(\boldsymbol{r})|\boldsymbol{r}\rangle \tag{54}$$

を式(41)と比較すると，離散基底系(式(41))の展開係数 $b_i = \langle u_i|\phi\rangle$ が連続基底系(式(54))では波動関数 $\phi(\boldsymbol{r})$ に置き換わっていることになる。つまり，波動関数 $\phi(\boldsymbol{r})$ は状態ベクトル $|\phi\rangle$ を連

[1] ブラあるいはケットで表すときは関数ではなくベクトルである。
[2] 離散固有値をもつ固有関数は Kronecker のデルタにより，連続固有値をもつ固有関数は Dirac のデルタ関数により規格化される(文献8，第7章あるいは拙書(文献12)を参照)。
[3] 連続固有値をもつ固有関数のブラやケットを行列(行ベクトルや列ベクトル)の形で表すことはできない。あえてイメージするとすれば，成分が連続的に書かれた(塗りつぶされた)行列である。
[4] 「離散固有値をもつ基底による展開」という表現は冗長なので，以下では「離散基底系」と記す。また，連続固有値をもつ基底による場合は「連続基底系」と記す。

続基底ベクトル(位置演算子の固有ベクトル$|\boldsymbol{r}\rangle$)で表す場合の展開係数である[1]。これまで繰り返し注意したように，$|\phi\rangle = \phi(\boldsymbol{r})$ **ではない**ことは式(54)からも明らかである[2]。また，式(18)について，その左辺が波動力学に，右辺が行列力学に対応すると述べたが，式(53)も波動力学(左辺)と行列力学(右辺)の関係を示す意義深い式である。式(52)に$\langle\psi|$をかけると，

$$\langle\psi|\phi\rangle = \langle\psi|\int \mathrm{d}\boldsymbol{r}\,|\boldsymbol{r}\rangle\langle\boldsymbol{r}|\phi\rangle \tag{55-1}$$

$$= \int \mathrm{d}\boldsymbol{r}\langle\psi|\boldsymbol{r}\rangle\langle\boldsymbol{r}|\phi\rangle \tag{55-2}$$

$$= \int \psi^*(\boldsymbol{r})\phi(\boldsymbol{r})\mathrm{d}\boldsymbol{r} \tag{55-3}$$

となることからも，波動関数の積の積分(式(55)-3)の値が状態ベクトルの内積(式(55)-1の左辺)の値に等しいことがわかる(これも Q1, Q2への解答となる)。

離散基底系の単位演算子はすでに式(42)で示したが，状態ベクトルの内積$\langle\psi|\phi\rangle$に単位演算子

$$\sum_i |u_i\rangle\langle u_i| \tag{56}$$

を挿入すると

$$\langle\psi|\phi\rangle = \sum_i \langle\psi|u_i\rangle\langle u_i|\phi\rangle = \sum_i a_i^* b_i \tag{57}$$

が得られ(式(17))，連続基底系の式(55)に対応する形となる。表1に離散基底系と連続基底系の比較をまとめる。

(付記)

諸量の次元(単位)について考えてみよう。$\boldsymbol{r}$ が3次元の位置ベクトルであれば，体積要素 $\mathrm{d}\boldsymbol{r}$ の単位は m^3 である。$|\phi(\boldsymbol{r})|^2\,\mathrm{d}\boldsymbol{r}$ が確率(無次元)であるから，波動関数 $\phi(\boldsymbol{r})$ の単位は $\mathrm{m}^{-3/2}$。$\int\delta(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}')\mathrm{d}\boldsymbol{r} = 1$ (無次元)であるから，$\delta(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}')$ の単位は m^{-3}。$\langle\boldsymbol{r}|\boldsymbol{r}'\rangle = \delta(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}')$ であるから，基底ベクトル$\langle\boldsymbol{r}|$および$|\boldsymbol{r}\rangle$の単位は $\mathrm{m}^{-3/2}$。式(53)あるいは式(54)より，状態ベクトル$|\phi\rangle$は無次元。展開係数 $b_i = \langle u_i|\phi\rangle$ が無次元であるから，基底ベクトル$\langle u_i|$および$|u_j\rangle$の単位は無次元。なお，物理量に対応する演算子はすべて物理量と同じ単位をもつ(たとえば，運動量演算子 $-\mathrm{i}\hbar(\partial/\partial x)$ の単位は kg m s^{-1} でありエネルギー演算子 $\mathrm{i}\hbar(\partial/\partial t)$ の単位は J)。

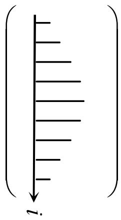
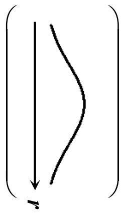
初学者は，量子力学のテキストで主役を演じる波動関数$\phi(\boldsymbol{r})$が展開係数である，という表現に衝撃を受けるかもしれない[3]。状態ベクトル$|\phi\rangle$は存在していても“見る”ことができないので，具体的な姿として見るためには，$|\phi\rangle$を何かに“投影”する必要がある。そこで，基底ベクトル

[1] 「状態ベクトル」を空間のある方向を向いたベクトル $\boldsymbol{A}$ にたとえれば,「基底ベクトル」は1つの座標軸 i に沿う単位ベクトル $\boldsymbol{e}_i$ に相当する。そして,「波動関数」はベクトル $\boldsymbol{A}$ の座標軸 i への射影成分 $\boldsymbol{e}_i\cdot\boldsymbol{A}$ に相当する。Schrödinger 方程式を解くという作業の中では，どう見ても波動関数が“展開係数”には見えない(であろう)。

[2] $\phi(\boldsymbol{r}) = \langle\boldsymbol{r}|\phi\rangle$ のブラとケットを杓子定規に$\langle\boldsymbol{r}| \equiv \boldsymbol{r}^*$，$|\phi\rangle \equiv \phi$ で置き換え，ブラとケットの組を積分に置き換えると，$\phi(\boldsymbol{r}) = \int\boldsymbol{r}^*\phi\,\mathrm{d}\tau$ となってしまい大混乱に陥る(筆者の学生時代の経験)。

[3] 筆者は学生時代，非常に驚いた。

表1. 離散基底系と連続基底系の比較

	離散基底系	連続基底系
規格直交性	$\langle u_i \mid u_j \rangle = \delta_{ij}$	$\langle \boldsymbol{r} \mid \boldsymbol{r}' \rangle = \delta(\boldsymbol{r} - \boldsymbol{r}')$
射影演算子	$\mid u_i \rangle \langle u_i \mid$	$\mid \boldsymbol{r} \rangle \langle \boldsymbol{r} \mid$
単位演算子	$\sum_i \mid u_i \rangle \langle u_i \mid$	$\int \mathrm{d}\boldsymbol{r} \mid \boldsymbol{r} \rangle \langle \boldsymbol{r} \mid$
基底ベクトル展開	$\mid \phi \rangle = \sum_i \mid u_i \rangle \langle u_i \mid \phi \rangle = \sum_i \langle u_i \mid \phi \rangle \mid u_i \rangle$	$\mid \phi \rangle = \int \mathrm{d}\boldsymbol{r} \mid \boldsymbol{r} \rangle \langle \boldsymbol{r} \mid \phi \rangle = \int \mathrm{d}\boldsymbol{r} \langle \boldsymbol{r} \mid \phi \rangle \mid \boldsymbol{r} \rangle$
展開係数	$b_i = \langle u_i \mid \phi \rangle$	$\phi(\boldsymbol{r}) = \langle \boldsymbol{r} \mid \phi \rangle$
状態ベクトル	$\mid \phi \rangle \equiv \begin{pmatrix} \langle u_1 \mid \phi \rangle \\ \langle u_2 \mid \phi \rangle \\ \vdots \\ \langle u_i \mid \phi \rangle \\ \vdots \end{pmatrix} =$ 	$\mid \phi \rangle \equiv \begin{pmatrix} \langle \boldsymbol{r} \mid \phi \rangle \end{pmatrix} =$ 

(注) 連続基底系の状態ベクトル中辺のハッチングは連続的に成分が並んでいることを表しており，文献3, p. 137, 脚注2に記されている「∞行1列の行列」を直観的に描いたものである。

> $\langle \boldsymbol{r} \mid$ という“スクリーン”に投影して見えるようにしたものが波動関数 $\phi(\boldsymbol{r}) = \langle \boldsymbol{r} \mid \phi \rangle$ である。スクリーンを変えると見え方が変わるから，波動関数 $\phi(\boldsymbol{r})$ は状態ベクトルの見方の1つにすぎない。Schrödinger 方程式は投影像を得るための方程式であるといえる。

4.2 波動関数および演算子の *x*-表示と *p*-表示

式(53)の $\langle \boldsymbol{r} \mid \phi \rangle$ は状態ベクトル $\mid \phi \rangle$ から座標 $\boldsymbol{r}$ を変数とする波動関数 $\phi(\boldsymbol{r})$ を作り出しているから「座標表示[1]」(または x-表示)と呼ばれる[2]。また，$\phi(\boldsymbol{r})$ は「x-表示での波動関数」である。量子論での1次元運動量演算子が $\hat{p}_x = -\mathrm{i}\hbar(\partial/\partial x)$ であることより，$\hat{p}_x$ を $\mid \phi \rangle$ に作用させるという表現とともに

$$\hat{p}_x \mid \phi \rangle = -\mathrm{i}\hbar \frac{\partial}{\partial x} \mid \phi \rangle \tag{58}$$

と書くことがある。しかし，左辺は正しいが右辺は厳密には正しくない。その理由は，(前述したように) $\mid \phi \rangle$ は状態ベクトルであり，そのままではどういう変数のどういう関数かは明

---

[1] 位置表示とも呼ばれる。
[2] 3次元の場合，$\boldsymbol{r}$-表示という方がふさわしいが，(3次元でも) x-表示と呼ばれることが多い。x-表示を q-表示と記している成書もある。

らかではないので，いきなり x で微分できないからである。では，運動量演算子を状態ベクトルに作用させるにはどうすればよいであろうか。以下では，(状態ベクトルの x-表示ではなく)演算子の x-表示について考えてみよう。

位置演算子 $\hat{x}$ と運動量演算子 $\hat{p}_x$ の間には次の交換関係が成り立つ[1]。

$$[\hat{x}, \hat{p}_x] \equiv \hat{x}\hat{p}_x - \hat{p}_x\hat{x} = \mathrm{i}\hbar \tag{59}$$

式(59)の中辺と右辺を $\langle x|$ と $|x'\rangle$ ではさむと，

$$\langle x|\hat{x}\hat{p}_x - \hat{p}_x\hat{x}|x'\rangle = \mathrm{i}\hbar\langle x|x'\rangle \tag{60}$$

となるが[2]，位置演算子の固有値は連続量であり，式(49)のように Dirac のデルタ関数で規格化されているから，式(60)の右辺は

$$\mathrm{i}\hbar\langle x|x'\rangle = \mathrm{i}\hbar\delta(x - x') \tag{61}$$

と表せる。一方，式(60)の左辺は

$$\langle x|\hat{x}\hat{p}_x - \hat{p}_x\hat{x}|x'\rangle = \underset{\text{(a)}}{\underline{\langle x|\hat{x}}}\,\hat{p}_x|x'\rangle - \langle x|\hat{p}_x\underset{\text{(b)}}{\underline{\hat{x}|x'\rangle}} \tag{62}$$

となる。引き続きアンダーライン部(a)と(b)を変形する。まず，(b)は位置演算子の固有値方程式[3]を変形して

$$\hat{x}|x'\rangle = x'|x'\rangle \longrightarrow \hat{x}|x'\rangle = |x'\rangle x' \tag{63}$$

を得る[4]。次に，アンダーライン部(a)を変形するために，固有値方程式

$$\hat{x}|x\rangle = x|x\rangle \tag{64}$$

の両辺の共役をとると[5]

$$\hat{x}|x\rangle = x|x\rangle \xrightarrow{\text{共役}} \langle x|\hat{x}^\dagger = x\langle x| \tag{65}$$

となるが，位置演算子が Hermite 演算子であること($\hat{x}^\dagger = \hat{x}$)を利用すると，式(65)の結果は

$$\langle x|\hat{x} = x\langle x| \tag{66}$$

と書き換えられる。式(66)を(62)右辺のアンダーライン部(a)に，式(63)右をアンダーライン部(b)に適用すると

---

1 3次元でも同様の展開になるが，わかりやすいように1次元(x 成分)で考える。

2 類似の記号を混同しないように注意する必要がある。$\hat{x}$ は位置演算子，$|x\rangle$ は(位置)基底ベクトル，x は(位置)固有値(実数)である。虚数記号は多くの成書でイタリックの「i」で表されているが，本書では IUPAC の推奨にしたがってローマンの「i」で表す(順番を表す添字 i との混同を防ぐ意味もある)。

3 $\boldsymbol{Ax} = a\boldsymbol{x}$ 型の式を固有方程式と呼ぶ場合もあるが，厳密に区別する場合は，$\boldsymbol{Ax} = a\boldsymbol{x}$ を固有値方程式と呼び，固有値 a を見出すための方程式 $|\boldsymbol{A} - a\boldsymbol{E}| = 0$ を固有方程式と呼ぶ。

