初版　2021 年 11 月 11 日
第 7 版　2022 年 2 月 17 日

# 量子力学補講

## 『量子力学 10 講』の誤記訂正と補足

## Supplement for 10 Lectures on Quantum Mechanics

谷村 省吾

Shogo Tanimura

名古屋大学大学院情報学研究科

# 目 次

# 1　このノートについて

この文書は，2021 年 11 月に名古屋大学出版会から発行された書籍『量子力学 10 講』の中にあった誤りや不備を修正し補うノートである．この他にも読者において『量子力学 10 講』の中に間違いを見つけられたら，メールやツイッターを通して著者に知らせていただきたい．谷村の連絡先は私のウェブページに書いてあり，ネットで「谷村省吾」を検索していただければ見つかると思う．間違いや不明な点をご指摘いただいたら，順次，この補足ノートを拡充していくつもりである．

以下で「本書」と言えば『量子力学 10 講』（初版第 1 刷）のことを指す．また，以下に現れるページ番号や節番号や数式番号は，とくに断りがなければ『量子力学 10 講』のものを指す．本書の中の単純な間違いについては以下に正誤を列挙し，考察を要する不備についてはそのつど節を設けて議論し修正案を提示する．当たり前のことを過剰に丁寧に解説している部分もあると思うので，よくわかっている読者はもちろんそのような部分は読み飛ばしてくれればよい．

量子力学の内容をよくわかっている人も，あるいは，量子力学そのものには関心がない人も，数学の学習方法や数学を学習することの意義について悩みや迷いがあれば，数学に対する取り組みについて私の考えを述べた第 10 節「計算する前にじっくり考えろ」と第 11 節「数学を通して何を学べばよいのか」を読んでいただければ多少なりとも得るところがあるのではないかと思う．

この補講ノートの増補を繰り返して第 7 版になった．だいぶページ数が増えたので，目次を設けることにした．また，PDF ファイルには各節の先頭にしおりを付けることにしたので適宜利用していただきたい．今回の増補では，本書 p.26 の補足欄に示した (2.55), (2.56), (2.57) 式の練習問題の解答を第 18 節「ノルムと非有界演算子」に書いた．この問題の意味を吟味するために第 19 節「無限次元空間に関して注意すべきこと」も書き足した．補足ノートを冗長にしすぎた感はあるが，本書では詳しく扱えなかった無限次元空間の機微をこの補足で味わってみてほしい．

# 2　訂正

p.15, 2-3 節の 1 行目,「力学では，系の状態を何らかデータセットで表す」の「何らか」は正しくは「何らかの」.

p.16, (2.12) 下の文章中の「ただし (2.8) の右辺は」は，正しくは「ただし (2.8) の左辺は」.

p.30 (2.75)，数式中 1 行目の $\langle|\xi$ は正しくは $\langle\xi|$.

p.39, 1 行目，エルミート共役の訳語を Hermite conjugate と記したが，正しくは Hermitian conjugate もしくは Hermitian adjoint．他書では adjoint は「随伴」と訳

されることが多いが，本書では「共役」とする．ついでに言うと，adjoint の読み方は「アジョイント」である．昔，私は「アドジョイント」と読んでいた．

p.42, 3-3 節冒頭 1, 2 行，エルミート演算子の訳語を Hermite operator と記したが，正しくは Hermitian operator. たんに Hermitian と記すこともある．

p.42, 3-3 節冒頭 3, 4 行，反エルミート演算子の訳語を anti-Hermite operator と記したが，正しくは anti-Hermitian operator. たんに anti-Hermitian と記すこともある．

p.42 (3.55)，数式中の 3 行目の第 2 項

$$-i\hbar\int_{-\infty}^{\infty}\frac{\partial\psi_1(x)}{\partial x}\psi_2^*(x)\,dx \tag{S.1}$$

の中の $\psi_2^*(x)$ は $\psi_2(x)^*$ と書くべき．

p.45 の補足欄の「無限次元のヒルベルト空間に対しては，演算子の行列式が定義できないし，無限次数の代数的方程式も解けない」を「無限次元のヒルベルト空間に対しては，たいていの演算子の行列式が定義できないし，無限次数の特性方程式が出ても解けない」と直したい.（詳細をこのノートの第 13 節で説明する.）

p.48, 3-5 節 3 行目の (iii),「一次独立な固有ベクトルの集合が $\mathscr{H}$ の基底になる」には,「(離散スペクトルなら）一次独立な固有ベクトルの集合が $\mathscr{H}$ の基底になる」というふうに括弧書きで条件を付ける．また,「逆に，これら (i), (ii), (iii) の性質を」の部分を「逆に，(i), (ii), (iii) の性質を」とする．

p.69 の「(iv) 無限次元空間上の演算子 $\hat{A}$ の行列式 $\det\hat{A}$ は定義できない」を「(iv) 無限次元空間上の演算子 $\hat{A}$ の行列式 $\det\hat{A}$ は定義できないことが多い」と直す.

p.69 の「(v) 演算子 $\hat{A}$ の固有値 $\lambda$ を求めるために特性方程式 $\det(\lambda\hat{I}-\hat{A})=0$ を使うことはできない」を「(v) 演算子 $\hat{A}$ の固有値 $\lambda$ を求めるために特性方程式 $\det(\lambda\hat{I}-\hat{A})=0$ を使えないことが多い」と直す.

p.73 (5.19) の $\exp(2\pi$ は正しくは $\exp(i2\pi$.

p.74 (5.28) の

$$b_n=\frac{1}{i\sqrt{2a}}(c_n-c_{-n}) \quad \text{は正しくは} \quad b_n=\frac{i}{\sqrt{2a}}(c_n-c_{-n}). \tag{S.2}$$

p.75 (5.32) の下，チルダの英語表記が「tilder」になっているが正しくは「tilde」.

p.77 (5.49), (5.50) の積分変数 $dp$ は正しくは $dx$.

p.81, ページ末「値 $b$ が出て来る確率もゼロである」の後に段落を換えて,「一般に，可換な物理量演算子の同時固有ベクトルで CONS ができて，固有値の出現に関して総和が 1 になる結合確率が定まる.」という一文を挿入する．この追記をしたい理由をこのノートの第 15 節で説明する．

p.104 (7.79) の上の「最小不確定性状態」を「極小不確定性状態」に改める．p.106 (7.97) の上の文においても同様．p.106 (7.105) の上の文において「最小不確定性波束

(minimum uncertainty wave-packet)」を「極小不確定性波束 (minimal uncertainty wave-packet)」に改める．最小と呼ぶか極小と呼ぶべきか迷ったが，一般に交換子 $[\hat{A}, \hat{B}]$ が恒等演算子のスカラー倍ではない場合は，ロバートソンの不等式 (7.63), $\sigma(\hat{A}) \cdot \sigma(\hat{B}) \geq \frac{1}{2}|\langle[\hat{A}, \hat{B}]\rangle|$ の等号が成立したからと言って標準偏差の積 $\sigma(\hat{A}) \cdot \sigma(\hat{B})$ が（すべての単位ベクトル状態に比べて）最小値になっているとは限らないので，最小と呼ぶよりは極小と呼ぶ方がよいと判断する．位置と運動量に関しては $[\hat{X}, \hat{P}] = i\hbar\hat{I}$ がスカラー定数倍演算子なので，極小不確定性が最小不確定性にもなっている．しかし，最小値は一意的であっても，最小不確定性波束の波動関数は一意的ではないので，やはり「極小」という呼び名で通した方がよいと判断する．そもそも物理量演算子 $\hat{A}$ または $\hat{B}$ の固有状態が存在するなら，固有状態に対しては標準偏差 $\sigma(\hat{A})$, $\sigma(\hat{B})$ のどちらかは 0，かつ，$\langle[\hat{A}, \hat{B}]\rangle = 0$ となって，ロバートソンの不等式の両辺はともに 0 になってしまい，他方の標準偏差に対しては何も制限が付かない．交換子 $[\hat{A}, \hat{B}]$ が恒等演算子のスカラー倍ではない場合の不確定性不等式の解釈は意外に難しいのである．

p.104 (7.79)

$$\Big(-i\hbar\frac{\partial}{\partial x} - iZx\Big)\psi(x) = \Big(\langle\hat{P}\rangle - iZ\langle\hat{X}\rangle\Big)|\psi\rangle \tag{S.3}$$

の右辺の $|\psi\rangle$ は正しくは $\psi(x)$.

p.115 (8.34) の上,「それぞれの上の演算子を」を「$\mathscr{H}^{(1)}$, $\mathscr{H}^{(2)}$ 上の演算子を」に改める．

p.126 (9.28) の上，$\langle\chi_1|\chi_2\rangle = \langle\chi_2|\chi_2\rangle = 1$ は正しくは $\langle\chi_1|\chi_1\rangle = \langle\chi_2|\chi_2\rangle = 1$.

p.183, 問 9-2 の解答において数式末尾の $E_1(t)$ は正しくは $\hat{E}_1(t)$. 同様に，数式末尾の $E_2(t)$ は正しくは $\hat{E}_2(t)$.

p.183 の下から 3 行目，問 9-2 の解答の中の数式の $\hat{E}_2(t)$ の微分から出てくる $e^{t(\hat{A}+\hat{B})}$ は正しくは $e^{t\hat{A}}\,e^{t\hat{B}}$.

## 3　ぶっきらぼうな言語表現について

p.31 (2.77) の上の文中の「証明は計算である」という表現が雑すぎた．この語句だけを取り出すと,「すべての証明は計算である」という普遍的な主張をしているように読めてしまうが，言いたかったことは「（(2.76) に挙げた）この性質は計算を追っていけば証明できる」という意である．

演習問題の略解中に「計算すればそうなる」という記述が 3 回,「ヒントのとおりにやればよい」が 2 回,「簡単なので解答は省略する」が 1 回,「問 X-X で済んでいる」が 2 回現れる．これらも少し投げやりな感じのする文ではあるが，問題を見て

みれば，そうとしか言いようがないことがわかってもらえると思う．すでに済んでいる問題を 2 度出しているのは，文脈を変えて意味を考えてほしかったからである．

## 4　解答の追加

「簡単なので解答は省略する」としてしまった**問 B-1** の答えを書いておく．指数関数を用いた三角関数の定義式

$$e^{i\theta} = \cos\theta + i\sin\theta \tag{S.4}$$

を認めると，指数法則

$$e^{i(\alpha+\beta)} = e^{i\alpha}\, e^{i\beta} \tag{S.5}$$

の左辺は

$$e^{i(\alpha+\beta)} = \cos(\alpha+\beta) + i\sin(\alpha+\beta) \tag{S.6}$$

となり，(S.5) の右辺は

$$\begin{aligned} e^{i\alpha}\, e^{i\beta} &= (\cos\alpha + i\sin\alpha)\,(\cos\beta + i\sin\beta) \\ &= \cos\alpha\,\cos\beta - \sin\alpha\,\sin\beta + i\{\cos\alpha\,\sin\beta + \sin\alpha\,\cos\beta\} \end{aligned} \tag{S.7}$$

となるので，(S.6) と (S.7) の実部同士，虚部同士が等しいことから

$$\cos(\alpha+\beta) = \cos\alpha\,\cos\beta - \sin\alpha\,\sin\beta, \tag{S.8}$$

$$\sin(\alpha+\beta) = \cos\alpha\,\sin\beta + \sin\alpha\,\cos\beta \tag{S.9}$$

を得る．以上が**問 B-1** の答えである．

**問 B-2** についてコメントしておく．複素数の積の絶対値は，各複素数の絶対値の積に等しく（$|zw| = |z|\cdot|w|$），複素数の積の偏角は，各複素数の偏角の和に等しい（$\arg(zw) = \arg z + \arg w$）ことは，複素数の極表示と指数法則を認めれば

$$zw = |z|\,e^{i\alpha}\,|w|\,e^{i\beta} = |z|\,|w|\,e^{i\alpha}\,e^{i\beta} = |z|\,|w|\,e^{i(\alpha+\beta)} \tag{S.10}$$

となることから明らかではあるが，幾何学的方法で示すこともできる [1]．同じ結果を得るにしても，見方や手段を替えていろいろなやり方でやってみると，リッチな描像や，より一層の納得感が得られるので，やってみてほしい．

## 5　ブラ・ケットとケット・ブラ

本書の (2.37), (3.20) 式のあたりで示したことだが，ブラ・ケットの内積とケット・ブラのテンソル積について念入りに説明しておく．

本書の 2-7 節で，$n$ 次元複素ユークリッド空間 $\mathbb{C}^n$ を導入した．$\mathbb{C}^n$ は $n$ 個の複素数を並べた列ベクトル

$$|\psi_z\rangle = \begin{pmatrix} z_1 \\ z_2 \\ \vdots \\ z_n \end{pmatrix}, \qquad |\psi_w\rangle = \begin{pmatrix} w_1 \\ w_2 \\ \vdots \\ w_n \end{pmatrix} \tag{S.11}$$

などを全部集めた集合である．ベクトル $|\psi_w\rangle$ の転置複素共役を

$$\langle\psi_w| = (w_1^*, w_2^*, \cdots, w_n^*) \tag{S.12}$$

と書き，$\langle\psi_w|$ をブラ (bra) ベクトル，$|\psi_w\rangle$ をケット (ket) ベクトルと呼ぶ．ブラ・ケットの順に噛み合わせると内積

$$\langle\psi_w|\psi_z\rangle \;=\; (w_1^*, w_2^*, \cdots, w_n^*)\begin{pmatrix} z_1 \\ z_2 \\ \vdots \\ z_n \end{pmatrix} \;=\; w_1^* z_1 + w_2^* z_2 + \cdots + w_n^* z_n \tag{S.13}$$

が定まる．ケット・ブラの順に並べると行列（演算子）

$$|\psi_z\rangle\langle\psi_w| \;=\; \begin{pmatrix} z_1 \\ z_2 \\ \vdots \\ z_n \end{pmatrix}(w_1^*, w_2^*, \cdots, w_n^*) \;=\; \begin{pmatrix} z_1 w_1^* & z_1 w_2^* & \cdots & z_1 w_n^* \\ z_2 w_1^* & z_2 w_2^* & \cdots & z_2 w_n^* \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ z_n w_1^* & z_n w_2^* & \cdots & z_n w_n^* \end{pmatrix} \tag{S.14}$$