4 x' は数値であるから演算子や基底ベクトルと順序を入れ替えただけである。

5 共役をとるには，ブラをケットに，ケットをブラに，演算子を Hermite 共役に置き換え，各要素の配置順を逆転させる。数値は複素共役に置き換えるが，どこに配置してもよい。

$$\langle x|\hat{x}\hat{p}_x|x'\rangle-\langle x|\hat{p}_x\hat{x}|x'\rangle=x\langle x|\hat{p}_x|x'\rangle-\langle x|\hat{p}_x|x'\rangle x' \tag{67-1}$$

$$=(x-x')\langle x|\hat{p}_x|x'\rangle \tag{67-2}$$

が得られる。これが式(60)，つまり，式(61)に等しいことより

$$(x-x')\langle x|\hat{p}_x|x'\rangle=\mathrm{i}\hbar\delta(x-x') \tag{68}$$

したがって，

$$\langle x|\hat{p}_x|x'\rangle=\mathrm{i}\hbar\frac{\delta(x-x')}{x-x'} \tag{69}$$

を得る。ここで，δ 関数の性質

$$z\frac{\mathrm{d}\delta(z)}{\mathrm{d}z}=-\delta(z) \tag{70}$$

を用いると($z\equiv x-x'$ として),

$$(x-x')\frac{\partial}{\partial(x-x')}\delta(x-x')=-\delta(x-x') \tag{71}$$

より，

$$-\frac{\partial}{\partial(x-x')}\delta(x-x')=\frac{\delta(x-x')}{x-x'} \tag{72}$$

が得られる。式(72)の右辺を式(69)の右辺に代入すると，

$$\langle x|\hat{p}_x|x'\rangle=-\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial(x-x')}\delta(x-x') \tag{73}$$

となるが，固有値 x' をもつ状態を特定の状態 $|x'\rangle$ に固定する(x' を定数扱いする)と，

$$\langle x|\hat{p}_x|x'\rangle=-\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial x}\delta(x-x') \tag{74}$$

という形になり，式(49)を用いて δ 関数部分を位置基底ベクトルで表示し直すと

$$\langle x|\hat{p}_x|x'\rangle=-\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial x}\langle x|x'\rangle \tag{75}$$

が得られる。なお，式(74)は運動量演算子 $\hat{p}_x$ の x-表示での行列要素[1]を表している。式(75)から状態ベクトル $|x'\rangle$ に作用している部分を抜き出して

[1] 行列要素については後述する。

$$\boxed{\langle x|\hat{p}_x = -\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial x}\langle x|} \tag{76}$$

を得る。この式の左辺は，位置基底ベクトルのブラ $\langle x|$ と運動量演算子 $\hat{p}_x$ の積であるから，運動量演算子の x-表示を与えており，その具体的な形が右辺で表されている。言い換えれば，

左辺：ある状態ベクトルに運動量演算子 $\hat{p}_x$ を作用させた結果の x-表示を得る(ためには)
右辺：ある状態ベクトルに $\langle x|$ を作用させて状態ベクトルを x-表示(x の関数としての波動関数)にしてから $-\mathrm{i}\hbar(\partial/\partial x)$ を作用(させればよい)

となる。式(76)に右から $|\phi\rangle$ をかけた

$$\langle x|\hat{p}_x|\phi\rangle = -\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial x}\langle x|\phi\rangle \tag{77}$$

より得られる

$$(\hat{p}_x\phi)(x) = -\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial x}\phi(x) \tag{78}$$

が式(58)を正しく書き換えた形である[1]。多くのテキストが，運動量演算子を

$$\hat{p}_x = -\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial x} \quad \text{あるいは，} \quad \hat{p}_x \to -\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial x} \tag{79}$$

と書いているが，これは，暗黙のうちに，運動量演算子が作用する波動関数が x-表示の(x の関数として表された)波動関数であると考えているからであり，<u>運動量演算子の x-表示を厳密に表現したものは式(76)である</u>。なお，x-表示での位置演算子 $\hat{x}$ は，式(66)からわかるように位置(座標)自身であるから

$$\boxed{\langle x|\hat{x} = x\langle x|} \tag{80}$$

となる。これを，多くのテキストが $\hat{x} = x$ (あるいは，$\hat{x} \to x$)と表記している。式(80)についても，右から $|\phi\rangle$ をかけると，

$$\langle x|\hat{x}|\phi\rangle = x\langle x|\phi\rangle \tag{81}$$

より，

$$(\hat{x}\phi)(x) = x\phi(x) \tag{82}$$

が得られる。なお，式(49)と式(80)から得られる

$$\langle x|\hat{x}|x'\rangle = x\delta(x-x') \tag{83}$$

[1] $\langle x|$ はケットの x-表示を与えるから，$\langle x|\hat{p}_x|\phi\rangle = \hat{p}_x\phi(x)$ でも $\langle x|\hat{p}_x|\phi\rangle = \hat{p}_x(x)\phi(x)$ でもなく，$\langle x|\hat{p}_x|\phi\rangle$ = $\langle x|\hat{p}_x\phi\rangle$ = $(\hat{p}_x\phi)(x)$ となる(後述，5.2節)。

は位置演算子 $\hat{x}$ の x-表示での行列要素を表している。

x-表示(座標表示)に対して p-表示(運動量表示)もある。x-表示での位置演算子 $\hat{x}$ が位置(座標)自身であるのと同様に，p-表示の運動量演算子 $\hat{p}_x$ は運動量自身 p_x である。以下では，位置演算子 $\hat{x}$ の p-表示がどのような形になるか考えよう(運動量演算子の x-表示の場合とほぼ同じ展開になることは予想できるが，以下にきちんと示しておく)。式(59)の中辺と右辺を $\langle p_x|$ と $|p'_x\rangle$ ではさむと，

$$\langle p_x|\hat{x}\hat{p}_x-\hat{p}_x\hat{x}|p'_x\rangle=\mathrm{i}\hbar\langle p_x|p'_x\rangle \tag{84}$$

となる[1]。運動量演算子の固有値も連続量であるから，右辺は

$$\mathrm{i}\hbar\langle p_x|p'_x\rangle=\mathrm{i}\hbar\delta(p_x-p'_x) \tag{85}$$

と書くことができる。式(84)の左辺は

$$\langle p_x|\hat{x}\hat{p}_x-\hat{p}_x\hat{x}|p'_x\rangle=\langle p_x|\hat{x}\underbrace{\hat{p}_x|p'_x\rangle}_{\text{(a)}}-\underbrace{\langle p_x|\hat{p}_x}_{\text{(b)}}\hat{x}|p'_x\rangle \tag{86}$$

の形に変形でき，アンダーライン部(a)は，運動量演算子の固有値方程式を変形して，

$$\hat{p}_x|p'_x\rangle=p'_x|p'_x\rangle \longrightarrow \hat{p}_x|p'_x\rangle=|p'_x\rangle p'_x \tag{87}$$

となる。アンダーライン部(b)を変形するために，固有値方程式

$$\hat{p}_x|p_x\rangle=p_x|p_x\rangle \tag{88}$$

の両辺の共役をとると

$$\hat{p}_x|p_x\rangle=p_x|p_x\rangle \xrightarrow{\text{共役}} \langle p_x|\hat{p}_x^\dagger=p_x\langle p_x| \tag{89}$$

となり，運動量演算子は Hermite 演算子($\hat{p}_x^\dagger=\hat{p}_x$)であるから(後述)，式(89)の結果は

$$\langle p_x|\hat{p}_x=p_x\langle p_x| \tag{90}$$

と書き換えることができる。式(87)右を式(86)右辺のアンダーライン部(a)に，式(90)をアンダーライン部(b)に適用すると

$$\langle p_x|\hat{x}\hat{p}_x|p'_x\rangle-\langle p_x|\hat{p}_x\hat{x}|p'_x\rangle=\langle p_x|\hat{x}|p'_x\rangle p'_x-p_x\langle p_x|\hat{x}|p'_x\rangle \tag{91-1}$$

$$=(p'_x-p_x)\langle p_x|\hat{x}|p'_x\rangle \tag{91-2}$$

が得られる。これが式(84)，つまり，式(85)に等しいことより

$$(p'_x-p_x)\langle p_x|\hat{x}|p'_x\rangle=\mathrm{i}\hbar\delta(p_x-p'_x) \tag{92}$$

となるから，

[1] 類似の記号を混同しないように注意する必要がある。 $\hat{p}_x$ は運動量演算子，$|p_x\rangle$ は(運動量)基底ベクトル， p_x は(運動量)固有値(実数)である。 p_x は単なる数値であるから演算子や基底ベクトルと順序を自由に入れ替えることができる。

$$\langle p_x|\hat{x}|p_x'\rangle = \mathrm{i}\hbar\frac{\delta(p_x - p_x')}{p_x' - p_x} = -\mathrm{i}\hbar\frac{\delta(p_x - p_x')}{p_x - p_x'} \tag{93}$$

を得る。ここで，δ関数の性質

$$z\frac{\mathrm{d}\delta(z)}{\mathrm{d}z} = -\delta(z) \tag{94}$$

を用いると($z \equiv p_x - p_x'$として)，

$$(p_x - p_x')\frac{\partial}{\partial(p_x - p_x')}\delta(p_x - p_x') = -\delta(p_x - p_x') \tag{95}$$

となり，これを変形した

$$\frac{\partial}{\partial(p_x - p_x')}\delta(p_x - p_x') = -\frac{\delta(p_x - p_x')}{p_x - p_x'} \tag{96}$$

の右辺を式(93)の右辺に代入して

$$\langle p_x|\hat{x}|p_x'\rangle = \mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial(p_x - p_x')}\delta(p_x - p_x') \tag{97}$$

を得る。固有値p_x'をもつ状態を特定の状態$|p_x'\rangle$に固定する(p_x'を定数扱いする)と，

$$\langle p_x|\hat{x}|p_x'\rangle = \mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial p_x}\delta(p_x - p_x') \tag{98}$$

という形になり，式(85)により，δ関数部分を運動量基底ベクトルで表示し直すと

$$\langle p_x|\hat{x}|p_x'\rangle = \mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial p_x}\langle p_x|p_x'\rangle \tag{99}$$

が得られる。なお，式(98)は位置演算子$\hat{x}$の p-表示での行列要素を表している。式(99)から状態ベクトル$|p_x'\rangle$に作用している部分を抜き出して

$$\boxed{\langle p_x|\hat{x} = \mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial p_x}\langle p_x|} \tag{100}$$

を得る(x-表示の$\hat{p}_x$の式(76)に似ているが，<u>負号がないことに注意</u>)。この式の左辺は，運動量基底ベクトルのブラ$\langle p_x|$と位置演算子$\hat{x}$の積の形になっているから，位置演算子のp-表示を与えており，その具体的な形が右辺で表されている。言い換えると，

左辺：ある状態ベクトルに位置演算子$\hat{x}$を作用させた結果のp-表示を得る(ためには)
右辺：ある状態ベクトルに$\langle p_x|$を作用させて状態ベクトルを p-表示(p の関数としての波

動関数[1])にしてから $\mathrm{i}\hbar(\partial/\partial p_x)$ を作用(させればよい)

となる。多くのテキストが，p-表示での位置演算子を

$$\hat{x} = \mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial p_x} \quad \text{あるいは，} \quad \hat{x} \to \mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial p_x} \quad (p\text{-表示}) \tag{101}$$

と書いているが，厳密に表現するならば式(100)となる。式(100)についても，右から$|\phi\rangle$をかけると，

$$\langle p_x | \hat{x} | \phi\rangle = \mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial p_x}\langle p_x | \phi\rangle \tag{102}$$

となり，

$$(\hat{x}\phi)(p_x) = \mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial p_x}\phi(p_x) \tag{103}$$

が得られる。p-表示での運動量演算子 $\hat{p}_x$ は運動量自身であるから

$$\boxed{\langle p_x | \hat{p}_x = p_x\langle p_x |} \tag{104}$$

となり，式(104)に右から$|\phi\rangle$をかけると，

$$\langle p_x | \hat{p}_x | \phi\rangle = p_x\langle p_x | \phi\rangle \tag{105}$$

より，

$$(\hat{p}_x\phi)(p_x) = p_x\phi(p_x) \tag{106}$$

を得る。なお，式(104)から得られる

$$\langle p_x | \hat{p}_x | p_x'\rangle = p_x\delta(p_x - p_x') \tag{107}$$

は運動量演算子 $\hat{p}_x$ の p-表示での行列要素を表している。

§5 演算子とブラ・ケット表記の関係

5.1 演算子の行列表示と行列要素

ここまで，状態ベクトルのブラ・ケットを行列記法により記述してきたが，次に演算子の行列表示について考えてみよう。§1で示したように，系の1つの状態を表す波動関数ψは正規直交関数群$\{u_i\}$の線形結合で表すことができる(式(7))。

$$\psi = \sum_i a_i u_i \tag{108}$$

これを行列表現すると，

[1] 状態ベクトル$|\psi\rangle$の x-表示は$\psi(x) = \langle x | \psi\rangle$であり，$p$-表示は$\psi(p_x) = \langle p_x | \psi\rangle$である。

$$\psi = (u_1, u_2, \cdots)\begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ \vdots \end{pmatrix} \tag{109}$$