が定まる．どう見ても，ブラ・ケットの順の積で定まる (S.13) と，ケット・ブラの順の積で定まる (S.14) は別ものである．$\langle\psi_w|\psi_z\rangle$ は一つの複素数であるのに対し，$|\psi_z\rangle\langle\psi_w|$ は一つの行列である．

例えば，$\mathbb{C}^2$ において

$$|\psi_z\rangle = \begin{pmatrix} 1+4i \\ 2+3i \end{pmatrix}, \qquad |\psi_w\rangle = \begin{pmatrix} 8+5i \\ 7+6i \end{pmatrix} \tag{S.15}$$

とすれば，ブラ・ケット積は

$$\begin{aligned}
\langle\psi_w|\psi_z\rangle &= (8-5i,\, 7-6i)\begin{pmatrix} 1+4i \\ 2+3i \end{pmatrix} \\
&= (8-5i)(1+4i) + (7-6i)(2+3i) \\
&= 8 + 32i - 5i + 20 + 14 + 21i - 12i + 18 \\
&= 60 + 36i
\end{aligned} \tag{S.16}$$

となるし，ケット・ブラ積は

$$
\begin{aligned}
|\psi_z\rangle\langle\psi_w| &= \begin{pmatrix} 1+4i \\ 2+3i \end{pmatrix}(8-5i,\, 7-6i) \\
&= \begin{pmatrix} (1+4i)(8-5i,\, 7-6i) \\ (2+3i)(8-5i,\, 7-6i) \end{pmatrix} \\
&= \begin{pmatrix} (1+4i)(8-5i) & (1+4i)(7-6i) \\ (2+3i)(8-5i) & (2+3i)(7-6i) \end{pmatrix} \\
&= \begin{pmatrix} 8-5i+32i+20 & 7-6i+28i+24 \\ 16-10i+24i+15 & 14-12i+21i+18 \end{pmatrix} \\
&= \begin{pmatrix} 28+27i & 31+22i \\ 31+14i & 32+9i \end{pmatrix} \qquad \text{(S.17)}
\end{aligned}
$$

となる．

なお，より一般に，$m$ 次元の縦ベクトルと $n$ 次元の横ベクトルを掛けると（この場合の積はテンソル積である），$m$ 行 $n$ 列の行列になる：

$$
\begin{aligned}
\begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_m \end{pmatrix} \otimes (y_1, y_2, \cdots, y_n) &= \begin{pmatrix} x_1(y_1, y_2, \cdots, y_n) \\ x_2(y_1, y_2, \cdots, y_n) \\ \vdots \\ x_m(y_1, y_2, \cdots, y_n) \end{pmatrix} \\
&= \left( \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_m \end{pmatrix} y_1 \ \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_m \end{pmatrix} y_2 \cdots \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_m \end{pmatrix} y_n \right) \\
&= \begin{pmatrix} x_1y_1 & x_1y_2 & \cdots & x_1y_n \\ x_2y_1 & x_2y_2 & \cdots & x_2y_n \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ x_my_1 & x_my_2 & \cdots & x_my_n \end{pmatrix}. \qquad \text{(S.18)}
\end{aligned}
$$

上式右辺の 1 行目と 2 行目は，どちらにどちらを掛けたと思ってもよいということを表している．

また，$\lambda_1, \lambda_2, \lambda_3$ を任意の実数として，$\mathbb{C}^3$ 上の演算子

$$
\hat{A} = \begin{pmatrix} \lambda_1 & 0 & 0 \\ 0 & \lambda_2 & 0 \\ 0 & 0 & \lambda_3 \end{pmatrix} \qquad \text{(S.19)}
$$

を定めると，

$$
|\chi_1\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \qquad |\chi_2\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \qquad |\chi_3\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} \qquad \text{(S.20)}
$$

はそれぞれ $\hat{A}$ の固有値 $\lambda_1, \lambda_2, \lambda_3$ に属する固有ベクトルであり，単位ベクトルでもある．$\hat{\Pi}_1^A := |\chi_1\rangle\langle\chi_1|$ を定めると

$$\hat{\Pi}_1^A = |\chi_1\rangle\langle\chi_1| = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} (1,0,0) = \begin{pmatrix} 1\,(1,0,0) \\ 0\,(1,0,0) \\ 0\,(1,0,0) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \tag{S.21}$$

となる．$\hat{\Pi}_2^A := |\chi_2\rangle\langle\chi_2|$, $\hat{\Pi}_3^A := |\chi_3\rangle\langle\chi_3|$ も同様に

$$\hat{\Pi}_2^A = |\chi_2\rangle\langle\chi_2| = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} (0,1,0) = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \tag{S.22}$$

$$\hat{\Pi}_3^A = |\chi_3\rangle\langle\chi_3| = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} (0,0,1) = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \tag{S.23}$$

となる．これらを足すと

$$\hat{\Pi}_1^A + \hat{\Pi}_2^A + \hat{\Pi}_3^A = \sum_{r=1}^{3} |\chi_r\rangle\langle\chi_r| = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} = \hat{I} \tag{S.24}$$

は恒等演算子（単位行列）になる．これは本書の (2.69) 式および (4.3) 式の具体例になっている．(S.24) は**単位の分解**とも呼ばれる．一般に CONS $\{|\chi_1\rangle, \cdots, |\chi_n\rangle\}$ に関して

$$\langle\chi_r|\chi_r\rangle = 1 \text{ であるが，} \tag{S.25}$$

$$|\chi_r\rangle\langle\chi_r| = 1 \text{ ではない．} \tag{S.26}$$

$$\sum_{r=1}^{n} |\chi_r\rangle\langle\chi_r| = \hat{I} \text{ は正しい．} \tag{S.27}$$

$\hat{\Pi}_r^A$ $(r = 1,2,3)$ はそれぞれ射影演算子であるし，$\hat{\Pi}_1^A + \hat{\Pi}_2^A$ も射影演算子である．実際，

$$\hat{\Pi}_1^A + \hat{\Pi}_2^A = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \tag{S.28}$$

を任意の 3 次元ベクトルに作用させると

$$(\hat{\Pi}_1^A + \hat{\Pi}_2^A)|\psi\rangle = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} x \\ y \\ 0 \end{pmatrix} \tag{S.29}$$

となり，$\hat{\varPi}_1^A + \hat{\varPi}_2^A$ は 3 次元ベクトルを $x, y$ 平面に射影させていることがわかる．

(S.24) の代わりに，射影演算子を固有値でスカラー倍して足すと

$$\lambda_1 \hat{\varPi}_1^A + \lambda_2 \hat{\varPi}_2^A + \lambda_3 \hat{\varPi}_3^A = \sum_{r=1}^{3} \lambda_r |\chi_r\rangle\langle\chi_r| = \begin{pmatrix} \lambda_1 & 0 & 0 \\ 0 & \lambda_2 & 0 \\ 0 & 0 & \lambda_3 \end{pmatrix} = \hat{A} \tag{S.30}$$

となって，もとの演算子 $\hat{A}$ を再現する．これは (3.123) で示した**スペクトル分解**の一例になっている．

別の例として，$\mathbb{C}^3$ 上の演算子

$$\hat{B} = \begin{pmatrix} 3 & 1 & -1 \\ 1 & 3 & -1 \\ -1 & -1 & 5 \end{pmatrix} \tag{S.31}$$

を定めると，

$$|\phi_1\rangle = \frac{1}{\sqrt{3}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix}, \qquad |\phi_2\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \\ 0 \end{pmatrix}, \qquad |\phi_3\rangle = \frac{1}{\sqrt{6}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ -2 \end{pmatrix} \tag{S.32}$$

は $\hat{B}$ の固有値 $\mu_1 = 3,\ \mu_2 = 2,\ \mu_3 = 6$ にそれぞれ属する固有ベクトルであり，単位ベクトルであり，互いに直交している．$\hat{\varPi}_r^B := |\phi_r\rangle\langle\phi_r|\ (r = 1, 2, 3)$ は

$$\hat{\varPi}_1^B = |\phi_1\rangle\langle\phi_1| = \frac{1}{3} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix} (1, 1, 1) = \frac{1}{3} \begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 1 \end{pmatrix} = \frac{1}{6} \begin{pmatrix} 2 & 2 & 2 \\ 2 & 2 & 2 \\ 2 & 2 & 2 \end{pmatrix}, \tag{S.33}$$

$$\hat{\varPi}_2^B = |\phi_2\rangle\langle\phi_2| = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \\ 0 \end{pmatrix} (1, -1, 0) = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & -1 & 0 \\ -1 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} = \frac{1}{6} \begin{pmatrix} 3 & -3 & 0 \\ -3 & 3 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \tag{S.34}$$

$$\hat{\varPi}_3^B = |\phi_3\rangle\langle\phi_3| = \frac{1}{6} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ -2 \end{pmatrix} (1, 1, -2) = \frac{1}{6} \begin{pmatrix} 1 & 1 & -2 \\ 1 & 1 & -2 \\ -2 & -2 & 4 \end{pmatrix} \tag{S.35}$$

となる．これらは射影演算子であり，足すと

$$\hat{\varPi}_1^B + \hat{\varPi}_2^B + \hat{\varPi}_3^B = \frac{1}{6} \begin{pmatrix} 6 & 0 & 0 \\ 0 & 6 & 0 \\ 0 & 0 & 6 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} = \hat{I} \tag{S.36}$$

となって，単位の分解を再現する．射影演算子を固有値でスカラー倍して足すと

$$\mu_1 \hat{\varPi}_1^B + \mu_2 \hat{\varPi}_2^B + \mu_3 \hat{\varPi}_3^B = \begin{pmatrix} 3 & 1 & -1 \\ 1 & 3 & -1 \\ -1 & -1 & 5 \end{pmatrix} = \hat{B} \tag{S.37}$$

となって，演算子 $\hat{B}$ を再現する．

## 6　ブラ・ケットの結合律

ブラ・ケットの順の積 (S.13) とケット・ブラの順の積 (S.14) は別ものであった．ブラベクトルやケットベクトルの掛け算は並べる順番に意味があり，勝手に並び変えてはいけない．しかし，隣り合ったブラやケットをくっつける順番は変えてもよい．例えば $\alpha_1, \cdots, \gamma_n$ を任意の複素数として

$$|\alpha\rangle = \begin{pmatrix} \alpha_1 \\ \vdots \\ \alpha_n \end{pmatrix}, \qquad |\beta\rangle = \begin{pmatrix} \beta_1 \\ \vdots \\ \beta_n \end{pmatrix}, \qquad |\gamma\rangle = \begin{pmatrix} \gamma_1 \\ \vdots \\ \gamma_n \end{pmatrix} \tag{S.38}$$

とおくと，$|\alpha\rangle\langle\beta|\gamma\rangle$ という式は

$$|\alpha\rangle\langle\beta|\gamma\rangle = \begin{pmatrix} \alpha_1 \\ \vdots \\ \alpha_n \end{pmatrix} (\beta_1^*, \cdots, \beta_n^*) \begin{pmatrix} \gamma_1 \\ \vdots \\ \gamma_n \end{pmatrix} \tag{S.39}$$

のように縦ベクトル・横ベクトル・縦ベクトルが順に並んだものである．$|\alpha\rangle\langle\beta|$ の結合を先に計算すれば

$$\Big(|\alpha\rangle\langle\beta|\Big)|\gamma\rangle = \begin{pmatrix} \alpha_1\beta_1^* & \cdots & \alpha_1\beta_n^* \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \alpha_n\beta_1^* & \cdots & \alpha_n\beta_n^* \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \gamma_1 \\ \vdots \\ \gamma_n \end{pmatrix} \tag{S.40}$$

というふうに行列がベクトルに作用している式になるし，$\langle\beta|\gamma\rangle$ の結合を先に計算すれば

$$|\alpha\rangle\Big(\langle\beta|\gamma\rangle\Big) = \begin{pmatrix} \alpha_1 \\ \vdots \\ \alpha_n \end{pmatrix} (\beta_1^*\gamma_1 + \cdots + \beta_n^*\gamma_n) \tag{S.41}$$

というふうにベクトルをスカラー倍している式になる．(S.40) と (S.41) は同じ結果になるので，結局，

$$\Big(|\alpha\rangle\langle\beta|\Big)|\gamma\rangle = |\alpha\rangle\Big(\langle\beta|\gamma\rangle\Big) = |\alpha\rangle\langle\beta|\gamma\rangle \tag{S.42}$$

と書いてよい．つまり，隣り合ったブラやケットは，ちゃんと噛み合う並べ方になっている限り，どこを先に噛み合わせて計算してもよい．この規則性を**結合律** (associative law, associativity) という．ただし，

$$|\alpha\rangle\langle\beta|\gamma\rangle, \qquad |\beta\rangle\langle\alpha|\gamma\rangle, \qquad |\alpha\rangle\langle\gamma|\beta\rangle, \qquad |\gamma\rangle\langle\beta|\alpha\rangle \tag{S.43}$$

は一般には等しくない．つまり，並び順を変えると演算結果も変わるのが普通である．また

$$|\alpha\rangle|\beta\rangle \tag{S.44}$$

のような「噛み合っていない」式を書くのは違反である．一方で

$$|\alpha\rangle \otimes |\beta\rangle \tag{S.45}$$

のようなテンソル積なら書いてよい．ただし，$|\alpha\rangle \otimes |\beta\rangle$ のことを $|\alpha\rangle|\beta\rangle$ と書く人もいるので注意が必要である．テンソル積を多用すると「どれとどれが噛み合うのか」を追跡しにくくなるので，注意が必要である．例えば

$$\Big(\langle\phi| \otimes \langle\chi|\Big)\Big(|\alpha\rangle \otimes |\beta\rangle\Big) = \langle\phi|\alpha\rangle\langle\chi|\beta\rangle \tag{S.46}$$

が成り立つ．

こうして見ると，ブラやケットを書き並べた式では，結合するものと，結合しないものとを見分けることが重要であることがわかる．ヒルベルト空間においては「ブラとケットは噛み合ってスカラー（複素数）になる」という**内積**あるいは**縮約** (contraction) が基本である．それ以外の書き並べはテンソル積で定められる．「結合可能性 (composability) をきちんと見分けて式を書き並べることができて，くっつくところでは結合律が成り立つ」という構造を扱う数学が**圏論** (category theory) である．圏論は量子力学との相性がよく，近年，**圏論的量子力学** (categorical quantum mechanics) と呼ばれる分野の研究が進んでいる．

# 7 ダミーインデックス

数学でも物理でも記号に**添字** (index, label) をつけて書くことがよくある．数列 $a_1, a_2, a_3, \cdots$ や多数の物体の質量 $m_1, m_2, \cdots, m_N$ などがそうである．また，行列

$$A = \begin{pmatrix} A_{11} & A_{12} & \cdots & A_{1n} \\ A_{21} & A_{22} & \cdots & A_{2n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ A_{m1} & A_{m2} & \cdots & A_{mn} \end{pmatrix} \tag{S.47}$$

の成分 $A_{ij}$ のように **2 連添字**を持つ記号も書いてよい．形式的には，**3 連添字**を持つ記号 $A_{ijk}$ や**多連添字**を持つ記号 $A_{i_1 i_2 \cdots i_p}$ も書いてよい．あった方がよければ，多連添字を $A_{i,j}$ や $A_{i_1,i_2,\cdots,i_p}$ のようにコンマで区切って書いてもよい．

添字というものは自然数 $1, 2, 3, \cdots$ に限る必要もなく，例えば，連続的な実数 $x$ を添字として実数 $A_x$ を考えてもよい．この場合，$A_1$ や $A_{1.1}$ や $A_{1.4}$ や $A_{\sqrt{2}}$ や $A_{3.1415\cdots}$

が実数値として定まっていることになる．また，添字 $x$ が動く範囲はすべての実数とは限らず，$0 \le x \le 1$ の範囲の $x$ に対して $A_x$ が定まっていてもよい．$\lambda = \frac{1}{n^2}$ とおいて $n = 1, 2, 3, \cdots$ に対してのみ $A_\lambda$ が定まっているとしてもよい．また，連続的な実数 $x, y$ を添字として 2 連添字を持つ実数 $A_{x,y}$ を考えてもよい．言葉の綾(あや)ではあるが，数 $A_{x,y}$ を「$x$ を行番号，$y$ を列番号とする行列の成分」とみたててもよい．さらに 4 連添字を持つ数 $A_{x,i,y,j}$ を「$(x, i)$ を行番号，$(y, j)$ を列番号とする行列の成分」とみたててもよい．本書 p.65 (4.34) 式の下で「$(\lambda', r)$ を "行番号"，$(\lambda, s)$ を "列番号" とする行列成分」と述べたのは，多連添字を持つ数列 $A_{\lambda',r,\lambda,s}$, $B_{\lambda,s,\lambda'',t}$ の積を

$$\sum_{\lambda} \sum_{s} A_{\lambda',r,\lambda,s} \, B_{\lambda,s,\lambda'',u} \tag{S.48}$$

で定めるからであり，これがちょうど行列の積

$$\sum_{j} A_{ij} B_{jk} \tag{S.49}$$

と同じ構造になるからである．あるいは，連続的な実数変数 $x, y, z$ を添字に持つ実数「行列」$A_{xy}$ と $B_{yz}$ の積を

$$C_{xz} = \int_{-\infty}^{\infty} A_{xy} B_{yz} \, dy \tag{S.50}$$

で定めれば，これも行列の積のようにみなすことができる．さらに言えば，添字の内容は数である必要もなく，例えば $v_x, v_y, v_z$ という 3 つの変数を書いているときの $x, y, z$ はただの文字記号にすぎず，これらを $v_i$ と書いて $i = x, y, z$ としてもよい．

$A_{i_r}$ は **2 重添字**を持つ記号である．これは，

$$A_1, \, A_2, \, A_3, \, \cdots, A_{100} \tag{S.51}$$

のような数列と，別の数列

$$i_1, \, i_2, \, i_3, \, i_4, \, i_5, \, i_6 \tag{S.52}$$

が与えられたとき，例えば

$$i_1 = 2, \, i_2 = 4, \, i_3 = 8, \, i_4 = 16, \, i_5 = 32, \, i_6 = 64 \tag{S.53}$$

であれば，$A_{i_1}, A_{i_2}, A_{i_3}, A_{i_4}, A_{i_5}, A_{i_6}$ は元の数列 (S.51) から

$$A_2, \, A_4, \, A_8, \, A_{16}, \, A_{32}, \, A_{64} \tag{S.54}$$

だけを取り出した数列である．なので $\{A_{i_r}\}_{r=1,\cdots,6}$ を $\{A_i\}_{i=1,\cdots,100}$ の**部分列**ともいう．添字の数列は単調増加である必要もなく，$i_1 = 2, i_2 = 2, i_3 = 2$ のように同

じ値を繰り返してもよいし，$i_1 = 100, i_2 = 99, i_3 = 98$ のような減少列でもよい．また，元の数列は $A_1, A_2, \cdots, A_{100}$ のように 100 項しかなくても，部分列の方は $A_{i_1}, A_{i_2}, \cdots, A_{i_{1000}}$ のように項数が 100 を越えてもよい．

添字や，多連添字，多重添字を使えば，無数に新しい記号を作ることができて便利なので，添字は多用されるが，その使い方にはいろいろ注意が必要である．

問題は添字を文字変数で表すときである．$A_r$ と $A_s$ と書くとき，$r$ と $s$ は別ものかもしれないので，$A_r$ と $A_s$ は別ものとして扱わなくてはならない．しかし

$$T = \sum_{r=1}^{n} A_r \quad \text{と} \quad T' = \sum_{s=1}^{n} A_s \tag{S.55}$$

はどちらも

$$T = A_1 + A_2 + \cdots + A_n \tag{S.56}$$

であり，従って $T = T'$ である．(S.55) に現れた添字 $r$ や $s$ を**ダミーインデックス** (dummy index) という．これらの式に現れた添字 $r$ や $s$ は,「10 番目の数 $A_{10}$」のように特定の対象を指すための数字ではなく，式を書く上で $A_1, A_2, \cdots, A_r, \cdots,$ を順に呼び出すために書かれているだけであり，結果的には，どの特定の対象も指していない．ゆえに，(S.55) の式中の $r$ や $s$ は他の文字に取り替えてもよい：

$$T = \sum_{r=1}^{n} A_r = \sum_{s=1}^{n} A_s = \sum_{x=1}^{n} A_x. \tag{S.57}$$

間違いは，こういうダミーインデックスを含む式を演算したり等号で結んだりするときに起こりやすい．例えば $T^2 = T \times T$ を求めるときに

$$T^2 = \left(\sum_{r=1}^{n} A_r\right)^2 = \left(\sum_{r=1}^{n} A_r\right)\left(\sum_{r=1}^{n} A_r\right) \tag{S.58}$$

と書いてしまうと，意味を取り違えやすい．これを

$$\begin{aligned} T^2 = (\text{誤}) \sum_{r=1}^{n}\left(\sum_{r=1}^{n} A_r A_r\right) &= \sum_{r=1}^{n}\left(A_1A_1 + A_2A_2 + \cdots + A_nA_n\right) \\ &= n\left(A_1A_1 + A_2A_2 + \cdots + A_nA_n\right) \end{aligned} \tag{S.59}$$

と計算したら間違いである．

$$\begin{aligned} T^2 &= \left(\sum_{r=1}^{n} A_r\right)\left(\sum_{s=1}^{n} A_s\right) \\ &= (A_1 + A_2 + \cdots + A_n)(A_1 + A_2 + \cdots + A_n) \\ &= A_1A_1 + A_1A_2 + A_1A_3 + \cdots + A_2A_1 + A_2A_2 + A_2A_3 + + \cdots + A_nA_n \end{aligned} \tag{S.60}$$

が正しい．なお，

$$\sum_{r=1}^{n} A \tag{S.61}$$

のように添字 $r$ に依存しない一定の数 $A$ に和記号 $\sum_{r=1}^{n}$ が掛かっている場合は，$A_r = A$ と考えて，結局，同じ $A$ を $n$ 個足すから

$$\sum_{r=1}^{n} A = \sum_{r=1}^{n} A_r = A_1 + A_2 + \cdots + A_n = A + A + \cdots + A = nA \tag{S.62}$$

となる．

また，数列 $A_1, \cdots, A_n$ と別の数列 $B_1, \cdots, B_n$ に関して

$$\sum_{r=1}^{n} A_r = \sum_{r=1}^{n} B_r \tag{S.63}$$

という等式は成立しうるし，これを

$$\sum_{r=1}^{n} A_r = \sum_{s=1}^{n} B_s \tag{S.64}$$

と書き換えてもよい．もちろん (S.63) が成立しているからと言って，$A_r = B_r$ が導けるわけではない．

積分において

$$S = \int_a^b f(x)dx \quad と \quad S' = \int_a^b f(y)dy \tag{S.65}$$

は等しい．定積分の中の積分変数はいわば「ダミー変数」であり，

$$S = \int_a^b f(x)dx = \int_a^b f(y)dy = \int_a^b f(t)dt \tag{S.66}$$

のように，紛れがない限り積分変数を任意の文字記号で置き換えてよいし，紛れを避けるために文字を替えた方がよいときは積極的に替えるべきである．例えば

$$S^2 = \int_a^b f(x)dx \cdot \int_a^b f(y)dy \tag{S.67}$$

と書くのはよいが，

$$S^2 = \int_a^b f(x)dx \cdot \int_a^b f(x)dx = (誤) \int_a^b \left\{ \int_a^b f(x)f(x)dx \right\} dx \tag{S.68}$$

としてしまうと意味も値も違うものになってしまう．また，2 変数関数 $f(x, y)$ を変数 $x$ についてのみ積分した式

$$U = \int_a^b f(x, y)dx \tag{S.69}$$

を

$$U = \int_a^b f(t, y)dt \tag{S.70}$$

のように積分変数を換えるのはやってよいが（紛れがない限り積分変数を任意の文字記号で置き換えてよい），

$$U = \text{（誤）} \int_a^b f(y, y)dy \tag{S.71}$$

は別ものになる．

$$g(x) \int_a^b f(x)dx = \text{（誤）} \int_a^b g(x)f(x)dx \tag{S.72}$$

もやってはいけない．

$$g(x) \int_a^b f(t)dt = \int_a^b g(x)f(t)dt \tag{S.73}$$

なら問題ない．

添字の議論の範囲を超えるが，**量化子**（限定子）(quantifier) と総称される**全称記号** (universal quantifier)∀ あるいは**存在記号** (existential quantifier)∃ が掛かる記号もダミーである．(記号論理学や数理論理学に関してはよい本がたくさん出ている．例えば [2] はきちんとした内容がやさしくして書かれていて，おすすめである．) 例えば,「任意の実数は 2 乗すると正または 0 である」という命題は論理記号を使って

$$\forall x \in \mathbb{R}\,(x^2 \geq 0) \tag{S.74}$$

と書かれるが，$x$ を $t$ に替えて

$$\forall t \in \mathbb{R}\,(t^2 \geq 0) \tag{S.75}$$

としても内容は変わらない．「いかなる自然数に対しても，それよりも大きな自然数がある」という命題は

$$\forall n \in \mathbb{N}\,(\,\exists m \in \mathbb{N}\,(n < m)\,) \tag{S.76}$$

と書けるが，

$$\forall x \in \mathbb{N}\,(\,\exists y \in \mathbb{N}\,(x < y)\,) \tag{S.77}$$

と書いても同じことである．「12 で割り切れる自然数は，4 でも割り切れる」という命題は

$$\forall x \in \mathbb{N}\,(\,\exists n \in \mathbb{N}\,(x = 12n)\ \Rightarrow\ \exists m \in \mathbb{N}\,(x = 4m)\,) \tag{S.78}$$

と書ける．記号論理学では量化子$\forall$や$\exists$の支配下にある記号を**束縛変数** (bound variable) という．例えば上の式 (S.78) では$x$, $n$, $m$が束縛変数である．束縛変数は，具体的な一定の数値を表しているわけではないし，他の記号と紛れがない限り別の記号に置き換えてもよい．束縛変数は，一般的に成り立つ関係を書き表すためにおかれているだけである．いっそのこと，$x$や$n$のところは空欄にしてもよいのだが，全部空欄にしてしまうと，どの空欄とどの空欄に同じものが入るべきなのかあるいは異なるものが入ってもよいのか，わからなくなってしまうので，同じものが入るべきスロットを同じ記号で書いているのである．この意味で束縛変数は「スペースホルダー」とも呼ばれるし,「ダミー変数」だとも言える．

以上のようにダミーインデックスを理解すれば，$\langle\chi_r|\chi_s\rangle = \delta_{rs}$と

$$|\psi\rangle = \sum_{r=1}^{n} c_r |\chi_r\rangle \tag{S.79}$$

から

$$\langle\chi_r|\psi\rangle = \text{（誤）} \sum_{r=1}^{n} c_r \langle\chi_r|\chi_r\rangle = \sum_{r=1}^{n} c_r \tag{S.80}$$

とするのは，やってはいけない式変形であることがわかるだろう．いったん (S.79) のダミーインデックスを

$$|\psi\rangle = \sum_{s=1}^{n} c_s |\chi_s\rangle \tag{S.81}$$

のように替えておいてから

$$\langle\chi_r|\psi\rangle = \sum_{s=1}^{n} c_s \langle\chi_r|\chi_s\rangle = \sum_{s=1}^{n} c_s \delta_{rs} = c_r \tag{S.82}$$