となる(式(12))。ある物理量に対応する演算子が $\hat{A}$ であるとき，その物理量の期待値(平均値)は

$$\int \psi^* \hat{A} \psi \mathrm{d}\tau \tag{110}$$

で与えられる。式(110)に式(109)を代入すると，

$$\int \psi^* \hat{A} \psi \mathrm{d}\tau = \int \left[(a_1^*, a_2^*, \cdots)\begin{pmatrix} u_1^* \\ u_2^* \\ \vdots \end{pmatrix} \hat{A}(u_1, u_2, \cdots)\begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ \vdots \end{pmatrix} \right] \mathrm{d}\tau \tag{111-1}$$

$$= (a_1^*, a_2^*, \cdots)\begin{pmatrix} \int u_1^* \hat{A} u_1 \mathrm{d}\tau & \int u_1^* \hat{A} u_2 \mathrm{d}\tau & \cdots & \int u_1^* \hat{A} u_j \mathrm{d}\tau & \cdots \\ \int u_2^* \hat{A} u_1 \mathrm{d}\tau & \int u_2^* \hat{A} u_2 \mathrm{d}\tau & \cdots & \int u_2^* \hat{A} u_j \mathrm{d}\tau & \cdots \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ \int u_i^* \hat{A} u_1 \mathrm{d}\tau & \int u_i^* \hat{A} u_2 \mathrm{d}\tau & \cdots & \int u_i^* \hat{A} u_j \mathrm{d}\tau & \cdots \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \end{pmatrix}\begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ \vdots \end{pmatrix} \tag{111-2}$$

$$= (a_1^*, a_2^*, \cdots)\begin{pmatrix} A_{11} & A_{12} & \cdots & A_{1j} & \cdots \\ A_{21} & A_{22} & \cdots & A_{2j} & \cdots \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ A_{i1} & A_{i2} & \cdots & A_{ij} & \cdots \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \end{pmatrix}\begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ \vdots \end{pmatrix} \tag{111-3}$$

となる。ここで，A_{ij} は

$$A_{ij} = \int u_i^* \hat{A} u_j \mathrm{d}\tau \tag{112}$$

を表し，基底関数 u_i と u_j による演算子 $\hat{A}$ の「行列要素」(matrix element)と呼ばれる。また，式(111)-3中央の行列要素からなる行列が演算子の行列表示である[1]。行列表示された演算子は演算子 $\hat{A}$ そのものではないので $\hat{\boldsymbol{A}}$ と表記する[2]。本書では，類似記号による混乱を防ぐために，演算子を $\hat{A}$，演算子の行列表示を $\hat{\boldsymbol{A}}$，行列要素を A_{ij} または $(\hat{\boldsymbol{A}})_{ij}$ と書く[3]。式(25)につい

[1] 文献8は行列要素を成分とする行列を「演算子行列」と呼んでいる。
[2] この「演算子そのもの」は「演算子を表す($-i\hbar(\partial/\partial x)$ のような)数式自体」という意味である。
[3] $\hat{A}$ は関数に作用する演算子であり，$\hat{\boldsymbol{A}}$ はブラやケットに作用する演算子である。

て述べた注意と同様に，各行列要素は演算子に固有の値ではなく，式(108)の展開で用いる基底関数 $\{u_i\}$ に依存する。行列記法に従うと，

$$\langle\psi| = (a_1^*, a_2^*, \cdots) \tag{113}$$

および

$$|\psi\rangle = \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ \vdots \end{pmatrix} \tag{114}$$

であるから，式(111)-3は $\langle\psi|\hat{\boldsymbol{A}}|\psi\rangle$ と表記でき，関数 ψ が演算子 $\hat{A}$ の固有関数で，固有値が A であれば，

$$A = \int \psi^* \hat{A}\psi \mathrm{d}\tau = \langle\psi|\hat{\boldsymbol{A}}|\psi\rangle \tag{115}$$

となる。

(付記)

多くのテキストに， $A_{ij} = \int u_i^* \hat{A} u_j \mathrm{d}\tau$ をブラ・ケット表記して $\langle u_i|\hat{A}|u_j\rangle$ と表す，と(サラリと)書かれているが，繰り返し指摘したように，

$$|u_j\rangle \equiv u_j \tag{116}$$

$$\langle u_i| \equiv u_i^* \tag{117}$$

という単純な対応で考えるべきではない。式(36)で示した $a_i = \int u_i^* \psi \mathrm{d}\tau$ の場合と同様に，行列に対応させて， $A_{ij} = \int u_i^* \hat{A} u_j \mathrm{d}\tau$ を計算してみよう。$\langle u_i|$ および $|u_j\rangle$ それぞれが対応する行列表示である式(33)

$$\langle u_i| \equiv (0, 0, \cdots 0, \underset{\substack{\uparrow \\ \text{第}i\text{列}}}{1}, 0, \cdots) \tag{118}$$

と式(30)

$$|u_j\rangle \equiv \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \\ 1 \\ 0 \\ \vdots \end{pmatrix} \begin{matrix} \\ \\ \\ \\ \leftarrow \text{第}j\text{行} \\ \\ \\ \end{matrix} \tag{119}$$

から

$$\underset{\substack{\uparrow\\ \text{第}i\text{列}}}{(0, 0, \cdots 0, 1, 0, \cdots)}\hat{A}\begin{pmatrix}0\\0\\\vdots\\0\\1\\0\\\vdots\end{pmatrix}\begin{matrix}\\ \\ \\ \\ \leftarrow\text{第}j\text{行}\\ \\ \\ \end{matrix} \tag{120}$$

を作っても，式(120)は行列要素を与えない。これは，演算子が波動関数に作用するものであり，展開係数には作用しないからである。そこで思い出すべきは，式(12)型の行列表現である。式(30)の表記にもとづいて，

$$u_j = (u_1, u_2, \cdots, u_{j-1}, u_j, u_{j+1} \cdots)\begin{pmatrix}0\\0\\\vdots\\0\\1\\0\\\vdots\end{pmatrix}\begin{matrix}\\ \\ \\ \\ \leftarrow\text{第}j\text{行}\\ \\ \\ \end{matrix} \tag{121}$$

および

$$u_i^* = \underset{\substack{\uparrow\\ \text{第}i\text{列}}}{(0, 0, \cdots 0, 1, 0, \cdots)}\begin{pmatrix}u_1^*\\u_2^*\\\vdots\\u_{i-1}^*\\u_i^*\\u_{i+1}^*\\\vdots\end{pmatrix} \tag{122}$$

を $\int u_i^* \hat{A} u_j \mathrm{d}\tau$ (式(112))に代入すると，

$$\int u_i^* \hat{A} u_j \mathrm{d}\tau = \int (0, 0, \cdots 0, 1, 0, \cdots)\begin{pmatrix}u_1^*\\u_2^*\\\vdots\\u_{i-1}^*\\u_i^*\\u_{i+1}^*\\\vdots\end{pmatrix}\hat{A}(u_1, u_2, \cdots, u_{j-1}, u_j, u_{j+1}, \cdots)\begin{pmatrix}0\\0\\\vdots\\0\\1\\0\\\vdots\end{pmatrix}\mathrm{d}\tau \tag{123)-1$$

$$
=(0,\,0,\cdots 0,\,1,\,0,\cdots)\left[\int\begin{pmatrix} u_1^* \\ u_2^* \\ \vdots \\ u_{i-1}^* \\ u_i^* \\ u_{i+1}^* \\ \vdots \end{pmatrix}\hat{A}(u_1,u_2,\cdots,u_{j-1},u_j,u_{j+1},\cdots)\mathrm{d}\tau\right]\begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \\ 1 \\ 0 \\ \vdots \end{pmatrix} \tag{123-2}
$$

$$
=(0,\,0,\cdots 0,\,1,\,0,\cdots)\begin{pmatrix} \int u_1^*\hat{A}u_1\mathrm{d}\tau & \int u_1^*\hat{A}u_2\mathrm{d}\tau & \cdots & \int u_1^*\hat{A}u_j\mathrm{d}\tau & \cdots \\ \int u_2^*\hat{A}u_1\mathrm{d}\tau & \int u_2^*\hat{A}u_2\mathrm{d}\tau & \cdots & \int u_2^*\hat{A}u_j\mathrm{d}\tau & \cdots \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ \int u_i^*\hat{A}u_1\mathrm{d}\tau & \int u_i^*\hat{A}u_2\mathrm{d}\tau & & \int u_i^*\hat{A}u_j\mathrm{d}\tau & \cdots \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \\ 1 \\ 0 \\ \vdots \end{pmatrix} \tag{123-3}
$$

$$
=(0,\,0,\cdots,0,\,\underset{\substack{\uparrow \\ \text{第}i\text{列}}}{1},\,0,\cdots)\begin{pmatrix} A_{11} & A_{12} & \cdots & A_{1j} & \cdots \\ A_{21} & A_{22} & \cdots & A_{2j} & \cdots \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ A_{i-1,1} & A_{i-1,2} & \cdots & A_{i-1,j} & \cdots \\ A_{i1} & A_{i2} & \cdots & A_{ij} & \cdots \\ A_{i+1,1} & A_{i+1,2} & \cdots & A_{i+1,j} & \cdots \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \\ 1 \\ 0 \\ \vdots \end{pmatrix}\begin{array}{l} \\ \\ \\ \\ \leftarrow\text{第}j\text{行} \\ \\ \\ \end{array} \tag{123-4}
$$

$$
=(A_{i1},\,A_{i2},\cdots,A_{i,j-1},\,\underset{\substack{\uparrow \\ \text{第}j\text{列}}}{A_{ij}},\,A_{i,j+1},\cdots)\begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \\ 1 \\ 0 \\ \vdots \end{pmatrix}\begin{array}{l} \\ \\ \\ \\ \leftarrow\text{第}j\text{行} \\ \\ \\ \end{array} \tag{123-5}
$$

$$
=A_{ij} \tag{123-6}
$$

が得られるから，式(123)-4の中央の行列は演算子 $\hat{A}$ 自身ではなく，行列表示された演算子 $\hat{\boldsymbol{A}}$ であり，式(123)-4に対応するブラ・ケット表示は $\langle u_i\,|\,\hat{\boldsymbol{A}}\,|\,u_j\rangle$ となる(式(32)参照)。

$\langle u_i\,|\,\hat{\boldsymbol{A}}\,|\,u_j\rangle$ の共役[1]は,

$$
\boxed{\langle u_i\,|\,\hat{\boldsymbol{A}}\,|\,u_j\rangle^* = \langle u_j\,|\,\hat{\boldsymbol{A}}^\dagger\,|\,u_i\rangle} \tag{124}
$$

であり,

[1] 文献10, pp. 213～214参照。

$$\langle u_i \,|\, \hat{\boldsymbol{A}} \,|\, u_j \rangle^* = \langle u_j \,|\, \hat{\boldsymbol{A}}^* \,|\, u_i \rangle \tag{125}$$

ではない。演算子が Hermite 演算子であれば $\hat{\boldsymbol{A}}^\dagger = \hat{\boldsymbol{A}}$ が成立するから，式(124)より

$$\langle u_i \,|\, \hat{\boldsymbol{A}} \,|\, u_j \rangle^* = \langle u_j \,|\, \hat{\boldsymbol{A}} \,|\, u_i \rangle \quad \text{(Hermite 演算子)} \tag{126}$$

となるが，$\langle u_i \,|\, \hat{\boldsymbol{A}} \,|\, u_j \rangle$ の共役を，誤って式(125)のように考えてしまうと，Hermite 演算子の定義が $\hat{\boldsymbol{A}}^* = \hat{\boldsymbol{A}}$ であるという誤解を招くことになる[1]。また，$\hat{\boldsymbol{A}}$ を演算子自身 $\hat{A}$ と考えてしまうと，$\hat{A}^\dagger$ の形がわからなくなる。たとえば，運動量演算子

$$\hat{p}_x = -\mathrm{i}\hbar \frac{\partial}{\partial x} \tag{127}$$

は Hermite 演算子であり，$\hat{p}_x$ の Hermite 共役 $\hat{p}_x^\dagger$ は $\hat{p}_x$ 自身であるから，

$$\hat{p}_x^\dagger = \hat{p}_x \tag{128}$$

が成り立つが，$\hat{p}_x$ の複素共役 $\hat{p}_x^* (= \mathrm{i}\hbar(\partial/\partial x))$ は作ることができても，“転置”することができないから[2]，$\hat{p}_x$ の式だけを見て[3] $\hat{p}_x$ が Hermite 演算子であるかどうかを判定することはできない。しかし，$\hat{p}_x$ の行列 $\hat{\boldsymbol{p}}_x$ の i 行 j 列成分 $(\hat{\boldsymbol{p}}_x)_{ij}$ の複素共役 $(\hat{\boldsymbol{p}}_x)_{ij}^*$ の式を変形すると，

$$(\hat{\boldsymbol{p}}_x)_{ij}^* = \left(\int u_i^*(x) \left(-\mathrm{i}\hbar \frac{\partial}{\partial x} \right) u_j(x) \mathrm{d}x \right)^* \tag{129-1}$$

$$= \int u_i(x) \left(\mathrm{i}\hbar \frac{\partial}{\partial x} \right) u_j^*(x) \mathrm{d}x \tag{129-2}$$

$$= \mathrm{i}\hbar \Big[\, u_i(x) u_j^*(x) \Big]_{-\infty}^{+\infty} - \int u_j^*(x) \left(\mathrm{i}\hbar \frac{\partial}{\partial x} \right) u_i(x) \mathrm{d}x \tag{129-3}$$

$$= 0 - \int u_j^*(x) \left(\mathrm{i}\hbar \frac{\partial}{\partial x} \right) u_i(x) \mathrm{d}x \tag{129-4}$$

$$= \int u_j^*(x) \left(-\mathrm{i}\hbar \frac{\partial}{\partial x} \right) u_i(x) \mathrm{d}x = (\hat{\boldsymbol{p}}_x)_{ji} \tag{129-5}$$