とすべきである．また，(S.79) の共役ブラベクトルを

$$\langle\psi| = \sum_{r=1}^{n} c_r^* \langle\chi_r| \tag{S.83}$$

と書くのはよいが，(S.79) と (S.83) の内積を

$$\langle\psi|\psi\rangle = \text{（誤）} \sum_{r=1}^{n} \sum_{r=1}^{n} c_r^* c_r \langle\chi_r|\chi_r\rangle \tag{S.84}$$

と書くと意味不明になる．(S.81) と (S.83) のようにダミーインデックスを異なるも

のにしておいてから

$$
\begin{aligned}
\langle\psi|\psi\rangle &= \left(\sum_{r=1}^{n} c_r^*\langle\chi_r|\right)\left(\sum_{s=1}^{n} c_s|\chi_s\rangle\right) \\
&= \sum_{r=1}^{n}\sum_{s=1}^{n} c_r^* c_s\langle\chi_r|\chi_s\rangle \\
&= \sum_{r=1}^{n}\sum_{s=1}^{n} c_r^* c_s\,\delta_{rs} \\
&= \sum_{r=1}^{n} c_r^* c_r \;= \sum_{r=1}^{n} |c_r|^2
\end{aligned} \tag{S.85}
$$

とするのが正しい．

ダミーインデックスは，考え方自体は素直なものであり，便利でもある．量子力学に限らず，数式を使ってものごとを明瞭に表記したりデータを処理したりするときにダミーインデックスは重宝するが，そこで混乱を招く書き方をしてしまっては元も子もないので気をつけてほしい．また，プログラミング言語においても，BASIC の FOR$\cdots$NEXT 構文や C 言語の while 構文においてもダミー変数の考え方が使われている．とくに入れ子のループ構造をプログラムで書くときには，ダミー変数の紛れがないようにしなければならないのは当然だろう．

## 8　和の可換律・結合律と和積の分配律

和の**可換律** (commutative law) とは数やベクトルや演算子に関して

$$B + A = A + B \tag{S.86}$$

が成り立つことである．和の**結合律** (associative law) とは数やベクトルや演算子に関して

$$(A + B) + C = A + (B + C) \tag{S.87}$$

が成り立つことである．当たり前すぎて意識することもないかもしれないが，例えば，2 連添字を持つ数列 $A_{ij}$ において等式

$$\sum_{i=1}^{m}\sum_{j=1}^{n} A_{ij} = \sum_{j=1}^{n}\sum_{i=1}^{m} A_{ij} \tag{S.88}$$

が成り立つが，この左辺は

$$
\begin{aligned}
&\sum_{i=1}^{m}\left(\sum_{j=1}^{n} A_{ij}\right) \\
=&(A_{11} + A_{12} + \cdots + A_{1n}) + (A_{21} + A_{22} + \cdots + A_{2n}) + \cdots + (A_{m1} + A_{m2} + \cdots + A_{mn})
\end{aligned} \tag{S.89}
$$

であり，右辺は

$$\sum_{j=1}^{n}\left(\sum_{i=1}^{m} A_{ij}\right)$$
$$=(A_{11}+A_{21}+\cdots+A_{m1})+(A_{12}+A_{22}+\cdots+A_{m2})+\cdots+(A_{1n}+A_{2n}+\cdots+A_{mn}) \tag{S.90}$$

である．行列 (S.47) の各行の成分を足してそれらの小計の合計を求めるのが行和 (S.89) であり，行列 (S.47) の各列の成分を足してそれらの小計の合計を求めるのが列和 (S.90) である．結果的には (S.89) と (S.90) は等しいのだが，これらが等しくなる理由は，和の可換律 (S.86) と和の結合律 (S.87) があって，有限個の項に関しては足し算の並び換え・組み換えをやってよいからである．(S.88) のような和の順序交換は，何の気なしにやる式変形だが，どういう根拠にもとづいてこれが「やってよい式変形」になっているのか，たまには立ち止まって考えてほしい．

**分配律** (distributive law) とは数やベクトルや演算子に関して

$$A(B+C)=AB+AC, \qquad (A+B)C=AC+BC \tag{S.91}$$

が成り立つことである．積は対象によって内積であったり，テンソル積であったり，演算子の合成であったりする．(S.91) の左辺から右辺に移るのが，いわゆる「カッコを外す」,「展開」の式変形である．(S.91) の右辺から左辺に移るのが「カッコで括(くく)る」,「因数分解」の式変形である．数列 $B_j$ に対して等式

$$A\sum_{j=1}^{n} B_j=\sum_{j=1}^{n} AB_j \tag{S.92}$$

が成り立つが，この左辺は

$$A\sum_{j=1}^{n} B_j=A(B_1+B_2+\cdots+B_n) \tag{S.93}$$

であり，右辺は

$$\sum_{j=1}^{n} AB_j=AB_1+AB_2+\cdots+AB_n \tag{S.94}$$

である．同様に

$$\left(\sum_{i=1}^{m} A_i\right)B=\sum_{i=1}^{m} A_iB \tag{S.95}$$

も成り立つ．(S.92) のように，足し算記号 $\sum_j$ の中に $A$ を入れたり出したりする（あるいは足し算記号 $\sum_j$ の置き場所を替える）ことはよくやる式変形だが，これもどういう根拠にもとづいて「やってよい」のか，一度は立ち止まって考えてほしい．

級数と級数の積についても

$$\begin{aligned}\left(\sum_{i=1}^{m} A_i\right)\left(\sum_{j=1}^{n} B_j\right) &= \sum_{i=1}^{m}\left(A_i \sum_{j=1}^{n} B_j\right) \\ &= \sum_{i=1}^{m}\left(\sum_{j=1}^{n} A_i B_j\right) \\ &= \sum_{j=1}^{n}\left(\sum_{i=1}^{m} A_i\right) B_j \\ &= \sum_{j=1}^{n}\left(\sum_{i=1}^{m} A_i B_j\right) \end{aligned} \tag{S.96}$$

という式変形が分配律によって正当化される．こう考えると (S.60) も

$$T^2 = \left(\sum_{r=1}^{n} A_r\right)\left(\sum_{s=1}^{n} A_s\right) = \sum_{r=1}^{n}\sum_{s=1}^{n} A_r A_s \tag{S.97}$$

と書いてよいことがわかる．

# 9　ダミーインデックスの理解度チェック

以下の計算でつまずくことはないか確認してみよう．さすがにこれは迷うことはないだろう：

$$T = \sum_{k=1}^{3} k = 1 + 2 + 3 = 6. \tag{S.98}$$

これはよくない：

$$T^2 = T \times T = \sum_{k=1}^{3} k \sum_{k=1}^{3} k. \tag{S.99}$$

せめてこう書いた方がよい：

$$T^2 = \left(\sum_{k=1}^{3} k\right)^2 = \left(\sum_{k=1}^{3} k\right)\left(\sum_{k=1}^{3} k\right) = (1+2+3)^2 = 36. \tag{S.100}$$

(S.99) はこのようにも解釈できて，どう計算したらよいのかわからなくなる：

$$T^2 = (\text{誤}) \sum_{k=1}^{3}\left(k \sum_{k=1}^{3} k\right) = (\text{誤}) \sum_{k=1}^{3}\left(\sum_{k=1}^{3} k^2\right). \tag{S.101}$$

こう書くのは正当：

$$T^2 = \left(\sum_{j=1}^{3} j\right)\left(\sum_{k=1}^{3} k\right) = \sum_{j=1}^{3}\left(j\sum_{k=1}^{3} k\right) = \sum_{j=1}^{3}\sum_{k=1}^{3} jk = 36. \tag{S.102}$$

これも正しい：

$$T + T = \left(\sum_{k=1}^{3} k\right) + \left(\sum_{k=1}^{3} k\right) = \sum_{k=1}^{3}(k+k) = 2+4+6 = 12. \tag{S.103}$$

しかし，これはダメ：

$$\begin{aligned} T + T &= \left(\sum_{j=1}^{3} j\right) + \left(\sum_{k=1}^{3} k\right) \\ &= (\text{誤}) \sum_{j=1}^{3}\sum_{k=1}^{3}(j+k) \\ &= (1+1)+(1+2)+(1+3)+(2+1)+(2+2)+\cdots+(3+3) \\ &= 36. \end{aligned} \tag{S.104}$$

さらに

$$T = \sum_{k=1}^{3} k, \qquad V = \sum_{k=1}^{10} k^2 \tag{S.105}$$

について，$TV$ や $T+V$ や $T/V$ の「よい書き方」,「やってよい式変形」を考えてみてほしい．

複素数を扱う式の中でアルファベットの $i$ を添字として使うときは，虚数単位の $i = \sqrt{-1}$ と紛らわしくないように使ってほしい．例えば，数列 $a_1, a_2, a_3, \cdots$ を

$$a_n = n + in \tag{S.106}$$

で定めれば，もちろん $a_1 = 1+i$, $a_2 = 2+2i$, $a_3 = 3+3i$ であるが，添字を $i$ に替えて (S.106) を

$$a_i = i + ii \tag{S.107}$$

と書いてしまったら，何のつもりかわからなくなってしまう．なので，虚数単位をローマン体の i と書く流儀もあるし，$\sqrt{-1}$ のままにするという流儀もある．電気回路についての本では虚数単位を j と書く流儀もある．正準交換関係を

$$[\hat{Q}_i, \hat{P}_j] \;=\; i\hbar\delta_{ij} \tag{S.108}$$

と書いているのをしばしば見かける．もちろん $i\hbar$ の $i$ は $i=\sqrt{-1}$ であり，$\delta_{ij}$ の $i$ は $i=1,2,\cdots,n$ などの番号である．わかっている人は $i$ の使分けを間違えることはないにしても，(S.108) はよろしくない表記である．うるさい注意ではあるが，正準交換関係は

$$[\hat{Q}_j, \hat{P}_k] = i\hbar\delta_{jk} \tag{S.109}$$

のように $i$ がダブルミーニングになるのを避けて書く方がよい．なお，正準交換関係の右辺は厳密には $i\hbar\delta_{jk}\hat{I}$ のように恒等演算子 $\hat{I}$ を書くべきであるが，$\hat{I}$ はしばしば省略される．

ここまで来るともはや余談であるが，虚数単位 $i=\sqrt{-1}$ をローマン体の $\mathrm{i}$ と書くように指数関数 $\exp x = e^x$ を $\mathrm{e}^x$，微積分の $dx$ を $\mathrm{d}x$ と書くことが日本工業規格 JIS で推奨されている．関数 $\sin$ や $\log$ をイタリック体で $sin$ や $log$ と書かずにローマン体で書くのと同じ理屈で，指数関数もローマンの $\mathrm{e}$ を書くべきだというのである．私自身は，前後関係や使われ方を見れば指数関数の $e$ と変数の $e$，微積分の $d$ と変数の $d$ を間違えることはないと思うので（(S.108) の虚数の $i$ と添字の $i$ を混同する人はいないだろう），そこまで記法に神経質になる必要はない気がしている．

## 10　計算する前にじっくり考えろ

ダミーインデックスも，和の可換律も，和の結合律も，和積の分配律も，ブラ・ケット積の結合律も，とくに難しいところはなく，意識もされずに使われていることが多い．計算というものはルールさえ守っていればほとんど思考しなくてよい作業である．意味を考えなくても当てはめて使えばよいように整えてあるのが「よい計算規則だ」とさえ言える．だからこそ計算は機械でもできる．しかし，人間は，自分がやっていることの意味をまるっきり考えずに，適当に計算式を書き並べて「何か式変形すりゃいいんだろ」という勢いで「それっぽい計算」をしているつもりになると，勝手な式変形・やってはいけない謎ルールの計算をやってしまい，見当違いの，でたらめな式を書いていることがある．たまにでよいので，自分はどんな規則を知っていて，どんな規則を使っているのか，自分がやっている計算はどうやって正当化されるのか，反省してみてほしい．

もっと言うと，勉強にしても，試験にしても，研究にしても，問題を見た途端にいきなり手を動かして何か計算しようとはせず，しばらくは腕を組んで何度も問題文を読み直して，何を答えればよいのか，どういう道筋をたどれば答えにたどり着きそうか，どういう手順を詰めるべきか，それは正当な方法か，といったことを，書くのはメモをとる程度にとどめて，頭の中でじっくりと思い描いてほしい．そして，一通りの手順を構想してから必要な計算を書くように心がけてほしい．

このやり方に慣れて，四六時中，数学の問題を考えられるようになると，頭の中だけで論理の組み立てができるようになり，ついには，歩きながらででも，自転車に乗りながらででも（危ない），風呂に入りながらででも，頭の中で数式を思い浮かべてだいたいの計算までできるようになり，完全な正解にたどりつくのは難しくても，ほぼ答えの出し方はわかるようになる．あとは紙に式を書いて「うん，思ったとおりの答えになった，ここの係数だけ書いてみないとわからなかった」くらいになる．

そういうことができるようになるのは私だけでない．永田雅宜（ながた まさよし）という数学者は，中学生だった頃，数学の問題を紙切れに書き取って，時間のあるときにたまに見て，頭の中だけで解き方を考える練習をしていたら，何も書かずに解けるようになったという旨の記事を書いていた [3, 4]．それを読んで私は「そこまでできる自信はないが，その心境はわかる」と思った．

一方で，入試の監督などをしていると，とくに数学の問題では受験生たちが問題用紙を開いた途端に一斉に突進するように何かを書き始める光景を目にするが，あれは数学の問題の解き方として非常によくないと思う．私と同様の見解を永田氏も書いている [4]．

永田氏は，試験問題を作る側も，受験者がじっくり考える時間があるように出題すべきだと苦言している．「一般に，50〜60 分の試験時間ならば少なくとも 20 分，90〜120 分の試験時間ならば少なくとも 40 分は考える時間を与えるべきであるのに，この頃のセンター入試では，考える時間ゼロ（解き方が分かっている者がまともに計算するだけで試験時間全部が消費されて，解答記入の時間をいれれば，考える時間ゼロでも，試験時間超過）になったりしている」と述べている [4]．センター入試は過去のものだが，50〜60 分の試験時間ならば少なくとも 20 分は解き方を考える時間に費やした方がよいという基準は参考にした方がよいと私も思う．