つまり，$(\hat{\boldsymbol{p}}_x)_{ij}^* = (\hat{\boldsymbol{p}}_x)_{ji}$ の関係から，

$$\hat{\boldsymbol{p}}_x^\dagger = \hat{\boldsymbol{p}}_x \tag{130}$$

が成り立ち，演算子 $\hat{p}_x$ が Hermite 演算子であることがわかる。なお，式(129)-2から式(129)-3への変形では部分積分を行った。また，式(129)-3の第1項が0となるためには，波動関数が無限遠で0に収束する必要がある。言い換えると，演算子に対応する行列が Hermite 行列となるためには，波動関数が無限遠で0に収束する条件も含まれている[4]。

上述の議論では，演算子 $\hat{A}$ (つまり，$\hat{p}_x$)自身を変形するのではなく，行列要素 A_{ij} (つまり，$(\hat{\boldsymbol{p}}_x)_{ij}$)を変形して演算子が Hermite 演算子であるかどうかを判定した。しかし，この方法では，「$A_{ij}^* = A_{ji}$ ゆえに Hermite 演算子」あるいは「$A_{ij}^* \neq A_{ji}$ ゆえに Hermite 演算子ではない」という

[1] ある演算子に共役な演算子は複素共役演算子ではなく，Hermite 共役演算子である。

[2] $\hat{p}_x$ に共役な $\hat{p}_x^*$ を作ろうとして，文字通り転置複素共役の $\check{b}^{x}_{*}$ とするのは無茶(というより冗談)である。

[3] 「見るだけではなく，変形しても」である。

[4] より厳密に表現すると，「波動関数が定義されている領域の境界で0，または周期境界条件を満たしているという条件」が必要となる。なお，周期境界条件(周期 L)の場合は，積分領域は $x \sim x + L$ となる。

ように，Hermite 演算子であるかどうかの“是非”の判断しかできない[1]。演算子の Hermite 性は，本来，演算子 $\hat{A}$ の Hermite 共役 $\hat{A}^\dagger$ が元の演算子 $\hat{A}$ と同じかどうかで判定すべきである。ならば，$\hat{A}$ から $\hat{A}^\dagger$ を知るにはどうすればよいであろうか。式(129)の変形で見たように，A_{ij}^* と A_{ji} の比較により演算子が Hermite 演算子であるかどうかを判定する際，

$$\left(\int u_i^*(x)\hat{A}u_j(x)\mathrm{d}x\right)^* = \int u_j^*(x)\boxed{}u_i(x)\mathrm{d}x \tag{131}$$

という変形を行った結果，$\square = \hat{A}$ であれば $\hat{A}$ が Hermite 演算子であると判断できるから，□部分が $\hat{A}$ の Hermite 共役 $\hat{A}^\dagger$ であることになる。したがって，

$$\boxed{\left(\int u_i^*(x)\hat{A}u_j(x)\mathrm{d}x\right)^* = \int u_j^*(x)\hat{A}^\dagger u_i(x)\mathrm{d}x} \tag{132}$$

を利用すれば，演算子 $\hat{A}$ 自身の Hermite 共役 $\hat{A}^\dagger$ を得ることができる(式(132)は式(124)と同じものである)。式(132)と式(124)は，$u_i(x) \equiv |u_i\rangle$，$u_j(x) \equiv |u_j\rangle$，$\hat{A} \equiv \hat{\boldsymbol{A}}$ という定義により書き換えただけに見えるが，これまでにも繰り返し述べたように，$u_i(x)$，$u_j(x)$ は固有関数，$\hat{A}$ は演算子であるのに対して，$|u_i\rangle$，$|u_j\rangle$ は基底ベクトル，$\hat{\boldsymbol{A}}$ は行列であるから，式(132)と式(124)の関係は単なる文字の書き換えではない。以下では式(132)を利用して，具体的に演算子の Hermite 共役を得る作業を行ってみよう。

$\hat{p}_x = -\mathrm{i}\hbar(\partial/\partial x)$ に形は似ているが，虚数ではなく実数の演算子

$$\hat{A} = -\hbar\frac{\partial}{\partial x} \tag{133}$$

の Hermite 共役を考えてみよう。式(133)を式(132)の左辺に代入して，

$$(\hat{\boldsymbol{A}})_{ij}^* \equiv A_{ij}^* = \left(\int u_i^*(x)\left(-\hbar\frac{\partial}{\partial x}\right)u_j(x)\mathrm{d}x\right)^* \tag{134-1}$$

$$= \int u_i(x)\left(-\hbar\frac{\partial}{\partial x}\right)u_j^*(x)\mathrm{d}x \tag{134-2}$$

$$= -\hbar\Big[\ u_i(x)u_j^*(x)\Big]_{-\infty}^{+\infty} - \int u_j^*(x)\left(-\hbar\frac{\partial}{\partial x}\right)u_i(x)\mathrm{d}x \tag{134-3}$$

$$= 0 + \int u_j^*(x)\left(\hbar\frac{\partial}{\partial x}\right)u_i(x)\mathrm{d}x \tag{134-4}$$

$$= \int u_j^*(x)\left(\hbar\frac{\partial}{\partial x}\right)u_i(x)\mathrm{d}x \tag{134-5}$$

が得られる。したがって，式(133)の演算子 $\hat{A}$ の Hermite 共役 $\hat{A}^\dagger$ は

$$\hat{A}^\dagger = \hbar\frac{\partial}{\partial x} \tag{135}$$

[1] 演算子 $\hat{A}$ が Hermite 演算子であることを「演算子 $\hat{A}$ は Hermite である」と表現することが多いが，「Hermite 共役であること」と「Hermite であること」は意味が異なる点に注意する必要がある(前者は $\hat{A}$ と $\hat{A}^\dagger$ の関係を述べた表現であり，後者は $\hat{A}^\dagger = \hat{A}$ が成り立つことを意味している)。

である。

$$\hat{A}^{\dagger} = \hbar\frac{\partial}{\partial x} \neq -\hbar\frac{\partial}{\partial x} = \hat{A} \tag{136}$$

より，演算子 $\hat{A} = -\hbar(\partial/\partial x)$ は Hermite 演算子ではないことがわかる(演算子 $\partial/\partial x$ の Hermite 共役は $-\partial/\partial x$ である[1])。

本付記の最後に，ブラ・ケット表記による演算子表記の性質をまとめておく。$|\hat{\boldsymbol{A}}\psi\rangle$ と $\hat{\boldsymbol{A}}|\psi\rangle$ は同じものであるから，次式が成り立つ。

$$\boxed{|\hat{\boldsymbol{A}}\psi\rangle = \hat{\boldsymbol{A}}|\psi\rangle} \tag{137}$$

しかし，$\langle\hat{\boldsymbol{A}}\psi| = \langle\hat{\boldsymbol{A}}|\psi$ **ではない**。なぜならば，

$$\langle\hat{\boldsymbol{A}}\psi| = |\hat{\boldsymbol{A}}\psi\rangle^{*} = (\hat{\boldsymbol{A}}|\psi\rangle)^{*} = \langle\psi|\hat{\boldsymbol{A}}^{\dagger} \tag{138}$$

より[2]，

$$\boxed{\langle\hat{\boldsymbol{A}}\psi| = \langle\psi|\hat{\boldsymbol{A}}^{\dagger}} \quad \text{または} \quad \langle\hat{\boldsymbol{A}}^{\dagger}\psi| = \langle\psi|\hat{\boldsymbol{A}} \tag{139}$$

となるからである(式(139)は turn-over rule と呼ばれる)。式(137)と式(139)を用いると

$$\langle\phi|\hat{\boldsymbol{A}}|\psi\rangle^{*} = \langle\phi|\hat{\boldsymbol{A}}\psi\rangle^{*} = \underline{\langle\hat{\boldsymbol{A}}\psi|\phi\rangle = \langle\psi|\hat{\boldsymbol{A}}^{\dagger}|\phi\rangle} = \langle\psi|\hat{\boldsymbol{A}}^{\dagger}\phi\rangle \tag{140}$$

が成り立つ(アンダーライン部に turn-over rule が適用されている)。式(140)の「第1式＝第4式」の関係は式(124)に等しい。n 次の行列表示で考えると，演算子は $\hat{\boldsymbol{A}}$ と $\hat{\boldsymbol{A}}^{\dagger}$ は $(n\times n)$ 行列，ブラ $\langle\psi|$ は $(1\times n)$ 行列，ケット $|\psi\rangle$ は $(n\times 1)$ 行列であり，$|\psi\rangle^{*} = \langle\psi|$ は $(n\times 1)^{*} = (1\times n)$ に対応している。したがって，式(137)の $|\hat{\boldsymbol{A}}\psi\rangle = \hat{\boldsymbol{A}}|\psi\rangle$ は $(n\times n)(n\times 1)$ 行列となるからケット型 $(n\times 1)$ になっている。一方，$\langle\hat{\boldsymbol{A}}\psi|$ に対応する行列表示はわかりにくい。そこで，$\langle\hat{\boldsymbol{A}}\psi| = |\hat{\boldsymbol{A}}\psi\rangle^{*}$ の右辺に対応する行列表示を考えると，$[(n\times n)(n\times 1)]^{*} = (1\times n)(n\times n)$ となるから，$\langle\hat{\boldsymbol{A}}\psi|$ は確かにブラ型 $(1\times n)$ であることがわかる。しかし，$\langle\hat{\boldsymbol{A}}|\psi$ は行列表示できない(ので $\langle\hat{\boldsymbol{A}}\psi| = \langle\hat{\boldsymbol{A}}|\psi$ ではない[3])。

Turn-over rule は折衷記法とブラケット記法を接続する rule と見ることができる。ブラやケットの中に書かれた演算子($\langle\hat{\boldsymbol{A}}\psi|$ や $|\hat{\boldsymbol{A}}\psi\rangle$)は自分の右にあるベクトルに(左から)しか作用できないが[4]，単独の演算子は，ブラには右から，ケットには左から作用できる。つまり，$(\langle\psi|\hat{\boldsymbol{A}})|\phi\rangle$ = $\langle\psi|(\hat{\boldsymbol{A}}|\phi\rangle)$ = $\langle\psi|\hat{\boldsymbol{A}}|\phi\rangle$ である。文献1, 2は作用する方向を明示して，$\langle\psi|(\hat{\boldsymbol{A}}|\phi\rangle)$ = $\langle\psi|\underrightarrow{\hat{\boldsymbol{A}}}|\phi\rangle$ および $(\langle\psi|\hat{\boldsymbol{A}})|\phi\rangle$ = $\langle\psi|\underleftarrow{\hat{\boldsymbol{A}}}|\phi\rangle$ と記している。また，$\langle\psi|\hat{\boldsymbol{A}}|\phi\rangle$ の共役である $\langle\phi|\hat{\boldsymbol{A}}^{\dagger}|\psi\rangle$ についても $(\langle\phi|\hat{\boldsymbol{A}}^{\dagger})|\psi\rangle$ = $\langle\phi|\underleftarrow{\hat{\boldsymbol{A}}}^{\dagger}|\psi\rangle$，$\langle\phi|(\hat{\boldsymbol{A}}^{\dagger}|\psi\rangle)$ = $\langle\phi|\underrightarrow{\hat{\boldsymbol{A}}}^{\dagger}|\psi\rangle$ と表すことができるから，4つの演算子 $\underrightarrow{\hat{\boldsymbol{A}}}$，$\underleftarrow{\hat{\boldsymbol{A}}}$，$\underrightarrow{\hat{\boldsymbol{A}}}^{\dagger}$，$\underleftarrow{\hat{\boldsymbol{A}}}^{\dagger}$ が存在することになる。4つの演算子の関係をまとめると，

---

1 $\hat{A}^{\dagger} = -\hat{A}$ である演算子を anti-Hermite 演算子(反エルミート演算子)と呼ぶ。

2 記号 $*$ と † はいずれも Hermite 共役と考えてよい(数値に付く場合は複素共役を意味する)。

3 この意味でも，$\langle\hat{\boldsymbol{A}}\psi|$ や $\langle\hat{\boldsymbol{A}}|\psi$ などの表記はブラ・ケット記法にふさわしくない(わかりにくい)表記である。$\langle\hat{\boldsymbol{A}}\psi|\phi\rangle$ のような表記は用いず，Dirac オリジナルのブラケット記法に従って，$\langle\psi|\hat{\boldsymbol{A}}^{\dagger}|\phi\rangle$ と記す方がわかりやすい。

4 §0でも記したように，ブラやケットの中に演算子を書く記法は折衷記法特有のものであり，Dirac オリジナルのブラケット記法ではブラやケットの中に演算子を書かない。

$$\underrightarrow{\hat{A}}|\psi\rangle \xleftrightarrow{\dagger} \langle\psi|\underleftarrow{\hat{A}^\dagger} \tag{141}$$

$$\langle\psi|\underleftarrow{\hat{A}} \xleftrightarrow{\dagger} \underrightarrow{\hat{A}^\dagger}|\psi\rangle \tag{142}$$

と書ける(†は共役(＝Hermite 共役)を意味する[1])。$\langle\psi|\hat{A}$ は

$$\langle\psi|\hat{A}| = \underbrace{(\hat{A}^\dagger|\psi\rangle)^*}_{\substack{\uparrow \\ \text{ブラケット記法}}} = \underbrace{|\hat{A}^\dagger\psi\rangle^* = \langle\hat{A}^\dagger\psi|}_{\substack{\uparrow \\ \text{折衷記法}}} \tag{143}$$

と変形できるが，Dirac オリジナルのブラケット記法は第2式であり，第3式および第4式まで変形するのが折衷記法にあたる。演算子が右の(ケット)ベクトルにしか作用しない様子に慣れきっていると，演算子が左の(ブラ)ベクトルに作用できることに違和感を感じ，演算子が右のベクトルに作用する形の折衷記法まで変形したくなるが，ケットの中に入った演算子は行列との対応もよくないので，折衷記法はできる限り避ける方がよい。ケット($\langle\psi|$)，演算子($\hat{A}$)，ブラ($|\phi\rangle$)をすべて行列で表記したとすると，$(\langle\psi|\hat{A})$ を計算した結果に(右から)$|\phi\rangle$ をかけても，$(\hat{A}|\phi\rangle)$ を計算した結果に(左から)$\langle\psi|$ をかけても，結果は同じであるから，演算子が左のブラに作用できるのは自然なことである。

具体的な演算例を見てみよう。量子論で扱われる昇降演算子，たとえば，角運動量に関する上昇演算子 $\hat{J}_+$ と下降演算子 $\hat{J}_-$ が状態ベクトル $|JM\rangle$ に作用すると[2]，それぞれ，量子数 M が1だけ増減する。

$$\hat{J}_+|JM\rangle = \sqrt{J(J+1)-M(M+1)}\,|JM+1\rangle = C(J,M)|JM+1\rangle \tag{144}$$

$$\hat{J}_-|JM\rangle = \sqrt{J(J+1)-M(M-1)}\,|JM-1\rangle = C(J,M-1)|JM-1\rangle \tag{145}$$

$\hat{J}_+$ と $\hat{J}_-$ はいずれも Hermite 演算子ではないが，互いに Hermite 共役の関係にあるから，

$$\hat{J}_\pm{}^\dagger = \hat{J}_\mp \tag{146}$$

が成り立つ。なお，式(144), (145)右辺の C はすべて実数である($C^* = C$)。行列要素 $\langle JM+1|\hat{J}_+|JM\rangle$ の計算において，演算子 $\hat{J}_+$ が右のケット $|JM\rangle$ に作用する場合 $\langle JM+1|(\hat{J}_+|JM\rangle)$ と左のブラ $\langle JM+1|$ に作用する場合 $(\langle JM+1|\hat{J}_+)|JM\rangle$ の結果が同じになることを確認しよう。$\hat{J}_+$ が右の $|JM\rangle$ に作用する場合，

$$\langle JM+1|(\hat{J}_+|JM\rangle) = \langle JM+1|C(J,M)|JM+1\rangle \tag{147-1}$$

$$= C(J,M)\langle JM+1|JM+1\rangle = C(J,M) \tag{147-2}$$

となる。一方，$\hat{J}_+$ が左の $\langle JM+1|$ に作用する場合は，

$$(\langle JM+1|\hat{J}_+)|JM\rangle = (\hat{J}_+^\dagger|JM+1\rangle)^*|JM\rangle \tag{148-1}$$

$$= (\hat{J}_-|JM+1\rangle)^*|JM\rangle \tag{148-2}$$

$$= [C(J,M)|JM\rangle]^*|JM\rangle \tag{148-3}$$

$$= C^*(J,M)\langle JM|JM\rangle = C(J,M) \tag{148-4}$$

[1] $\underrightarrow{\hat{A}}$ と $\underleftarrow{\hat{A}}$ は共役関係ではない($\underrightarrow{\hat{A}^\dagger}$ と $\underleftarrow{\hat{A}^\dagger}$ も共役ではない)点に注意。
[2] J は全角運動量量子数であり，M は全角運動量の空間固定座標の Z 軸方向の射影成分を与える量子数。

が得られるから，$\langle JM+1|(\hat{J}_+|JM\rangle)$ ＝ $(\langle JM+1|\hat{J}_+)|JM\rangle$ である。
　さらに，演算子が2つの場合について，次の3通りの計算を行ってみよう。

$$\langle JM+2|(\hat{J}_+\hat{J}_+|JM\rangle) = (\langle JM+2|\hat{J}_+)(\hat{J}_+|JM\rangle) = (\langle JM+2|\hat{J}_+\hat{J}_+)|JM\rangle) \tag{149}$$

まず，$\hat{J}_+\hat{J}_+$ が右のケット$|JM\rangle$に作用する場合(式(149)の左辺)は，

$$\langle JM+2|(\hat{J}_+\hat{J}_+|JM\rangle) = C(J,M)\langle JM+2|(\hat{J}_+|JM+1\rangle) \tag{150-1}$$

$$= C(J,M)C(J,M+1)\langle JM+2|JM+2\rangle \tag{150-2}$$

$$= C(J,M)C(J,M+1) \tag{150-3}$$

を得る。次に，式(149)の中辺の場合は，

$$(\langle JM+2|\hat{J}_+)(\hat{J}_+|JM\rangle) = (\hat{J}_+^\dagger|M+2\rangle)^*|(\hat{J}_+|JM\rangle) \tag{151-1}$$

$$= (\hat{J}_-|M+2\rangle)^*|(\hat{J}_+|JM\rangle) \tag{151-2}$$

$$= [C(J,M+1)|M+1\rangle]^*|C(J,M)|JM+1\rangle \tag{151-3}$$

$$= C^*(J,M+1)C(J,M)\langle JM+1|JM+1\rangle \tag{151-4}$$

$$= C(J,M+1)C(J,M) \tag{151-5}$$

となる。最後に，式(149)の右辺は

$$(\langle JM+2|\hat{J}_+\hat{J}_+)|JM\rangle = ([J_+^\dagger|JM+2\rangle]^*\hat{J}_+)|JM\rangle \tag{152-1}$$

$$= ([J_-|JM+2\rangle]^*\hat{J}_+)|JM\rangle \tag{152-2}$$

$$= ([C(J,M+1)|JM+1\rangle]^*\hat{J}_+)|JM\rangle \tag{152-3}$$

$$= C^*(J,M+1)(\langle JM+1|\hat{J}_+)|JM\rangle \tag{152-4}$$

$$= C(J,M+1)(J_+^\dagger|JM+1\rangle)^*|JM\rangle \tag{152-5}$$

$$= C(J,M+1)(J_-|JM+1\rangle)^*|JM\rangle \tag{152-6}$$

$$= C(J,M+1)[C^*(J,M)|JM\rangle]^*|JM\rangle \tag{152-7}$$

$$= C(J,M+1)C^*(J,M)\langle JM|JM\rangle \tag{152-8}$$

$$= C(J,M+1)C(J,M) \tag{152-9}$$

が得られ，式(149)が成り立つから，演算子をどちら向きに作用させるかは自由であることがわかる。なお，$C(J,M+1)C(J,M)$ は次式で表される。

$$C(J,M+1)C(J,M) = \sqrt{(J-M)(J+M+1)(J-M-1)(J+M+2)} \tag{153}$$

式(109)で1つの波動関数ψの展開を表したが，状態mに対応する波動関数ψ_mを

$$\psi_m = (u_1, u_2, \cdots)\begin{pmatrix} a_{1m} \\ a_{2m} \\ \vdots \end{pmatrix} \tag{154}$$

と行列表示すると，2つの波動関数(ψ_1, ψ_2)は

$$(\psi_1, \psi_2) = (u_1, u_2, \cdots)\begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \\ \vdots & \vdots \end{pmatrix} \tag{155}$$

と表せる。式(110)の拡張として，2つの関数で演算子$\hat{A}$を“はさんで”積分すると，式(155)の左辺による積分として，

$$\int \begin{pmatrix} \psi_1^* \\ \psi_2^* \end{pmatrix} \hat{A}(\psi_1, \psi_2)\mathrm{d}\tau = \begin{pmatrix} \int \psi_1^* \hat{A}\psi_1 \mathrm{d}\tau & \int \psi_1^* \hat{A}\psi_2 \mathrm{d}\tau \\ \int \psi_2^* \hat{A}\psi_1 \mathrm{d}\tau & \int \psi_2^* \hat{A}\psi_2 \mathrm{d}\tau \end{pmatrix} \tag{156}$$

が得られる。一方，式(155)の右辺で$\hat{A}$をはさんだ積分は，

$$\int \begin{pmatrix} a_{11}^* & a_{21}^* & \cdots \\ a_{12}^* & a_{22}^* & \cdots \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u_1^* \\ u_2^* \\ \vdots \end{pmatrix} \hat{A}(u_1, u_2, \cdots) \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \\ \vdots & \vdots \end{pmatrix} \mathrm{d}\tau \tag{157-1}$$

$$= \begin{pmatrix} a_{11}^* & a_{21}^* & \cdots \\ a_{12}^* & a_{22}^* & \cdots \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \int u_1^* \hat{A} u_1 \mathrm{d}\tau & \int u_1^* \hat{A} u_2 \mathrm{d}\tau & \cdots \\ \int u_2^* \hat{A} u_1 \mathrm{d}\tau & \int u_2^* \hat{A} u_2 \mathrm{d}\tau & \cdots \\ \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \\ \vdots & \vdots \end{pmatrix} \tag{157-2}$$

$$= \begin{pmatrix} a_{11}^* & a_{21}^* & \cdots \\ a_{12}^* & a_{22}^* & \cdots \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A_{11} & A_{12} & \cdots \\ A_{21} & A_{22} & \cdots \\ \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \\ \vdots & \vdots \end{pmatrix} \tag{157-3}$$

の形になる。2つの波動関数(ψ_1, ψ_2)が演算子$\hat{A}$の固有関数であれば(それぞれの関数の固有値がA_1とA_2であるとする)，式(156)の右辺は

$$\begin{pmatrix} \int \psi_1^* \hat{A}\psi_1 \mathrm{d}\tau & 0 \\ 0 & \int \psi_2^* \hat{A}\psi_2 \mathrm{d}\tau \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} A_1 & 0 \\ 0 & A_2 \end{pmatrix} \tag{158}$$

となる。また，式(157)-3は行列記法によると，

$$\begin{pmatrix} \langle\psi_1| \\ \langle\psi_2| \end{pmatrix}\begin{pmatrix} A_{11} & A_{12} & \cdots \\ A_{21} & A_{22} & \cdots \\ \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix}\left(|\psi_1\rangle, |\psi_2\rangle\right) = \begin{pmatrix} \langle\psi_1| \\ \langle\psi_2| \end{pmatrix}\hat{\boldsymbol{A}}\left(|\psi_1\rangle, |\psi_2\rangle\right) \tag{159}$$

と表されるから，

$$\begin{pmatrix} A_1 & 0 \\ 0 & A_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \langle\psi_1| \\ \langle\psi_2| \end{pmatrix}\hat{\boldsymbol{A}}\left(|\psi_1\rangle, |\psi_2\rangle\right) \tag{160}$$

が成り立つ(式(160)は式(115)の2関数拡張版である)。

さらに一般的に，基底関数 $\{u_i\}$ と同じ数の関数$(\psi_1, \psi_2, \cdots, \psi_m, \cdots)$に拡張すると，式(155)にあたる式は，

$$(\psi_1, \psi_2, \cdots, \psi_m, \cdots) = (u_1, u_2, \cdots, u_i, \cdots)\begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1m} & \cdots \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2m} & \cdots \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ a_{i1} & a_{i2} & \cdots & a_{im} & \cdots \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \end{pmatrix} \tag{161}$$

となるから，式(161)の両辺による(演算子 $\hat{A}$ をはさんだ)積分の結果として，

$$\begin{pmatrix} \int\psi_1^*\hat{A}\psi_1\mathrm{d}\tau & \int\psi_1^*\hat{A}\psi_2\mathrm{d}\tau & \cdots & \int\psi_1^*\hat{A}\psi_m\mathrm{d}\tau & \cdots \\ \int\psi_2^*\hat{A}\psi_1\mathrm{d}\tau & \int\psi_2^*\hat{A}\psi_2\mathrm{d}\tau & \cdots & \int\psi_2^*\hat{A}\psi_m\mathrm{d}\tau & \cdots \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ \int\psi_n^*\hat{A}\psi_1\mathrm{d}\tau & \int\psi_n^*\hat{A}\psi_2\mathrm{d}\tau & \cdots & \int\psi_n^*\hat{A}\psi_m\mathrm{d}\tau & \cdots \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \end{pmatrix} \tag{162)-1}$$

$$= \begin{pmatrix} a_{11}^* & a_{21}^* & \cdots & a_{n1}^* & \cdots \\ a_{12}^* & a_{22}^* & \cdots & a_{n2}^* & \cdots \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ a_{1m}^* & a_{2m}^* & \cdots & a_{nm}^* & \cdots \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \end{pmatrix}\begin{pmatrix} A_{11} & A_{12} & \cdots & A_{1j} & \cdots \\ A_{21} & A_{22} & \cdots & A_{2j} & \cdots \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ A_{i1} & A_{i2} & \cdots & A_{ij} & \cdots \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \end{pmatrix}\begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1m} & \cdots \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2m} & \cdots \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ a_{n1} & a_{n2} & \cdots & a_{nm} & \cdots \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \end{pmatrix} \tag{162)-2}$$