なお，永田雅宜氏は愛知県大府の出身で，名古屋大学理学部数学科を卒業した人で，ヒルベルトの第 14 問題を解決したことでも有名である．永田氏は，中学 1 年生のときの数学の成績は甲乙丙（こうおつへい）の「乙」で，順位は同学年の生徒全体のまん中くらいだったそうである．中学 2 年のときに数学の先生に「幾何の問題の図だけをメモ用紙に書いてポケットに入れ，暇を見つけたらメモを取り出して見て，どうしたらその問題を解けるか考えよ，解き方がわかったらメモは捨ててよい，わからないが他のことをしなければならないときはメモをポケットに戻せ」という旨のアドバイスを受けて幾何学に関してこの勉強方法を実行したそうである．そのうちに，時間をかけて解き方を考えることが数学全般に関して有効であることに気づいたそうである．

「全員，何も書かずに頭の中だけで計算・証明できるようになれ」とは言わないが，闇雲（やみくも）に数式を書いてこねくり回す前に，何を計算すればよいのかじっくり考えろ，計算しているときも，自分が使っている計算規則は正当化されていたんだっけ？

ということをたまには気にしろ，ということが言いたかったのである．あと，答えが出たら「はい，おしまい．答え出したよ，採点してね．ちょっとでも合っているところがあったら部分点くれるんでしょうね」という構えではなく，答えに至る推論を見直したり，自分が出した答えの意味を吟味したりしろ．

## 11　数学を通して何を学べばよいのか

いままでいろいろなことを述べたが，まだ言い足りない．が，まとめらしいことを書いておこうと思う．

数学を学ぶ，あるいは数学を使う学生への私のアドバイスを言う．

**1) 個物だけでなく個物の集合にも意味や性質がある，関係性で結ばれた個物の集まりは構造をなす，という考えに慣れてほしい．**私の本では強調しなかったが，個々の元がベクトルであるかベクトルでないかは重要なことではなく，元の集まりがあるやり方で関係しあうことによってベクトル空間をなす，ということの方が重要なのだ．例えば $x^2+1$ というのは，それだけを眺める限りは「2 次式だな」ということくらいしか言えないが，$(x^2+1)$ と $(3x+4)$ を足して $(x^2+3x+5)$ を作れるとか，$(x^2+1)$ を 2 倍して $(2x^2+2)$ を作れるとか，和とスカラー倍という演算によって多項式たちが関係付けられることによって多項式の集合がベクトル空間になる，という視点に意味があるのだ．$x^2+1$ だけを見て「これはベクトルか？」と問うことには何の意味もない．

ベクトルは必ずしも「矢印」である必要はない．ベクトルを矢印で描くことが多いのは，矢印と矢印を継ぎ足して「矢印の和」を表現できるし，矢印の向きを変えずに矢印の長さだけを 2 倍，3 倍伸ばすことによって「矢印のスカラー倍」を表現できて，矢印がベクトルのモデルになるからである．平面上の矢印や，空間中の矢印の集合はベクトル空間になるので，ベクトルの算法によって空間中の図形を記述したり分析したり作図問題を計算問題にして解いたりすることができる．例えば 2 つの点を結ぶ線分の 2 等分点は $\frac{1}{2}(\boldsymbol{a}+\boldsymbol{b})$ というベクトルの和とスカラー倍で表される．空間というものを「ただたんに浮かんでいる点の集まり」とみなすのではなく，演算という関係で結ばれた点の集まりとして捉えることにベクトル空間論の意義と有用性がある．

「量子力学では物理系の状態はヒルベルト空間のベクトルで表される」とお題目のように言ってもそれだけではナンセンスであり，ベクトルとベクトルの和や内積ができて，内積の絶対値 2 乗が「この状態からあの状態に移る確率」を与えるという関係と解釈が備わっているから意味をなすのである．

本書では説明しきれなかったが，個々のベクトルよりも部分ベクトル空間というベクトルの集まりの方が意味があるし，個々の演算子の個々の固有ベクトルよりも

固有ベクトル空間の方に意味がある．さらに，固有ベクトル空間への射影演算子の集まりの方に意味がある，というのがスペクトル分解の話だったのである．

ベクトル空間の基底とかCONSという概念があるが，あれも一つのベクトルに注目して「$|\chi\rangle$ は基底ですか?」と問うことは意味をなさない．基底というのは $\{|\chi_1\rangle, |\chi_2\rangle, \cdots, |\chi_n\rangle\}$ というベクトルの集まりがベクトル空間の中で醸（かも）し出す性質のことを言っているのである．例えば $\{x^2, x, 1\}$ は2次以下の多項式全体がなすベクトル空間の基底であるが，3次以下の多項式全体がなすベクトル空間の基底ではない．$\{x^2, x, 1\}$ だけ，あるいは $x$ だけを見せて「基底ですか？」と問うことに意味はない．

我々が出会う，あるいは，思考の対象とする，ものごとの集まりは，烏合の衆ではなく，何らかの関係性を持っているものたちの集まりであることが多い．元たちの関係性は集合に構造を編み込むのである．この構造こそ注目すべきことであり，数学を学ぶというのは，世界にしばしば見られる構造を一般化・抽象化した形で見通すことができるようになるということなのだ．

**2) 記号を正しく使いこなしてほしい．** これはこのノートのダミーインデックスのあたりで例示したことである．記号というものは，その意味を考えなくても，規則さえ守って扱えば正しい推論ができるという便利なものである．しかし，規則というものは意外に頭に入りにくく，人間は油断すると規則違反の計算をやったり，ダブルミーニングな式を書いたりしてしまうものである．つねに規則を意識していると計算がはかどらないので，ある程度は無意識的・自動的にやってしまった方がよいのだが，自分の思考過程や記法をチェックすることは大切である．

そのための具体的アドバイスとしては，数式を書くときは，大きめの，濃い，丁寧な字で書いた方がよい．私は，計算は紙にボールペンで書くか，コンピュータの画面に書くかのどちらかである．それも，急いで途中を暗算で済ませたりせず，ほとんど全部の計算過程を，ゆっくりと，丁寧に書くのがよい．途中の計算や論証の文章を書かずに進めると，単純な計算ミスや重大なルール違反や勘違いもしやすいし，自分の間違いを見つけにくく，結局，余計に時間がかかる．

ついでに言うと，記述式の解答やレポートを書くときは，人間が読むことを前提として，まともに読める字で，意味・意図の伝わる文章を書くべきである．試験の答案は，なぐり書きのメモであってはならない．答案もレポートも手紙を書くつもりで書くべきである．なぜなら答案を読んで採点する人は「この字は何て書いたつもりなの？この文で何を言いたいつもりだったの？」と解答者に尋ねることができず，書かれたものだけを手掛かりにして解答者の思考を追跡しなければならないからである．

そういったことを私は以前にエッセイとして書いた [5]．学生がレポートに書いた学生番号・氏名を機械で自動読み込みしようとしたが学生の手書きの字が薄すぎたり乱れすぎたりしていてコンピュータが判読できなくて，結局，人の目で見て手で

入力しなくてはいけなくて大変だった，という話も書いた．

とりわけ，最低限，書類に自分の名前を書くときは，丁寧に，筆圧のある字で書くべきである．出席座席表に「これ，何て書いてあるんだろう？」と思わせるような字で自分の氏名を書いていては，自分が誰であるか伝えたくないらしい，と受け止められてもしようがないだろう．アイデンティティを確認しようとしている場面で人間も機械も読めないような字を書くのはシュールでありナンセンスである．

文字というのは人類の最高の発明の一つだと思う．文字による書き言葉があるおかげで，遠い国や昔の人が考えたことや経験したことを他人が知ることができる．さらに，記号で書かれた数式は絶大な正確さをもって他人に伝達できる．しかも文字・記号は，記録方法であるだけでなく，書くこと自体が思考の一形態であるという思考の道具でもある．記号を操作し変換し入出力することそのものが人間の思考だとも言える．文字・記号からなる書き言葉を使うことによって知識を生み出し伝達し蓄積できるようになり，よい知識を取捨選択・洗練して使うことによって人類の文明が成り立っている，昔はわからなかったこと・できなかったことが理解・実現できるようになってきている．だから文字や記号は素晴らしい発明なのだ．だから，文字・文章を見やすく丁寧に書け，ごまかさずに数式を書け，と私は学生諸君に口を酸っぱくして言っているのです．

**3) 計算する前に筋道を考えてほしい，というか，筋道こそ考えるべきことなのだと知ってほしい．筋道を考え，正確に表現し，伝える，**これこそ数学の学習を通して最も学ぶべきこと・できるようになるべきことだと思う．

以上，数学を学習する上での最重要ポイントを述べたつもりである．物理学の学習に限定すれば，またさらに別のポイントを付け加えたいが，以上に述べたことは，おそらく数物系・理系に限らず，人間による学習において普遍的に重要なことがらだと思うので，明示しておいた．教育課程というものは，こういったことを明示的に指図しなくても個々の分野の学習過程を通して生徒・学生たちが自然に身に着けられるようにできているべきだと思う．そういったことが身に着けられている人には以上の話はまったく余計なことであった．

余談のついでにデカルトの言葉を紹介しておこう．以下は 1637 年に発行された『方法序説』の訳文 [6] からの抜粋である：

《数学には，探求心の旺盛な者を満足させるにじゅうぶん足るだけの洗練された発見がたくさんあって，しかもそれは人のあらゆる技芸を進歩させ，人々の労働を減らせるものだ.》

《いろいろな科学でこれまで真理を求めてた人たちのうち，証明（つまり確実で明らかな理性の力）を見つけることができたのは数学者たちだけだったということから考えて，それがかれらの探求の規則であったことも疑問の余地はなかった.》

《数学の各分野が扱う対象がどんなにちがっていても，数学はすべて，そうした

対象同士の関係や，構成比率だけを考えるという点で共通しているので，こうした構成についていちばん一般的な形で考えてやるのが，自分の目的からもいいだろうと考えたわけだ．そして個別の対象自体について考えるのは避けるようにした（ただしその対象の理解に役立つ場合は除く）．そしてその対象のみに考察を限定しないようにして，あとからそこで得た関係性の知識を，まともに適用できる他の対象のクラスすべてに応用できるようにしようと考えた.》

## 12　陽子や中性子は素粒子か

p.2 に「電子・陽子・中性子などをひっくるめて素粒子 (elementary particle) という」という文があるが，現代物理学では，陽子や中性子はクォーク (quark) と呼ばれる複数の基本粒子で構成されているという描像が成り立つことがよく知られている.「複数の構成要素からできているとは言えないもの」,「内部構造を持たないもの」のみを素粒子と呼ぶのであれば，陽子や中性子を素粒子と呼ぶのは適切ではない.

ただ,「これよりも小さな構成要素に分割あるいは還元することができない」という条件は，絶対的な条件にはなりえず,「これまでに行われてきた実験手段では分割できなかった，あるいは，いままでに成功してきた理論の範囲ではこれよりも小さな要素を考える必要がなかった」という経験的・一時的な事項にすぎない．素粒子という概念を経験・観察に基づいて設定する限り，いまは素粒子と思われていたものが将来には素粒子とは呼べなくなる可能性がつねに残る.

実際，陽子や中性子は，かつては素粒子だと思われていたが,「陽子や中性子には中身がある，ゼロでない大きさもある」ということがわかって,「素粒子」から「複合粒子（ハドロン・バリオン)」に格下げされたのである．しかし,「クォークの閉じ込め」という現象があり，陽子や中性子を分解して一つ一つのクォークを取り出すことはできないことが経験的に知られている．なので,「陽子や中性子には内部構造がある」とは言えるが,「陽子や中性子はクォークに分解できる」とは言いがたい.

なお，電子については，今日に至るまで電子の内部構造らしきものは見つかっていないし，電子の内部構造を考えてうまくいっている理論もないので（むしろ量子論ができる前は，アブラハムの電子論など電子の内部構造を扱う理論があったが，量子論ができた以降はそういう理論は無用になってしまった)，いまのところ電子を素粒子と呼ぶのは問題なさそうである.