が得られる(式(162)の行列はすべて正方行列である)。$\psi_1, \psi_2, \cdots, \psi_m, \cdots$ が演算子 $\hat{A}$ の固有関数であれば，

$$\int\psi_n^*\hat{A}\psi_m\mathrm{d}\tau = 0 \qquad (n \neq m) \tag{163}$$

となるから，式(162)-1の行列は，非対角成分がすべて0となり，対角成分が各固有関数の固有値 $A_1, A_2, \cdots, A_m, \cdots$ である次式の対角行列となる。

$$\begin{pmatrix} \int\psi_1^*\hat{A}\psi_1\mathrm{d}\tau & & & 0 & \\ & \int\psi_2^*\hat{A}\psi_2\mathrm{d}\tau & & & \\ & & \ddots & & \\ & & & \int\psi_n^*\hat{A}\psi_m\mathrm{d}\tau & \\ 0 & & & & \ddots \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} A_1 & & & \\ & A_2 & 0 & \\ & & \ddots & \\ & & & A_m \\ & 0 & & & \ddots \end{pmatrix} \tag{164}$$

式(162)-1が対角行列であるとき，式(162)-2の3つの行列の積を

$$\boldsymbol{a}^\dagger \hat{\boldsymbol{A}}\boldsymbol{a} \tag{165}$$

と表すと，行列記法に従って，

$$\boldsymbol{a} := \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1m} & \cdots \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2m} & \cdots \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ a_{n1} & a_{n2} & \cdots & a_{nm} & \cdots \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \end{pmatrix} = \left(|\psi_1\rangle, |\psi_2\rangle, \cdots, |\psi_m\rangle, \cdots\right) \tag{166}$$

および

$$\boldsymbol{a}^\dagger := \begin{pmatrix} a_{11}^* & a_{21}^* & \cdots & a_{n1}^* & \cdots \\ a_{12}^* & a_{22}^* & \cdots & a_{n2}^* & \cdots \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ a_{1m}^* & a_{2m}^* & \cdots & a_{nm}^* & \cdots \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \langle\psi_1| \\ \langle\psi_2| \\ \vdots \\ \langle\psi_2| \\ \vdots \end{pmatrix} \tag{167}$$

と表されるから，式(162)は

$$\begin{pmatrix} A_1 & & 0 & \\ & A_2 & & \\ & & \ddots & \\ 0 & & A_m & \\ & & & \ddots \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \langle\psi_1| \\ \langle\psi_2| \\ \vdots \\ \langle\psi_2| \\ \vdots \end{pmatrix} \hat{\boldsymbol{A}}\left(|\psi_1\rangle, |\psi_2\rangle, \cdots, |\psi_m\rangle, \cdots\right) \tag{168}$$

となる(式(168)は式(160)の拡張版である)。以上より，演算子行列を対角化すれば，対角要素に固有値($A_1, A_2, \cdots, A_m, \cdots$)が並び，対角化する際に演算子行列に右からかけた行列の各列が固有値 A_m に順次対応する固有ベクトル $|\psi_m\rangle$ (の基底ベクトル $\{|u_i\rangle\}$ による展開係数 $\{a_{im}\}$)を与える[1]ことがわかる。行列 $\boldsymbol{a}$ は unitary 行列(ユニタリー行列)であり[2]，

[1] 演算子行列を対角化できた“瞬間”に固有値と固有関数が得られる点が重要である。物理化学や量子化学のテキストには，まず，永年方程式(行列式)を解いて固有値を計算し，それぞれの固有値に対応する展開係数の方程式を解いて固有関数を決定するという2段階解法が記されていることが多いが，演算子行列の対角化によれば固有値と固有関数を同時に得ることができる。

[2] 行列 $\hat{\boldsymbol{A}}$ が Hermite 行列($A_{ij}^* = A_{ji}$)である場合， $\hat{\boldsymbol{A}}$ を対角化する unitary 行列 $\boldsymbol{a}$ が必ず存在する。また，Hermite 行列の固有値はすべて実数であるから，観測しうる物理量に対応する(演算子の)行列は必ず Hermite 行列である。

$$\boldsymbol{a}^{\dagger}\boldsymbol{a} = \boldsymbol{E} \tag{169}$$

つまり，

$$\boldsymbol{a}^{\dagger} = \boldsymbol{a}^{-1} \tag{170}$$

という性質をもつ。なお，$\boldsymbol{E}$ は単位行列，$\boldsymbol{a}^{-1}$ は行列 $\boldsymbol{a}$ の逆行列である。

式(162)の具体的な例として，1個の電子のスピン角運動量の x 成分の演算子 $\hat{s}_x$ を扱ってみよう ($\hat{A} = \hat{s}_x$)。1個の電子のスピン量子数は $s = 1/2$ であり，成分として $m_s = 1/2$ (α) と $m_s = -1/2$ (β) があるから，1個の電子のスピン状態を表す基底関数として α と β を用いることができる。したがって，任意のスピン状態 ψ を α と β の線形結合

$$\psi = c\alpha + d\beta = (\alpha, \beta)\begin{pmatrix} c \\ d \end{pmatrix} \tag{171}$$

により表すことができる(a と α が似た形なので，係数に c を用いる)。基底関数2つから固有関数2つが生じるので，任意の関数2つを ψ_1，ψ_2 として，基底関数を用いて表すと，

$$(\psi_1, \psi_2) = (\alpha, \beta)\begin{pmatrix} c & e \\ d & f \end{pmatrix} \tag{172}$$

の形になる(式(172)は式(161)に対応する)。式(172)の左辺で演算子 $\hat{s}_x$ をはさんで積分すると，

$$\int \begin{pmatrix} \psi_1^* \\ \psi_2^* \end{pmatrix} \hat{s}_x (\psi_1, \psi_2) \mathrm{d}\tau = \begin{pmatrix} \int \psi_1^* \hat{s}_x \psi_1 \mathrm{d}\tau & \int \psi_1^* \hat{s}_x \psi_2 \mathrm{d}\tau \\ \int \psi_2^* \hat{s}_x \psi_1 \mathrm{d}\tau & \int \psi_2^* \hat{s}_x \psi_2 \mathrm{d}\tau \end{pmatrix} \tag{173}$$

となる(式(173)右辺は式(162)-1に対応する)。一方，式(172)の右辺で演算子 $\hat{s}_x$ をはさんで積分すると，

$$\int \begin{pmatrix} c^* & d^* \\ e^* & f^* \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix} \hat{s}_x (\alpha, \beta) \begin{pmatrix} c & e \\ d & f \end{pmatrix} \mathrm{d}\tau = \begin{pmatrix} c^* & d^* \\ e^* & f^* \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \int \alpha \hat{s}_x \alpha \mathrm{d}\tau & \int \alpha \hat{s}_x \beta \mathrm{d}\tau \\ \int \beta \hat{s}_x \alpha \mathrm{d}\tau & \int \beta \hat{s}_x \beta \mathrm{d}\tau \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c & e \\ d & f \end{pmatrix} \tag{174}$$

となる(式(174)右辺は式(162)-2に対応しており，式(174)の右辺中央の行列が演算子 $\hat{s}_x$ の演算子行列 $\hat{\mathbf{s}}_x$ である)。次に，演算子行列の各行列要素を計算しよう。演算子 $\hat{s}_x$ が基底関数 $u(s, m_s)$ に作用すると[1]，

$$\hat{s}_x u(s, m_s) = \frac{\hbar}{2}\sqrt{s(s+1) - m_s(m_s+1)}\, u(s, m_s+1) + \frac{\hbar}{2}\sqrt{s(s+1) - m_s(m_s-1)}\, u(s, m_s-1) \tag{175}$$

となるから[2]($s = 1/2$)，演算子行列の4つの要素が

$$\int \alpha \hat{s}_x \alpha \mathrm{d}\tau = \int u(s, m_s = 1/2) \hat{s}_x u(s, m_s = 1/2) \mathrm{d}\tau = 0 \tag{176}$$

$$\int \alpha \hat{s}_x \beta \mathrm{d}\tau = \int u(s, m_s = 1/2) \hat{s}_x u(s, m_s = -1/2) \mathrm{d}\tau = \frac{\hbar}{2} \tag{177}$$

1 $\alpha := u(s, m_s = 1/2)$，$\beta := u(s, m_s = -1/2)$ である。
2 拙書(文献15)参照。

$$\int \beta \hat{s}_x \alpha \,\mathrm{d}\tau = \int u(s, m_s = -1/2) \hat{s}_x u(s, m_s = 1/2) \mathrm{d}\tau = \frac{\hbar}{2} \tag{178}$$

$$\int \beta \hat{s}_x \beta \,\mathrm{d}\tau = \int u(s, m_s = -1/2) \hat{s}_x u(s, m_s = -1/2) \mathrm{d}\tau = 0 \tag{179}$$

と得られ，式(174)の右辺は

$$\begin{pmatrix} c^* & d^* \\ e^* & f^* \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & \hbar/2 \\ \hbar/2 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c & e \\ d & f \end{pmatrix} = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} c^* & d^* \\ e^* & f^* \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c & e \\ d & f \end{pmatrix} \tag{180}$$

となる[1]。関数 ψ_1 と ψ_2 が演算子 $\hat{s}_x$ の固有関数であれば，式(173)の右辺の行列は対角行列(＝非対角要素が0)になるから，同時に，式(180)の行列の積(の結果)も対角行列になる。言い換えると，式(180)左辺中央の行列が両端の行列により対角化される。式(180)左辺中央の行列は実対称行列[2]であるから，直交行列[3]により対角化される。式(180)の複素共役記号を除いて計算すると，

$$\begin{pmatrix} c & d \\ e & f \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c & e \\ d & f \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} d & c \\ f & e \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c & e \\ d & f \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 2cd & cf + de \\ cf + de & 2ef \end{pmatrix} \tag{181}$$

となる。ψ_1 と ψ_2 が演算子 $\hat{s}_x$ の固有関数であれば，式(181)は対角行列になり，

$$cf + de = 0 \tag{182}$$

が成り立つ。また，行列

$$\begin{pmatrix} c & e \\ d & f \end{pmatrix} \tag{183}$$

が直交行列であれば，直交行列 $\boldsymbol{g}$ の性質 ${}^t\boldsymbol{g}\boldsymbol{g} = \boldsymbol{E}$ ，つまり，

$$\begin{pmatrix} c & d \\ e & f \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c & e \\ d & f \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} c^2 + d^2 & ce + df \\ ce + df & e^2 + f^2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \tag{184}$$

より，

$$ce + df = 0 \tag{185}$$

$$c^2 + d^2 = 1 \tag{186}$$

$$e^2 + f^2 = 1 \tag{187}$$

が成り立つ。$e \times (182) - f \times (185)$より，

$$d(e^2 - f^2) = 0 \tag{188}$$

つまり， $e^2 = f^2$ が成り立つから， $e^2 = f^2$ と式(187)より， $e^2 = f^2 = 1/2$ を得る。 $e = f = 1/\sqrt{2}$ の場合と $e = -f = 1/\sqrt{2}$ の場合があるが， $e = -f = 1/\sqrt{2}$ を採用すると，式(182)から $c = d$ が得られ，さらに，式(186)から， $c = d = 1/\sqrt{2}$ が得られる。($e = f = 1/\sqrt{2}$ を採用すると， $c = -d = 1/\sqrt{2}$ が得られるので，一義的に決まらないように見えるが，規格化され，互いに直交する2つの固有関数が

---

[1] 演算子行列の非対角項が0でないことから，αもβも単独では演算子 s_x の固有関数ではなく，固有関数はαとβの線形結合で形成されることがわかる。

[2] 実対称行列は成分がすべて実数の Hermite 行列である。

[3] 直交行列は成分がすべて実数の unitary 行列である。Hermite 行列は unitary 行列により対角化され，実対称行列は直交行列により対角化される。

得られればよいので，$(c,d,e,f)=(1/\sqrt{2},1/\sqrt{2},1/\sqrt{2},-1/\sqrt{2})$ と $(1/\sqrt{2},-1/\sqrt{2},1/\sqrt{2},1/\sqrt{2})$ のいずれでも構わない。)したがって(ここでは $e=-f$ を採用して),

$$\begin{pmatrix} c & e \\ d & f \end{pmatrix}=\begin{pmatrix} 1/\sqrt{2} & 1/\sqrt{2} \\ 1/\sqrt{2} & -1/\sqrt{2} \end{pmatrix} \tag{189}$$