経験的分類と命名はいつか例外が見つかるかもしれないという宿命を背負っており，この点はしかたないと考えるべきだろう．例えば，かつて冥王星は惑星の一つに数えられていたが,「惑星」の定義が変更されて，冥王星は「準惑星」に格下げされた．また,「原子」の語源は「分割できないもの」を意味する「atom」であったが,原子をイオン化（原子から 1, 2 個の電子を剥ぎ取ることが）できるとか，プラズマ

化（原子核と電子を離れ離れの状態にすることが）できることがわかってしまった．さらには，原子核同士が融合したり原子核が分裂したりすることもわかった．現代においては,「分割不可能なもの」という原子の素朴な定義は不適切であることは明らかだが,「準原子」と呼ぶのも変なので,「原子」という言葉を使い続けたいわけだが，そうなら原子の定義内容の方を変更するしかない．自然科学が経験科学である限り，この種の「仮の定義」は必要だし,「概念更新」が必要な事態が起こることは覚悟しなければならないだろう．

哲学者のオットー・ノイラートは，知識の総体というのは港の見えない海上に浮かぶ船のようなものだと喩(たと)えたらしい [7]．自分たちが今乗っている船の出来の悪い部分に気づいたり，故障箇所を見つけても，船を丸ごと一から作り直すことはできず，不備を補い故障を修理しつつやって行くよりほかはない．知識の体系も航海中の船に似たようなものであり，当初は正しいと思ってやっていたことに不備や欠陥が見つかったからといって，全部を捨てて一からやり直すわけにはいかず，修復し取り繕いながらやっていくしかない，というのが「ノイラートの船」と呼ばれる格言だそうだ．

私は，科学や文明といった人間の営み（生物の営み）そのものが「ノイラートの船」であると言ってよいように思う [8]．初めからだめであることが一目瞭然であるような方針を採るのではなく，ある程度合理的で，成功実績のある方針なら，修正・見直しを覚悟しながら慎重に続行すればよい.「なぜその方針でよいのかがわからない，納得がいかない」という懐疑論はいつでも言うことができるし，メタレベルの説明らしきことを言う人もいる．しかし，私はその種の懐疑論は聞き飽きたし，メタ的な説明と称するものも，一面的にすぎず，的外れに終わっているように見受けられる．

そうしてみると，これ以上分割できない atom と呼ばれた原子も，世界の基本要素のように elementary particle と呼ばれた素粒子も，一時しのぎの「やってみて，行き詰まったら考え直す」程度の概念だったかもしれないし，それで悪いことはないような気がする．むしろ初めから絶対的な真理を言い当てようとする方が思い上がっているような気もする．何ごとも信用しない懐疑論者と，疑いようのない真理があるはずだという絶対論者とは，表裏一体であり，どちらの論者も，おおよその近似的真理に対してすら盲目であるように思われる．

こういったことを思いつくままに述べていると，量子力学とは直接関係ない話が長くなるので，本書ではあっさりと電子・陽子・中性子をひっくるめて素粒子と呼んだ．

## 13　演算子の行列式について

p.45 の補足欄に「無限次元のヒルベルト空間に対しては，演算子の行列式が定義できないし，無限次数の代数的方程式も解けない」と書いたことについて．

この箇所は「無限次元のヒルベルト空間上では，任意の演算子の行列式を定義することは難しく，定義不可能な場合もあり，行列式を用いて特性多項式を書いたとしても無限次になってしまい，これを用いて固有値問題を解くのは困難である」と直したい．

素朴には，演算子の行列式は，ベクトル空間の基底がなす立方体の体積と，それらを演算子で移したあとの像の立体の体積との比で定義される．外積を用いて書けば，$n$ 次元ベクトル空間 $V$ の基底を $\boldsymbol{e}_1, \boldsymbol{e}_2, \cdots, \boldsymbol{e}_n$ とするとき，演算子（線形写像）$A : V \to V$ の行列式 $\det A$ は

$$\det A \cdot \boldsymbol{e}_1 \wedge \boldsymbol{e}_2 \wedge \cdots \wedge \boldsymbol{e}_n = A\boldsymbol{e}_1 \wedge A\boldsymbol{e}_2 \wedge \cdots \wedge A\boldsymbol{e}_n \tag{S.110}$$

で定められる．これを形式的に

$$\det A = \frac{A\boldsymbol{e}_1 \wedge A\boldsymbol{e}_2 \wedge \cdots \wedge A\boldsymbol{e}_n}{\boldsymbol{e}_1 \wedge \boldsymbol{e}_2 \wedge \cdots \wedge \boldsymbol{e}_n} \tag{S.111}$$

と書けることから「ベクトル空間の基底がなす立方体の体積と，それらを演算子で移したあとの像の立体の体積との比」と表現した．演算子が基底のベクトルに作用する式

$$A\boldsymbol{e}_s = \sum_{r=1}^{n} \boldsymbol{e}_r A_{rs} \tag{S.112}$$

によって行列成分（複素数）$A_{rs}$（$r, s = 1, 2, \cdots, n$）を定め，これを入れて行列式の定義式 (S.110) を展開すれば，行列式は $n$ 個の行列成分の積を項として $n!$ 個の項の交代和で書ける．

無限次元空間では，最大次数の外積形式 $\boldsymbol{e}_1 \wedge \boldsymbol{e}_2 \wedge \cdots$ が well-defined ではないので，(S.110) はこのままでは意味をなさない．また，愚直に行列成分を使って表示すれば，行列式は行列成分の無限積の無限和で書かれることになり，収束性を判定したり収束値を求めたりすることは難しい．

無限次元空間上の演算子の行列式が有限値になるケースもあることはある．例えば，恒等演算子の行列式は 1 である．しかし，一般的には無限次元空間上の演算子の行列式を定めることは難しいと言わざるを得ない．

また，有限次元空間上の演算子に対しては，行列式がノンゼロであることが，逆演算子が存在するための必要十分条件であるが，無限次元空間上の演算子に対して

は，形式的に行列式がゼロに収束しても，逆演算子が存在することがある．例えば，$z$ を $|z|<1$ の複素数として

$$A=\begin{pmatrix}1&0&0&0&0\\0&z&0&0&0\\0&0&z^2&0&0\\0&0&0&z^3&0\\0&0&0&0&\ddots\end{pmatrix} \tag{S.113}$$

で定められた対角行列のトレースと行列式は

$$\mathrm{Tr}\,A=\sum_{r=0}^{\infty}z^r=\frac{1}{1-z},\qquad \det A=\prod_{r=0}^{\infty}z^r=0 \tag{S.114}$$

となるが，$z\neq 0$ ならば $A$ の逆演算子

$$A^{-1}=\begin{pmatrix}1&0&0&0&0\\0&z^{-1}&0&0&0\\0&0&z^{-2}&0&0\\0&0&0&z^{-3}&0\\0&0&0&0&\ddots\end{pmatrix} \tag{S.115}$$

は非有界演算子ではあるが，存在する．このように無限次元空間上では「行列式がゼロならば，逆行列は存在しない」とは言えないので,「特性方程式 $\det(\lambda I-A)=0$ を満たすことが，$(\lambda I-A)^{-1}$ が存在しない，すなわち，$\lambda$ が $A$ の固有値であるための必要十分条件だ」とは言えなくなる．本書では，行列式をもっぱら固有値問題を解くための方法として使っているので，無限次元空間上の演算子の行列式を書くことについては慎重にならざるを得なかった．とくに 5 次以上の代数方程式の解の公式は存在しない（アーベル・ガロアの定理）という事実もあり，代数的手法のみで固有値問題を扱う本書では次元の大きい空間上の演算子の行列式を書く動機は薄かった．

こういった事情を鑑みれば，p.45 の補足文「無限次元のヒルベルト空間に対しては，演算子の行列式が定義できない」というのは言い過ぎであり,「無限次元のヒルベルト空間上では，任意の演算子の行列式を定義することは難しく，定義不可能な場合もあり，行列式を用いて特性多項式を書いたとしても無限次になってしまい，これを用いて固有値問題を解くのは困難である」と直すのが適切である．

## 14　波動関数とブラ・ケット

波動関数の概念・記法を 2-7 節，p.25 で導入して，5-2 節, p.70 以降でも多用しているが，波動関数とブラ・ケット記法との関係をあまり説明しなかった．この点に

ついて補足説明しておく．ただ，書き足そうとするとあまりにも長くなるので，本書に修正・追記はしないつもりである．

本によっては，

$$\hat{X}|x\rangle = x|x\rangle \tag{S.116}$$

を満たす位置演算子 $\hat{X}$ の固有ベクトルのような $|x\rangle$ を導入して

$$\psi(x) = \langle x|\psi\rangle \tag{S.117}$$

のように内積を使って波動関数を表記していることがある．しかし，$|x\rangle$ 同士の内積はデルタ関数を使って

$$\langle x|x'\rangle = \delta(x - x') \tag{S.118}$$

と書かざるを得ず，とくに $\||x\rangle\|^2 = \langle x|x\rangle = \delta(0)$ は発散するので，$|x\rangle$ のノルムは定義できない．よって $|x\rangle$ はヒルベルト空間の元ではないことになる．ヒルベルト空間の元ではないのに $\langle x|\psi\rangle$ のような内積もどきの式を書くのは，ごまかしと言えばごまかしである.「ごまかし」では言葉が強すぎるかもしれないが，意味がわかっていて使う分には問題はないが，厳密には数学的正当化を要する記法である．

演算子のスペクトル分解の理論あるいは超関数の理論によってこれらの問題は数学的には解決済みだが，言い出すと話が長くなるので，今回は説明を省いた．つまり，位置の固有状態 $|x\rangle$ のようなものは導入せず，波動関数 $\psi(x)$ そのものを $L^2(\mathbb{R})$ の元として $|\psi\rangle$ と書く記法に徹した．

同様の問題は p.77 (5.46) の “運動量の固有関数”$\chi_p(x)$ についても言えて，(5.49), (5.50) 式のようにノルムが発散していることが見て取れる．$\chi_p(x)$ を “運動量の固有状態と位置の固有状態との内積” $\chi_p(x) = \langle x|p\rangle$ のように書いている本もあるが，これも厳密には数学的正当化を要する記法である．

大事なことは，波動関数の値がブラ・ケットの内積で書けるかということよりも，波動関数を一つのケット $|\psi\rangle$ ないしブラ $\langle\psi|$ と書いて，関数自体を一つのベクトルとみなしてよい，という観点である．

さらにうるさいことを言うと，2 乗可積分な関数全体の集合がヒルベルト空間になるためには,「測度ゼロの部分集合を除いて関数値が一致している 2 つの関数は同一視する」という約束ごとが必要である．これをやっておかないと，内積の正定値性が成り立たないし，関数空間の完備性も成り立たない．

もう一つ言うと，円周上の波動関数に p.70 (5.6) 式の周期境界条件

$$\psi(x + 2am) = \psi(x) \qquad (m = 0, \pm 1, \pm 2, \cdots) \tag{S.119}$$

を要請したが，これに位置演算子 $\hat{X} = x$ を作用させた関数 $x\,\psi(x)$ は

$$(x+2am)\,\psi(x+2am) = (x+2am)\,\psi(x) \;\neq\; x\,\psi(x) \tag{S.120}$$

となって，周期境界条件を満たさない．従って，位置演算子 $\hat{X}$ は，(5.7) 式で定めたヒルベルト空間 $\mathscr{H}_a$ 上の演算子になっていない．円周上の量子力学の正当な扱いについては文献 [9, 10, 11, 12] を参照してほしい．

## 15　可換物理量が同時対角化できること

本書第 6 講では可換物理量と結合確率について議論している．可換物理量演算子の大事な性質として「同時対角化できる」,「（離散スペクトルであれば）同時固有ベクトルの集合でヒルベルト空間の CONS を作ることができる」という性質があるが，このことを第 6 講の中で言及せずに，非可換物理量を主題としている第 7 講 p.98 の (7.57) 式の前後で《可換であれば…同時固有ベクトル $|v\rangle$ が CONS をなすほど十分に数多く存在し》と述べている．非可換物理量の性質との対比をなすためにそこに書いたのだが可換物理量の特徴を第 6 講の中でも明記しておくべきだった．

詳しく述べるとこうである．$\hat{A}$ と $\hat{B}$ が可換な物理量演算子であり，両方とも離散スペクトルを持つならば，それらの同時固有ベクトル（$\hat{A}|v^{(r)}\rangle = a|v^{(r)}\rangle$, $\hat{B}|v^{(r)}\rangle = b|v^{(r)}\rangle$, $|v^{(r)}\rangle \neq 0$ を満たすベクトル $|v^{(r)}\rangle$）の集合で CONS を作ることができて，固有値の出現確率の総和が

$$\sum_{a,b} \mathbb{P}(\hat{A}=a, \hat{B}=b|\psi) \;= \sum_{a,b} \Big( \sum_{r=1}^{k} \Big| \langle v^{(r)}|\psi\rangle \Big|^2 \Big) = \langle\psi|\psi\rangle = 1 \tag{S.121}$$

となるような結合確率 $\mathbb{P}(\hat{A}=a, \hat{B}=b|\psi) \geq 0$ を定めることができる．物理量 $\hat{A}$, $\hat{B}$ の値は確率的にばらつくかもしれないし，相関があるかもしれないが，ともかく $\hat{A}$ と $\hat{B}$ の値をいっぺんに測ることも計算することもできるという意味において，可換な物理量 $\hat{A}$ と $\hat{B}$ の値はいちどきに実在性を持つと言ってよい．

まとめると，2 つの物理量を表す演算子 $\hat{A}$, $\hat{B}$ が可換なら，$\hat{A}$ と $\hat{B}$ の同時固有ベクトルの集合で CONS を作れて，$\hat{A}$ と $\hat{B}$ の値の同時測定に関する非負かつ総和が 1 の結合確率を定められる．この意味で，$\hat{A}$ と $\hat{B}$ の値は同時に実在する．しかし，$\hat{A}$, $\hat{B}$ が非可換なら，$\hat{A}$ と $\hat{B}$ の同時固有ベクトルの集合で CONS を作ることは不可能であり，一般には $\hat{A}$ と $\hat{B}$ の値の同時測定に関する非負かつ総和が 1 の結合確率は存在しない．この意味で，$\hat{A}$ と $\hat{B}$ の値は同時には実在しない．

以上のような可換と非可換の対比を本書でも明示すべきだった．

# 16　干渉効果と経路と密度行列

本書では，干渉効果について繰り返し論じている.「異なる経路に対する確率振幅の和の絶対値 2 乗において干渉効果が生じる」とか「重ね合わせの状態ベクトルにおいて干渉効果が生じる」とかいった説明をすると，量子力学に経路という概念があるのか？とか，純粋状態（ベクトル）では表せない混合状態（密度行列）においては干渉効果は生ずるのか？また，密度行列における干渉効果があるとすればどのように記述されるのか？とかいった疑問を呼び込むことになる.

これらは微妙な問題であるし，理想的な純粋状態よりも混合状態の方が実際的であることを考えると現実的な問題でもある．また，密度行列は重要な概念ではあるが，そもそも本書では密度行列を導入していなかった．密度行列関係の問題については別のところでじっくり議論したいと思う.

当座の答えを書いておくと，量子力学的な粒子に対して「経路」という古典力学的概念を文字通りに適用することは不適切である．しかし，形式的に「経路ごとに分けた確率振幅」を定義することは数学的には問題ないと思う．要するに，量子力学の文脈では,「経路」という言葉を直観に訴えるための言葉の綾（あや）として使っているだけであり，文字通りに「粒子がその道筋を通っている」と言うつもりはないし，そのような描像が正しいと思っているわけでもない．ダブルスリット実験のような設定において経路に分けて波動関数を計算して干渉パターンを求めることは，そんなに難しくないし，実験物理学者たちそういうシミュレーション計算をやっている．また，密度行列で表される混合状態に対しても干渉効果は定義できるし，干渉は演算子の非可換性と絡めて特徴づけられる．また，混合状態における干渉性はデコヒーレンスの問題とも絡んでよく研究されている.

ここで言う「経路」は，何も実 3 次元空間中を移動する粒子が描く軌跡の意味での経路とは限らない．経路と干渉の数学的モデルは以下のように定式化できる．一般のヒルベルト空間 $\mathscr{H}$ に作用する 2 つの射影演算子 $\hat{\Pi}_1, \hat{\Pi}_2$ が $\hat{\Pi}_1\hat{\Pi}_2 = \hat{0}$ と $\hat{\Pi}_2\hat{\Pi}_1 = \hat{0}$ を満たしているとする．$\hat{\Pi}_1 + \hat{\Pi}_2 = \hat{I}$ は要請しない．このとき，$\hat{\Pi}_1 + \hat{\Pi}_2$ も $\hat{I} - \hat{\Pi}_1 - \hat{\Pi}_2$ も射影演算子である．$\hat{\Pi}_1, \hat{\Pi}_2$ をそれぞれ「スリット 1 を通る経路」,「スリット 2 を通る経路」と呼んでもよい．ユニタリ演算子 $\hat{U}_{\mathrm{in}}$ を「スリット通過前の時間発展演算子」，ユニタリ演算子 $\hat{U}_{\mathrm{out}}$ を「スリット通過後の時間発展演算子」と呼ぶことにする．そうすると，スリット 1, 2 の両方が「開いている」ときに初期状態 $|A\rangle$ から終状態 $|X\rangle$ に遷移する確率振幅 $\phi$ は

$$\phi = \langle X|\hat{U}_{\mathrm{out}}(\hat{\Pi}_1 + \hat{\Pi}_2)\hat{U}_{\mathrm{in}}|A\rangle \tag{S.122}$$

で与えられる．現実の実験系がこうなっているというのではなくあくまでモデルと

して書いている.「経路 $i=1,2$ を通る確率振幅」を

$$\phi_i = \langle X|\hat{U}_{\rm out}\hat{\Pi}_i\hat{U}_{\rm in}|A\rangle \tag{S.123}$$

と定めれば，もちろん

$$\phi = \phi_1 + \phi_2 \tag{S.124}$$

が成り立つ.「各径路を通る確率振幅の和で，正しい確率振幅が得られる」というのはこの程度の話である．単純なモデル計算は論文 [13, 14] にも見られる．

また，$\{\,|\chi_1\rangle, |\chi_2\rangle, \cdots\}$ がヒルベルト空間の CONS であれば，任意の内積（確率振幅）は

$$\phi = \langle X|A\rangle = \sum_r \langle X|\chi_r\rangle\,\langle\chi_r|A\rangle = \sum_r \langle X|\hat{\Pi}_r|A\rangle = \sum_r \phi_r \tag{S.125}$$

と書くことができる．これを「各経路 $r$ を通過する確率振幅の和」と解釈して，本書 p.8 の「確率振幅に関する規則 2：重ね合わせの原理」を書いたのである．ファインマン物理学 V 巻も，ファインマンの経路積分も，同様のことをやっている．

# 17　波束の収縮と観測問題

恐ろしく注意深い方からだが，本書の索引に「波束の収縮」は掲載されているのに，どうして「波束」は索引に掲載されていないのか？という指摘を受けた．また，私は本書 p.93 で「波束の収縮」の英語を reduction of wave packet としたが，collapse of wave function あるいは wave function collapse という英語表現もあることを指摘してくれた方もいる．これらの概念・用語について議論しておいた方がよいだろう．

## 17.1　用語としての波束

まず，なぜ「波束」を索引用語として取り上げなかったのかであるが，それは,「波束」という言葉は量子力学の術語として採用するには曖昧すぎると私は判断したからである．あえて定義するとしたら,「空間中の有限体積領域に粒子が見つかる確率が 1 に近い状態」を表す波動関数のことを「波束」（あるいは局在状態）と呼べばよいかもしれないが，この定義もよろしくない．つまり，規格化条件

$$\int_{-\infty}^{\infty} \left|\psi(x,y,z)\right|^2 dx\,dy\,dz \;= 1 \tag{S.126}$$

を満たす波動関数 $\psi$ に対して，$0 \leq p < 1$ を満たす任意の実数 $p$ が与えられたとき，体積が有限であるような領域 $V_p$ で

$$\int_{V_p} \left|\psi(x,y,z)\right|^2 dx\, dy\, dz \ \geq p \tag{S.127}$$

となるような $V_p$ が存在するならば $\psi$ を波束と呼ぶ，と定めるのである．しかし，体積に制限がなく，確率が 1 にどれくらい近いという指定もないのであれば，すべての規格化可能な波動関数は波束である．これでは定義としての用をなさない．

本書 p.104 (7.80) では，位置と運動量の標準偏差の積が最小となる波動関数

$$\psi(x) = C\,\exp\left[\frac{i}{\hbar}\langle\hat{P}\rangle x - \frac{Z}{2\hbar}(x - \langle\hat{X}\rangle)^2\right] \tag{S.128}$$

を導入しており，本書 p.106 (7.97) でも再掲している．これを「極小不確定性波束」と呼ぶことにする．これは数学的に明確に定義されており，本書 p.177 の図 (ii) で（『量子力学 10 講』の表紙の絵でも）示したように関数 $\psi(x)$ の実部（虚部も）のグラフは波打つ形をしており，関数の絶対値 2 乗 $|\psi(x)|^2 = \rho(x)$ はガウス関数になって p.177 の図 (i) に示したようにいかにも確率分布が偏在して見えるので，この波動関数 (S.128) は「波束」と呼ばれるにふさわしいように思える．おそらくたいていの物理学者が「波束」と呼ぶものはこの図 (ii) のイメージだろう．しかし「波束の収縮」というときの波束は，別にこの関数形に限らない．

一般に，関数がゼロでない値をとる点全体の集合の閉包をその関数のサポート（台，support）という．また，有限体積の領域のことを（数学的には雑に）コンパクト（compact）と呼ぶことにする．コンパクトなサポートを持つ波動関数を波束と呼ぶことにすればよいではないかと考えもするが，ガウス関数のサポートはコンパクトではないので，この定義だと極小不確定性波束は波束ではないことになってしまう．

波束という概念は，平面波（運動量演算子の固有関数，本書 p.73 (5.19) や p.77 (5.46)）に対する対義語として捉えられることもあるが，平面波自体は規格化不可能であり，$L^2$ 関数空間の元ではないので,「平面波ではない波動関数」という定義も意味をなさない．

頑張ってこだわって，波動関数の値が遠方でゼロに近づく速さが，距離の負べき関数か，距離の指数関数か，ということによって粒子の局在の強さの指標を定めて，指数関数的にゼロに収束していたら波束と呼ぶ，と規定してもよいかもしれないが，そういうやり方で漏れなくすべての波動関数を分類できるかどうかもわからないし（3 次元空間のある方向に向かっては指数関数的に減衰していて，別の方向にはベキ関数的に減衰している関数も考えられる），そこまでして波束と波束でないものの区別にこだわるメリットも感じられない．

また，一般のヒルベルト空間の元は，必ずしも実空間中に広がる波動のような関数で表示されるわけではない．例えば有限次元のヒルベルト空間の元である

$$|\psi\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ \vdots \\ 0 \\ 1 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix} \tag{S.129}$$

を波束と呼ぼうと提案したとしても，「波束」の語感とイメージが合わない気がするし，ベクトルの成分をどう書こうとそれはCONSの採り方に依存するので「このベクトルは波束であり，あのベクトルは波束ではない」という区別も意味をなさない．しかし，有限次元のヒルベルト空間の元に対しても，観測すれば状態ベクトルは変化することになっており，それもひっくるめて「波束の収縮」と呼ぶのは抵抗を感じる．なので最近は state reduction という言い方をすることが多くなっているのだと思う．

以上のようなさまざまな事情があって「波束」という用語を正当に扱うのは難しいと判断した．結局のところ，「波束」というのはイメージ・気分を表している言葉であり，物理学の理論の中に正式に位置づけるには適さない言葉である．

## 17.2　波束の収縮

波束の収縮に関しては，諸々の解釈と定式化がある．ただ，wave function collapse という言葉は直訳すれば「波動関数の崩壊」であり，かなり破壊的なイメージが伴う．実際，wave function collapse という言葉を真に受けてか，「観測によって波動関数は壊れる」と言ってしまう人もたまにいる．しかし，現代の大多数の物理学者は，物理系を観測したところで状態ベクトルや波動関数がなくなってしまうわけではなく，観測された後ももちろん物理系は存続しているし，観測後の物理系の状態は密度行列などで記述できる形で存続しているのであって，観測によって系の状態が崩壊してなくなってしまうわけではなく制御不能な状態に陥ってしまうわけでもない，と理解しているだろう．また，観測による状態変化は数学的に記述できないわけではなく，CP map や CP instrument などの数学的にまともな概念で記述できている [15, 16, 17]．「観測過程は，シュレーディンガー方程式で記述できない，微分不可能な，不連続な変化であり，量子力学の埒外の現象だ」と思っている（言っている）人もたまにいるが，小澤の定理 [15] は，（かなり広いクラスの）観測過程はシュレーディンガー方程式に相当するユニタリ時間発展演算子で書けることを保証して

いる．従って，たいがいの観測過程は量子力学の枠組み内で数学的に記述できる．こういった数理理論がちゃんと work していることを考慮すると，あたかも量子力学の手に追えないような印象を与える「崩壊 collapse」という激しい言葉づかいは避けた方がよいという結論に至る．

また，上でも述べたが，系の状態は必ずしも実空間上の波動関数だけで記述されるわけではなく，一般には，系の状態は（有限次元かもしれない）ヒルベルト空間のベクトルまたはヒルベルト空間上の密度行列で記述される．つまり，wave function は，さほど普遍的な概念ではない．そういったことを考えると，wave function collapse はあまりよいネーミングではない．wave function を wave packet に言い換えたところで改善にはならず，かえって曖昧になっている．

こういった事情を勘案してか，小澤正直氏は「量子状態収縮 quantum state reduction」という用語を使っている [16, 17]．要するに，「波動関数」ではないし「波束」ではないし「崩壊」でもない，一般的に通用する穏当な表現を選んでいるのだと思う．「量子状態 quantum state」なら波動関数に限らないし，「収縮 reduction」ならヒルベルト空間の部分空間に射影されるとか，ベクトルのノルムが小さくなるとか，密度行列のトレースが小さくなるとか，数学的にまともに捉えられる変化っぽいので，小澤氏は「量子状態収縮 quantum state reduction」という穏当な用語でまとめることにしたのだろう．

私は本書で「波束の収縮 reduction of wave packet」という言葉を導入したが，慣例としてわりと使われている言葉であり，気をつけて使えば理解を助ける（と言うよりも，シンボリックに使われる）言葉なので導入した．波動関数に限定すると有限次元ベクトルを排除しているかの印象を与えてよくないし，量子状態という言葉を本書では一度も使っていないので，「波動関数の収縮」も「量子状態の収縮」も本書では使わないことにした．「射影仮説 projection hypothesis」という用語は本書で導入したが，これも慣例として使われるので紹介した程度である．射影仮説は量子状態収縮の特別な場合に相当しており，せいぜい理想的な場合に成り立つ仮説か，便利な約束事でしかない．

## 17.3 観測問題

ここらで量子力学における**観測問題** (measurement problem) に触れておいた方がよいだろう．観測問題とは，量子力学的な系の観測にまつわる諸問題群であり，「観測問題」と呼ばれる一つの明確な問題があるわけではない．ここで言う観測というのは，量子力学に従うミクロ系が古典力学に従うマクロ系と相互作用して何らかの測定結果を出すことである．観測は量子力学と古典力学という異なる物理法則に従う異質な 2 つの系が接触する場面なので，どういう物理法則にもとづいて観測とい

うものを理解したらよいのかはっきりとせず，それゆえに観測問題という問題が提起される．また，基礎となる物理法則が不明であるがゆえに，観測問題の研究は思弁的・哲学的色彩を帯びることが多い．

いま議論している「波束の収縮」も観測問題の一つである．まず観測者とは何か？が問題になる．人間は観測者と言ってよさそうだが，猫は観測者か？カメラは観測者か？実験している人 A を観測している人 B がいるなら A を観測者と言ってよいのかそれとも A は被観測系だと言うべきなのか？などが問題になる．また，観測はいつ完了するのか？波束の収縮はいつ起きるのか？が問題になる．猫が箱に閉じ込めれていたら，人が箱を開けたときに猫の状態は観測されて猫の波動関数は収縮するのか？それとも猫自身が猫の状態をモニターしていて箱を開けなくても猫の波動関数は収縮するのか？そもそも猫のようなマクロ物体かつ生物であるものが生と死という巨視的に区別のつく状態の重ね合わせ状態になるのか？といった問題が提起される（シュレーディンガーの猫）．また，人が人を観測しているなら，いったいいつ観測は完了して波束の収縮は起きるのか？といった問題も提起される（ウィグナーの友人）．ちょっと考えてみただけでも，これらは「通常の物理学の問題を解くような方法では答えを出せそうにない問題」であることはわかる．頼りにしてよさそうな物理理論が明確でないのでこの問題を数学的にどう扱えばよいのかわからないし，実験観測する側のシステムそのものの定義や役割を疑う問題になっているので，実験によって答えを確かめる方法も思いつきにくい．なので，伝統的に多くの物理学者たちはこの種の問題に取り合わないという態度をとっている，あるいは，とっていた，と言うべきかもしれない．