を得る(式(189)は演算子行列を対角化するための直交行列であり，式(166)に対応する)。式(189)を式(180)に適用すると(c, d, e, f は実数)

$$\begin{pmatrix} 1/\sqrt{2} & 1/\sqrt{2} \\ 1/\sqrt{2} & -1/\sqrt{2} \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 0 & \hbar/2 \\ \hbar/2 & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 1/\sqrt{2} & 1/\sqrt{2} \\ 1/\sqrt{2} & -1/\sqrt{2} \end{pmatrix}=\frac{\hbar}{4}\begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix} \tag{190-1}$$

$$=\frac{\hbar}{4}\begin{pmatrix} 1 & 1 \\ -1 & 1 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix} \tag{190-2}$$

$$=\frac{\hbar}{4}\begin{pmatrix} 2 & 0 \\ 0 & -2 \end{pmatrix} \tag{190-3}$$

$$=\begin{pmatrix} \hbar/2 & 0 \\ 0 & -\hbar/2 \end{pmatrix} \tag{190-4}$$

となる(式(190)-1の左辺が式(165)，つまり，式(168)の右辺に，式(190)-4が式(168)の左辺に対応する)。なお，式(190)-4の対角成分は式(180)を計算しなくても，式(181)から，$2cd$ および $2ef$ により得られる。式(190)-4は対角化された式(173)であるから，

$$\begin{pmatrix} \int \psi_1^* \hat{s}_x \psi_1 \mathrm{d}\tau & 0 \\ 0 & \int \psi_2^* \hat{s}_x \psi_2 \mathrm{d}\tau \end{pmatrix}=\begin{pmatrix} \hbar/2 & 0 \\ 0 & -\hbar/2 \end{pmatrix} \tag{191}$$

となり，固有値 $\hbar/2$ と $-\hbar/2$ を得る。それぞれの固有値に対応する固有関数は，演算子行列を対角化するのに使用した式(189)の行列の<u>列が順次対応</u>し，式(172)の形で表すと，

$$(\psi_1,\psi_2)=(\alpha,\beta)\begin{pmatrix} 1/\sqrt{2} & 1/\sqrt{2} \\ 1/\sqrt{2} & -1/\sqrt{2} \end{pmatrix} \tag{192}$$

となり，個別に表現すれば，演算子 $\hat{s}_x$ の固有関数と固有値として，

$$\psi_1=\frac{1}{\sqrt{2}}(\alpha+\beta) \qquad (\text{固有値：}\frac{\hbar}{2}) \tag{193}$$

$$\psi_2=\frac{1}{\sqrt{2}}(\alpha-\beta) \qquad (\text{固有値：}-\frac{\hbar}{2}) \tag{194}$$

が得られる。なお，式(180)右辺中央の行列は電子スピンの x 成分の Pauli のスピン行列であるから，Pauli のスピン行列は特殊な行列ではなく，αスピンとβスピンを基底関数とする，スピン演算子の演算子行列である[1]。

[1] 「スピン角運動量を記述するために，1927年に Pauli によって導入された」と表現されると，特別で難解なイメージをもってしまうが，単なる演算子行列である。

5.2 演算子の本質

系の任意の波動関数をψとして，これに演算子$\hat{A}$を作用させた結果がφであるとき[1]，

$$\varphi = \hat{A}\psi \tag{195}$$

となるが，φは基底関数によりどのように表されるであろうか。ψが基底関数$\{u_j\}$の線形結合

$$\psi = \sum_j a_j u_j \tag{196}$$

により表されるから，これを式(195)に代入すると，

$$\varphi = \hat{A}\sum_j a_j u_j = \sum_j a_j \hat{A} u_j \tag{197}$$

となる。$\hat{A}u_j$も基底関数を用いて

$$\hat{A}u_j = \sum_i A_{ij} u_i \tag{198}$$

と表すことができるので($A_{ij} = \int u_i^* \hat{A} u_j \mathrm{d}\tau$である)，式(198)を式(197)に代入すると，

$$\varphi = \sum_i \sum_j A_{ij} a_j u_i \tag{199}$$

が得られる。また，φを基底関数で展開した形が

$$\varphi = \sum_i c_i u_i \tag{200}$$

であるとすると，式(199)と式(200)より，展開係数c_iは

$$c_i = \sum_j A_{ij} a_j \tag{201}$$

で与えられる。したがって，ψに演算子を作用させた結果であるφの展開係数を，波動関数ψの基底関数による展開係数a_jと行列要素A_{ij}を用いて行列表示すると，

$$\begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \\ \vdots \\ c_i \\ \vdots \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} A_{11} & A_{12} & \cdots & A_{1i} & \cdots \\ A_{21} & A_{22} & \cdots & A_{2i} & \cdots \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ A_{i1} & A_{i2} & \cdots & A_{ii} & \cdots \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ \vdots \\ a_i \\ \vdots \end{pmatrix} \tag{202}$$

となる。波動関数の基底関数による展開係数の列ベクトル表記を状態ベクトルのケットに対応させれば(式(15))，式(202)は

[1] 関数ψは演算子$\hat{A}$の固有関数とは限らない。

$$|\varphi\rangle = \hat{\boldsymbol{A}}|\psi\rangle \tag{203}$$

と表せる。式(203)を式(195)と比較すると，$\varphi = |\varphi\rangle$，$\psi = |\psi\rangle$ と考えたくなるが，式(195)が波動関数表記($\hat{A}$は演算子自身)であるのに対し，式(203)は状態ベクトル表記($\hat{\boldsymbol{A}}$は行列)であるから，(これまでも再三指摘したように)単純に，$\varphi = |\varphi\rangle$，$\psi = |\psi\rangle$ と考えるのは不適切である。

逆に，式(203)から式(201)を導出してみよう。式(203)の両辺に基底ベクトルの1つのブラ $\langle u_i|$を左からかけると，

$$\langle u_i|\varphi\rangle = \langle u_i|\hat{\boldsymbol{A}}|\psi\rangle \tag{204}$$

となり，左辺は式(24)より，

$$左辺：\langle u_i|\varphi\rangle = c_i \tag{205}$$

となる。式(204)の右辺については，$\hat{\boldsymbol{A}}$ と $|\psi\rangle$ の間に単位演算子

$$\sum_j |u_j\rangle\langle u_j| \tag{206}$$

を挿入して，

$$右辺：\sum_j \langle u_i|\hat{\boldsymbol{A}}|u_j\rangle\langle u_j|\psi\rangle \tag{207-1}$$

$$= \sum_j \langle u_i|\hat{\boldsymbol{A}}|u_j\rangle a_j \tag{207-2}$$

$$= \sum_j A_{ij} a_j \tag{207-3}$$

と変形することができる。したがって，(当然ながら)式(201)

$$c_i = \sum_j A_{ij} a_j \tag{208}$$

が得られる。式(208)は離散基底系の表現であるが，次に，連続基底系の場合について考えてみよう。

連続基底ベクトルとして位置固有ベクトル$|\boldsymbol{r}\rangle$ を用い，式(203)の両辺に基底ベクトルのブラ$\langle \boldsymbol{r}|$を左からかけると，

$$\langle \boldsymbol{r}|\varphi\rangle = \langle \boldsymbol{r}|\hat{\boldsymbol{A}}|\psi\rangle \tag{209}$$

となる。左辺は式(53)より，

$$左辺：\langle \boldsymbol{r}|\varphi\rangle = \varphi(\boldsymbol{r}) \tag{210}$$

となる。式(209)の右辺の $\hat{\boldsymbol{A}}$ と $|\psi\rangle$ の間に連続基底系の単位演算子(式(51))

$$\int \mathrm{d}\boldsymbol{r}'|\boldsymbol{r}'\rangle\langle \boldsymbol{r}'| \tag{211}$$

を挿入すると，

$$右辺：\int \mathrm{d}\boldsymbol{r}' \langle \boldsymbol{r} | \hat{\boldsymbol{A}} | \boldsymbol{r}' \rangle \langle \boldsymbol{r}' | \psi \rangle \tag{212}$$

となるから，

$$\varphi(\boldsymbol{r}) = \int \mathrm{d}\boldsymbol{r}' \langle \boldsymbol{r} | \hat{\boldsymbol{A}} | \boldsymbol{r}' \rangle \psi(\boldsymbol{r}') \tag{213}$$

が得られる。離散基底系で得られた式(208)では，展開係数$\{a_j\}$が行列$\hat{\boldsymbol{A}}$により展開係数$\{c_i\}$に変換されており，式(202)の表記からも，演算子の作用が行列のかけ算に対応していてわかりやすい。一方，連続基底系の場合(式(213))，一見しただけでは，行列のかけ算とは認識しづらい。しかし，離散基底系の式(206) ~ (208)と連続基底系の式(211) ~ (213)の比較から以下の関係があることがわかる。

$$離散基底系 \longleftrightarrow 連続基底系$$

$$\langle u_i | \longleftrightarrow \langle \boldsymbol{r} | \tag{214}$$

$$| u_j \rangle \longleftrightarrow | \boldsymbol{r}' \rangle \tag{215}$$

$$c_i \longleftrightarrow \varphi(\boldsymbol{r}) \tag{216}$$

$$a_j \longleftrightarrow \psi(\boldsymbol{r}') \tag{217}$$

$$\sum_j A_{ij} \longleftrightarrow \int \mathrm{d}\boldsymbol{r}' \langle \boldsymbol{r} | \hat{\boldsymbol{A}} | \boldsymbol{r}' \rangle \tag{218}$$

したがって，最終的な形(式(208)と式(213))の見かけは異なるが，本質的には，以下のように同じことを行っている。

1. 離散基底系では，$\langle u_j | \psi \rangle$により状態ベクトル$|\psi\rangle$の基底ベクトル$|u_j\rangle$方向の成分値(展開係数)$a_i$を抜き出し(式(207)-1)，連続基底系では，$\langle \boldsymbol{r}' | \psi \rangle$により$|\psi\rangle$の$|\boldsymbol{r}'\rangle$方向の成分値$\psi(\boldsymbol{r}')$ を抜き出している(式(212))。
2. 離散基底系の行列要素は$\langle u_i | \hat{\boldsymbol{A}} | u_j \rangle$，連続基底系の行列要素は$\langle \boldsymbol{r} | \hat{\boldsymbol{A}} | \boldsymbol{r}' \rangle$であり，それぞれを，上記1.で抜き出した値にかけ算している(式(207)-2と式(213))。
3. 離散基底系ではあらゆる j に関する和をとり，連続基底系では$\boldsymbol{r}'$の全域に関する積分により集積した結果，演算子$\hat{A}$を状態ψに作用させた結果である状態φについて，離散固有系では基底ベクトル$|u_i\rangle$方向の成分値c_iが得られ(式(208))，連続基底系では$|\boldsymbol{r}\rangle$方向の成分値$\varphi(\boldsymbol{r})$が得られている(式(213))。

以上のことから，離散基底系でも連続基底系でも，行列記法で考える限り，「演算子は行列

だ！[1]」といえる[2]。

式(112)で示した行列要素は，(基底)関数により演算子を積分した値でしかなく，演算子自身のブラ・ケット表記ではない。以下では，演算子自身のブラ・ケット表記について考えてみよう。式(203)

$$|\varphi\rangle = \hat{\boldsymbol{A}}|\psi\rangle \tag{219}$$

の右辺に2つの単位演算子

$$\hat{\boldsymbol{E}} = \sum_i |u_i\rangle\langle u_i| = \sum_j |u_j\rangle\langle u_j| \tag{220}$$

を挿入すると，

$$\hat{\boldsymbol{A}}|\psi\rangle = \hat{\boldsymbol{E}}\hat{\boldsymbol{A}}\hat{\boldsymbol{E}}|\psi\rangle = \sum_i |u_i\rangle\langle u_i|\hat{\boldsymbol{A}}|\sum_j |u_j\rangle\langle u_j|\psi\rangle \tag{221-1}$$

$$= \sum_i \sum_j |u_i\rangle\langle u_i|\hat{\boldsymbol{A}}|u_j\rangle\langle u_j|\psi\rangle \tag{221-2}$$

となる。式(221)-2より演算子 $\hat{\boldsymbol{A}}$ が次式

$$\boxed{\hat{\boldsymbol{A}} = \sum_i \sum_j |u_i\rangle\langle u_i|\hat{\boldsymbol{A}}|u_j\rangle\langle u_j|} \tag{222}$$

で表される。これが(離散基底系の)最も一般的な演算子の表現である。

一見複雑に見える式(222)の物理的な意味を考えてみよう。式(222)が状態ベクトル $|\psi\rangle$ に作用するとする。$|\psi\rangle$ は基底ベクトル $\{|u_j\rangle\}$ の線形結合で表されるから(式(196)),

$$|\psi\rangle = a_1|u_1\rangle + a_2|u_1\rangle \cdots + a_j|u_j\rangle + \cdots \tag{223}$$

と表現できる。式(222)が $|\psi\rangle$ に作用するとき，まず，$\langle u_j|$ が $|\psi\rangle$ に作用するから，

$$\langle u_j|\psi\rangle = a_1\langle u_j|u_1\rangle + a_2\langle u_j|u_1\rangle \cdots + a_j\langle u_j|u_j\rangle + \cdots = a_j \tag{224}$$

が得られる。言い換えると，式(222)の $\langle u_j|$ は $|\psi\rangle$ の中に含まれている $|u_j\rangle$ の重み(係数)を出力する役割を果たしている。次に，式(222)の中の $\hat{\boldsymbol{A}}|u_j\rangle$ は，文字通り，演算子 $\hat{\boldsymbol{A}}$ の基底ベクトル $|u_j\rangle$ への作用であるが，この $|u_j\rangle$ は直前の操作によって，$\langle u_j|$ が $|\psi\rangle$ の中に(重み a_j で含まれていることを)見出した $|u_j\rangle$ であるから，式(224)の重みが付いている。 $\hat{\boldsymbol{A}}$ が $|u_j\rangle$ に作用した結果も同じ基底ベクトルの線形結合により表せるが(式(198))，式(224)の重みも付けて表すと，

$$a_j\hat{\boldsymbol{A}}|u_j\rangle = A_{1j}a_j|u_1\rangle + A_{2j}a_j|u_2\rangle \cdots + A_{ij}a_j|u_i\rangle + \cdots \tag{225}$$

となり，式(225)の中の基底ベクトル $|u_i\rangle$ の重み(係数)は $A_{ij}a_j$ である。 $a_j\hat{\boldsymbol{A}}|u_j\rangle$ の中から $|u_i\rangle$ の重み($A_{ij}a_j$)を出力するには，$\langle u_i|$ を式(225)に作用させればよく，

[1] 芸術家 岡本太郎 氏の「芸術は爆発だ！」はあまりにも有名である。
[2] あくまで，ブラとケットの便宜的な表記法の1つである行列記法で考える限り，である。

$$\langle u_i | a_j \hat{A} | u_j \rangle = A_{1j} a_j \langle u_i | u_1 \rangle + A_{2j} a_j \langle u_i | u_2 \rangle \cdots + A_{ij} a_j \langle u_i | u_i \rangle + \cdots = A_{ij} a_j \tag{226}$$

を得る。こうして得られた$|u_i\rangle$の重みを$|u_i\rangle$自身にかけながらiについて和をとると，

$$\sum_i |u_i\rangle A_{ij} a_j = A_{1j} a_j |u_1\rangle + A_{2j} a_j |u_2\rangle \cdots + A_{ij} a_j |u_i\rangle \tag{227}$$

となり，演算子$\hat{A}$が$|u_j\rangle$に作用した結果を基底ベクトル$\{|u_i\rangle\}$の線形結合で表せたことになるが，必要なのは，演算子$\hat{A}$が($|u_j\rangle$だけではなく)$|\psi\rangle$に作用した結果であるから，$|\psi\rangle$に含まれている他のすべての基底ベクトルについても同様の計算をして加え合わせる必要がある。したがって，jについても和をとると，

$$\hat{A}|\psi\rangle = \sum_i \sum_j |u_i\rangle A_{ij} a_j \tag{228}$$

が得られ，式(224)より$a_j = \langle u_j | \psi \rangle$であるから，

$$\hat{A}|\psi\rangle = \sum_i \sum_j |u_i\rangle A_{ij} \langle u_j | \psi \rangle \tag{229}$$

となり，$\hat{A}$が式(222)で表される。

式(222)に左からブラ$\langle u_k |$，右からケット$|u_l\rangle$をかけると，当然ながら，

$$\langle u_k | \hat{A} | u_l \rangle = \sum_i \sum_j \langle u_k | u_i \rangle \langle u_i | \hat{A} | u_j \rangle \langle u_j | u_l \rangle \tag{230-1}$$

$$= \sum_i \sum_j \langle u_i | \hat{A} | u_j \rangle \delta_{ki} \delta_{jl} \tag{230-2}$$

$$= \langle u_k | \hat{A} | u_l \rangle \equiv A_{kl} \tag{230-3}$$

となる。系のある状態(固有状態とは限らない)の演算子$\hat{A}$に関する期待値を与える式(111)-3は，式(222)を用いると容易に得ることができる。式(222)に左から$\langle \psi |$を，右から$|\psi\rangle$をかけると，

$$\langle \psi | \hat{A} | \psi \rangle = \sum_i \sum_j \langle \psi | u_i \rangle \langle u_i | \hat{A} | u_j \rangle \langle u_j | \psi \rangle \tag{231-1}$$

$$= \sum_i \sum_j a_i^* A_{ij} a_j \tag{231-2}$$

となり，式(111)-3が(一瞬で)得られる。

連続規定系について同様のプロセスを考える前に，式(213)の別の形を考えてみよう。ブラ・ケットの演算で示した式(137)により，式(219)は

$$|\varphi\rangle = |\hat{A}\psi\rangle \tag{232}$$

と書ける。式(232)を単位演算子(式(211))を作用させた形で表すと，

$$|\varphi\rangle = \int \mathrm{d}\boldsymbol{r}' \,|\boldsymbol{r}'\rangle\langle \boldsymbol{r}'|\hat{A}\psi\rangle = \int \mathrm{d}\boldsymbol{r}' \,|\boldsymbol{r}'\rangle (\hat{A}\psi)(\boldsymbol{r}') \tag{233}$$

となる。式(233)に左から$\langle \boldsymbol{r}|$をかけると，

$$\langle \boldsymbol{r}|\varphi\rangle = \int \mathrm{d}\boldsymbol{r}' \langle \boldsymbol{r}|\boldsymbol{r}'\rangle (\hat{A}\psi)(\boldsymbol{r}') \tag{234-1}$$

$$= \int \mathrm{d}\boldsymbol{r}' (\hat{A}\psi)(\boldsymbol{r}')\,\delta(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}') \tag{234-2}$$

$$= (\hat{A}\psi)(\boldsymbol{r}) \tag{234-3}$$

が得られ，式(234)の左辺は$\varphi(\boldsymbol{r})$であるから，

$$\varphi(\boldsymbol{r}) = (\hat{A}\psi)(\boldsymbol{r}) \tag{235}$$

となる。式(235)と式(213)は同じものであるから，

$$\varphi(\boldsymbol{r}) = (\hat{A}\psi)(\boldsymbol{r}) = \int \mathrm{d}\boldsymbol{r}' \langle \boldsymbol{r}|\hat{\boldsymbol{A}}|\boldsymbol{r}'\rangle \psi(\boldsymbol{r}') \tag{236}$$

が成り立つ。

離散基底系の演算子の式(222)に対応する連続基底系の式は

$$\boxed{\hat{\boldsymbol{A}} = \int \mathrm{d}\boldsymbol{r} \int \mathrm{d}\boldsymbol{r}' \,|\boldsymbol{r}\rangle\langle \boldsymbol{r}|\hat{\boldsymbol{A}}|\boldsymbol{r}'\rangle\langle \boldsymbol{r}'|} \tag{237}$$

である。連続基底系の行列要素A_{kl}は

$$A_{kl} \equiv \langle u_k|\hat{\boldsymbol{A}}|u_l\rangle = \int \mathrm{d}\boldsymbol{r} \int \mathrm{d}\boldsymbol{r}' \langle u_k|\boldsymbol{r}\rangle\langle \boldsymbol{r}|\hat{\boldsymbol{A}}|\boldsymbol{r}'\rangle\langle \boldsymbol{r}'|u_l\rangle \tag{238-1}$$

$$= \int \mathrm{d}\boldsymbol{r} \int \mathrm{d}\boldsymbol{r}' u_k^*(\boldsymbol{r})\langle \boldsymbol{r}|\hat{\boldsymbol{A}}|\boldsymbol{r}'\rangle u_l(\boldsymbol{r}') \tag{238-2}$$

$$= \int \mathrm{d}\boldsymbol{r} \left[u_k^*(\boldsymbol{r}) \int \mathrm{d}\boldsymbol{r}' \langle \boldsymbol{r}|\hat{\boldsymbol{A}}|\boldsymbol{r}'\rangle u_l(\boldsymbol{r}') \right] \tag{238-3}$$

という形になるが，[　]内の積分は式(236)の右辺と同形であるから，$(\hat{A}u_l)(\boldsymbol{r})$と表されるので，

$$A_{kl} \equiv \langle u_k|\hat{\boldsymbol{A}}|u_l\rangle = \int \mathrm{d}\boldsymbol{r}\, u_k^*(\boldsymbol{r})(\hat{A}u_l)(\boldsymbol{r}) \tag{239}$$

が得られる。これが(連続基底系の)正確な行列要素A_{kl}の表現である。同様に，状態$|\psi\rangle$の期待値は

$$\langle \psi|\hat{\boldsymbol{A}}|\psi\rangle = \int \mathrm{d}\boldsymbol{r} \int \mathrm{d}\boldsymbol{r}' \langle \psi|\boldsymbol{r}\rangle\langle \boldsymbol{r}|\hat{\boldsymbol{A}}|\boldsymbol{r}'\rangle\langle \boldsymbol{r}'|\psi\rangle \tag{240-1}$$

$$= \int \mathrm{d}\boldsymbol{r} \int \mathrm{d}\boldsymbol{r}' \psi^*(\boldsymbol{r})\langle \boldsymbol{r}|\hat{\boldsymbol{A}}|\boldsymbol{r}'\rangle \psi(\boldsymbol{r}') \tag{240-2}$$

$$= \int \mathrm{d}\boldsymbol{r} \left[\psi^*(\boldsymbol{r}) \int \mathrm{d}\boldsymbol{r}' \langle \boldsymbol{r} \,|\, \hat{\boldsymbol{A}} \,|\, \boldsymbol{r}' \rangle \psi(\boldsymbol{r}') \right] \tag{240-3}$$

$$= \int \mathrm{d}\boldsymbol{r}\, \psi^*(\boldsymbol{r})(\hat{A}\psi)(\boldsymbol{r}) \tag{240-4}$$

で与えられる。

文献

1. 北野正雄“誤解されているブラケット ― 共役演算子をめぐって(談話室)”日本物理学会誌，**68**(4), 239–241 (2013年) (URL は下記)
https://doi.org/10.11316/butsuri.68.4_239
2. 北野正雄“ブラケット構造の機微 ― 双対構造と内積構造”第2回 QUATUO 研究会 (2013年1月，高知工科大学)
3. 北野正雄「量子力学の基礎」共立出版 (2010年)，第3, 4章
4. 鈴木修吾「ディラック記法による線形代数」(東京工業大学 授業資料) (URL は下記)
https://www.ims.tsukuba.ac.jp/~shugo_suzuki_lab/upload.pdf
5. 小出昭一郎「量子力学(I)」裳華房 (1969年)，第6章
6. 桜井捷海「コンピュータで学ぶ 量子力学 [基礎編]」裳華房 (1992年), 第1章第7節
7. 佐藤正次，永井 治「基礎課程 線形代数学 新版」学術図書出版社 (1976年)，第3章
8. 菅野卓雄，多田邦雄，神谷武志 訳「基礎量子力学」丸善 (1973年)，第6, 7章 (原著：R. L. White, *Basic Quantum Mechanics*, McGraw-Hill, New York, 1966)
9. 霜田光一，岩澤 宏，神谷武志 訳「レーザ物理」丸善 (1978年), 第6章 (原著：M. Sargent III, M. O. Scully, W. E. Lamb, Jr., *Laser Physics*, Addison Wesley, Reading (MA), 1974)
10. 小出昭一郎，田村二郎 訳「メシア 量子力学」東京図書 (1971年), 第7章 (原著：A. Messiah, *Mécanique Quantique*, Dunod, Paris, 1959)
11. 「「成分」と「基底」の変換の相違点」漁火書店 (URL は下記)
http://home.hiroshima-u.ac.jp/kyam/pages/results/monograph/Ref02_matrix43W.pdf
12. 「連続固有値関数の規格化と Fourier 変換」漁火書店 (URL は下記)
https://home.hiroshima-u.ac.jp/kyam/pages/results/monograph/Ref27_normalize.pdf
13. (a) 伊藤伸泰，早野龍五 監訳「グライナー 量子力学」シュプリンガー・フェアラーク東京，1991年(初版) (英語版原著：W. Greiner, *Quantum Mechanics*, Springer-Verlag, Berlin, 1989.)
(b) 伊藤伸泰，早野龍五 監訳「量子力学 概論」シュプリンガー・ジャパン，2011年(新装版) および 伊藤伸泰，早野龍五 監訳「量子力学 概論」 丸善出版，2012年(新装版) (英語版原著：W. Greiner, *Quantum Mechanics: An Introduction*, 3rd ed., Springer-Verlag, Berlin Heidelberg, 1994.)
(c) 英語版：W. Greiner, *Quantum Mechanics: An Introduction*, 4th ed., Springer-Verlag, Berlin Heidelberg, 2000.
14. R. Shankar, *Principles of Quantum Mechanics*, 2nd ed., Springer Science+Business Media, New York, 1994, Chap. 1
15. 「Clebsch–Gordan 係数と射影演算子」漁火書店 (URL は下記)
https://home.hiroshima-u.ac.jp/kyam/pages/results/monograph/Ref06_C-Gcoeff.pdf

謝辞

原稿をお読みいただき，貴重な御助言をくださった赤瀬 大 氏，北野正雄 氏に感謝申し

あげます。

量子論におけるブラ・ケット表記

2013年	1月	22日	初版第1刷
2013年	6月	23日	第2版第7刷
2020年	12月	20日	第3版第6刷
2021年	1月	31日	第4版第11刷
2021年	2月	21日	第5版第1刷
2023年	4月	16日	第6版第7刷
2023年	5月	7日	第7版第5刷
2024年	9月	29日	第8版第4刷

著者 山﨑 勝義
発行 漁火書店

検印 山﨑

印刷 ブルーコピー
製本 ホッチキス