波束の収縮に関しては，言葉とイメージが悪いと私は思う．Wave packet collapse も wave function collapse も，かなりビビッドなイメージを伴う言葉であり，逆に，波動関数のありようについてビビッドなイメージを抱いた人が言い出した言葉だろうと思われる．「雲や霧のようにふわーっと空中に広がり漂っていた波束が，観測された途端に急激に（超光速で）一点に縮まる」というイメージである．このイメージが強烈であるがために，「量子力学は非局所的な理論だ」,「波束の収縮は相対論を破っている」,「観測過程はシュレーディンガー方程式のような微分方程式で記述できない（できるはずがない）」といった印象を醸し出すし,「シュレーディンガーの猫」や「ウィグナーの友人」のようなパラドクスを言い立てて観測問題を盛り上げたくなる気運を生むし，一方で，とりつくしまのない観測問題に対して嫌悪感を抱いて忌避する人もいるし，他方で「思い切った仮説を立てないと波束の収縮の問題は解決できない」と考えて多世界解釈のような思い切った仮説に飛びつく人もいる．

しかし，落ち着いて考えれば，少なくとも，観測による量子状態の変化は数学的にまともな理論で記述できるし，しかもその理論は量子力学の枠組み内にモデルを持つことが，近年，わかってきているのである．観測問題をことさらに謎めかす必

要もないし，タブー視する必要もないということは言っておきたい．

「観測」という言葉がいかにも人為の関わりを想起させることが疑似問題を招いており，この点がよろしくない．観測者の認識様式が事象を規定していると考える観測者主義が行き過ぎると，人が認識しなければ物理現象は起きていないかのような「過剰な認識論」に陥る．観測者の関わりが波動関数を変化させると信じ込むと，「シュレーディンガーの猫」や「ウィグナーの友人」が本当にありそうな問題に見えてくる．観測者主義の極に QBism（Quantum Bayesianism，量子ベイズ主義）が位置する．QBism とは，状態ベクトルは観測者の心理状態・信念の状態を表しており，観測者が観測結果を知って信念の持ちようを変化させることが波束の収縮だ，という考え方である．しかし，そう信じるなら，人類が不在の太古の昔や無人の地や他の天体での量子的現象は確定しないことになってしまう．

もう一つ，波動関数や状態ベクトルを観測者とは独立な雲や霧のような客観的実在物であるかのように思い描くことも，疑似問題の元凶である．状態ベクトルの実在性を徹底すると，アインシュタイン・ポドルスキー・ローゼン（EPR）のパラドクスがいかにも難問のように見えてきてしまう．波動関数の実在主義の極に多世界解釈が位置する．これは波動関数が指し示す確率の分だけ本当に世界があるという考え方であり，可能性のあることは本当にあると主張する「過剰な存在論」である．

いわゆる観測問題はほとんどの場合，これらの，過剰な特権を持つ観測者概念と過剰な実在性を持たされた状態概念とのフリクション（摩擦，軋轢（あつれき））であり，疑似問題だと私は思う．「意思や信念を持った観測者が介在してこその観測だ」という思い込みと，「観測者の介入とは無関係に同一不変の客観的実在があるべきであり，波動関数もそのような客観的実在だ」という思い込みとが衝突しているのがたいがいの観測問題だ，と言えばわかってもらえるだろうか．正しいと思い込まれた仮定が多すぎれば矛盾が生じやすくなるのは当たり前である．

「波束の収縮」が異常な現象だと思えるか，それとも，まともに扱える現象に思えるかというのは，ある意味，「慣れ」の問題にすぎないのかもしれない．「波束の収縮」が言い立てられる以前には「量子飛躍 quantum jump」という言葉があった．原子が飛び飛びのエネルギー準位を持っていて，エネルギーの高い準位にあった原子が一定周波数の光を出してエネルギーの低い準位に飛び移るようなことを量子飛躍という．1925 年から 1935 年くらいにかけては，量子飛躍などという不連続な突然の変化が現実の出来事なのか？というのが大問題だったのである．しかし，いまとなっては，離散的エネルギー準位は量子力学の特徴の一つとして認められており，離散的な状態間の遷移を考える限り，量子飛躍を認めざるをえない．いまや，原子の量子飛躍は認められている，というか，原子の量子飛躍を問題視することが忘れられているかのようである．あるいは，「量子飛躍の問題」が，言葉を換えて「波束の収縮の問題」になったのかもしれない．

数学の歴史を見ると，かつては，自然数や分数の存在は認められていたが，負の数や無理数や虚数や複素数の存在はなかなか受け入れられなかったらしい．が，結局，これら数学概念は，存在を認めるとか認めないとか言われるような対象ではなく，約束事と使い道と慣れの問題だったのである．とくに数直線と複素平面というビジュアル化ができてしまえば無理数も複素数も絵に描けるものになり，存在するのか虚構なのかと言い争うほどのものではなくなってしまったという影響は大きいと思われる．

「波束の収縮」概念も定義と使用方法と位置づけが定まれば，あとは慣れの問題なのだろうと思う．ただ，なぜ「波束の収縮」というルールが通用するのか，量子力学と古典力学の間でいかにして波束の収縮は根拠づけられるのかという基礎づけ問題は，問う価値のある問題として残ると思う．

とくに近年，量子暗号・量子通信や量子計算機の研究が進み，実装に向けて現実味を帯びてきている．最近は量子系の状態を読み取ることは現実に頻繁に行われているし，測定の過程・結果を記述する量子測定理論も研究者にとっては常識になってきている．こういった状況もあって，観測問題は，近年あまり問題視されなくなってきており，むしろ研究方法の一部になってきているとも言える．

それでも私は，観測にまつわる問題が完全に解消したとは思っていない．観測者という人為的・人間中心的観念を退け，状態ベクトルなどに過剰な実在性を持たせることなく，「観測装置と物理系に関する観測問題」に限定して整理すれば，物理学的・数理的に扱えて，しかも得るところのある問題になると私は考えている．観測過程が起きて量子系の終状態が確定するためには，観測者は意思や信念を持った人間である必要はなく，古典力学的マクロ系であるところの観測装置があって量子系と相互作用していれば十分だと私は思っている（そうでないと困ると思っている）が，古典力学系がいかにして量子力学的世界に立ち現れてくるのか，また，古典力学系がいかにして量子系に対する観測系・制御系として機能するようになったのか，という点は数理的に基礎づけられていない問題だと思っている．これらの問題に関する私の理解・態度はあちこち [18, 19, 20, 21, 22, 23, 24] に書いているので，関心のある方は読んでいただきたい．

似たような論点を繰り返して長々と書いてしまったが，以上の議論をまとめよう．「波束の収縮」という言葉は危険なワードであり，それについて不用意に語り出すと定義が曖昧な言葉を乱発しがちで，誤ったイメージを与えやすいし，あたかも大問題がそこにあるかのような印象を与えてしまいがちであるし，冷静に問題の全容を説明するのは骨が折れることだが，観測は量子系と古典系の重要な接点でもあるので完全に無視して通り過ぎることもできなかったので，『量子力学 10 講』の中ではいちおう言及した程度のワードなのである．初学者は，波束の収縮や射影仮説は，まずは「不思議だけど，知っておくべき約束事」くらいの位置づけで覚えてくれれば

よい．初学者でない人は，時間をかけて文献を批判的に読み，さらにじっくり考えて，悩むに値する観測問題を考えてほしい．

# 18　ノルムと非有界演算子

本書の p.26 の補足欄に示した練習問題には略解を付けていなかった．読者自ら関数のグラフを描いたりノルムを計算したりしてそれらの意味を吟味してもらいたかった，この問題を自分の大学の学生たちの演習課題として使いたかった，解答付きにしてしまうと宿題として使えなくなる，などの思惑（おもわく）があって略解なしにしておいたのだが，やはり模範解答を示して吟味のやり方まで見せておいた方が教育的であろうと考え直し，解答を示すことにする．

## 18.1　ノルムの計算（『量子力学 10 講』p.26 の練習問題の解答）

本書 p.26 (2.55), (2.56), (2.57) 式に示した練習問題はこんなふうであった．$\alpha$ を実数として，以下の関数のグラフを描いて，ノルム 2 乗 $\||\psi\rangle\|^2 = \int_{-\infty}^{\infty} |\psi(x)|^2 dx$ を計算し，ノルムが有限値になるような $\alpha$ の範囲を求めよ．ただし，$\alpha$ は実数であるが，正の実数かもしれないし，0 かもしれないし，負かもしれない．問題の関数は

$$\psi_1(x) = e^{\alpha|x|} = \begin{cases} e^{\alpha x} & (x \geq 0) \\ e^{-\alpha x} & (x < 0) \end{cases} \tag{S.130}$$

$$\psi_2(x) = \begin{cases} 1 & (-1 \leq x \leq 1) \\ \frac{1}{|x|^{\alpha/2}} & (x \leq -1 \text{ または } x \geq 1) \end{cases} \tag{S.131}$$

$$\psi_3(x) = \begin{cases} \frac{1}{|x|^{\alpha/2}} & (-1 \leq x < 0 \text{ または } 0 < x \leq 1) \\ 0 & (x < -1 \text{ または } x = 0 \text{ または } x > 1) \end{cases} \tag{S.132}$$

である．

関数 $\psi_j(x)$ のグラフを描けという問題だが，ノルムを求めることを考えると関数値の絶対値 2 乗 $|\psi_j(x)|^2$ のグラフを描く方がよい（図 1）．$|\psi_1(x)|^2$ と $|\psi_2(x)|^2$ のノルムが有限になるためには，$x \to \pm\infty$ で関数値がすばやく 0 に近づくことが必要である．$|\psi_3(x)|^2$ のノルムが有限になるためには，$x \to \pm 0$ の近傍で関数値が有限であるか，または，発散するとしても緩やかな（遅い）発散であることが必要である．

ノルムそのものは，まさに計算すればよい．いずれの関数も偶関数（$f(-x) = f(x)$）

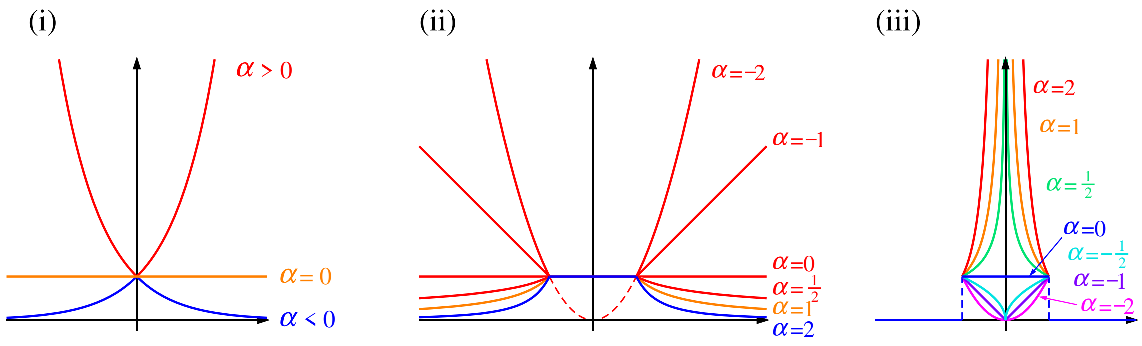


図 1: 波動関数の絶対値 2 乗 $|\psi(x)|^2$ のグラフ．(i) (S.130), $\alpha \geq 0$ でノルムは発散．(ii) (S.131), $\alpha \leq 1$ でノルムは発散．(iii) (S.132), $\alpha \geq 1$ でノルムは発散．

なので，積分は $\int_{-\infty}^{\infty} f(x)dx = 2\int_0^{\infty} f(x)dx$ としてよく，

$$
\begin{aligned}
\| |\psi_1\rangle \|^2 &= \int_{-\infty}^{\infty} |\psi_1(x)|^2 dx = 2\int_0^{\infty} |\psi_1(x)|^2 dx \\
&= 2\int_0^{\infty} |e^{\alpha x}|^2 dx = 2\int_0^{\infty} e^{2\alpha x} dx = 2\left[\frac{1}{2\alpha}e^{2\alpha x}\right]_0^{\infty} \\
&= \frac{1}{\alpha} \times \begin{cases} (\infty - 1) & (\alpha > 0) \\ (1-1) & (\alpha = 0) \\ (0-1) & (\alpha < 0) \end{cases} = \begin{cases} \infty & (\alpha > 0) \\ \text{不定} & (\alpha = 0) \\ \frac{1}{-\alpha} & (\alpha < 0) \end{cases}
\end{aligned}
\tag{S.133}
$$

となる．$\alpha = 0$ の場合は別扱いが必要で

$$
\| |\psi_1\rangle \|^2 = 2\int_0^{\infty} 1\, dx = \infty \tag{S.134}
$$

となる．よって $\alpha < 0$ のときのみノルム $\| |\psi_1\rangle \|$ は有限で，

$$
\| |\psi_1\rangle \| = \frac{1}{\sqrt{-\alpha}} = \frac{1}{\sqrt{|\alpha|}} \tag{S.135}
$$

である．同様に

$$
\begin{aligned}
\| |\psi_2\rangle \|^2 &= \int_{-\infty}^{\infty} |\psi_2(x)|^2 dx = 2\int_0^{\infty} |\psi_2(x)|^2 dx \\
&= 2\int_0^1 1\, dx + 2\int_1^{\infty} \frac{1}{x^{\alpha}} dx = 2 + 2 \times \left[\begin{matrix} \frac{-1}{\alpha-1} \cdot \frac{1}{x^{\alpha-1}} & (\alpha \neq 1) \\ \log x & (\alpha = 1) \end{matrix}\right]_1^{\infty} \\
&= 2 + 2 \times \begin{cases} \frac{-1}{\alpha-1}(0-1) & (\alpha > 1) \\ (\infty - 0) & (\alpha = 1) \\ \frac{-1}{\alpha-1}(\infty - 1) & (\alpha < 1) \end{cases} = 2 + 2 \times \begin{cases} \frac{1}{\alpha-1} & (\alpha > 1) \\ \infty & (\alpha = 1) \\ \infty & (\alpha < 1) \end{cases}
\end{aligned}
\tag{S.136}
$$

よって $\alpha > 1$ のときのみノルム $\| |\psi_2\rangle \|$ は有限で，

$$
\| |\psi_2\rangle \| = \sqrt{2 + \frac{2}{\alpha - 1}} = \sqrt{\frac{2\alpha}{\alpha - 1}} \tag{S.137}
$$

である．同様に

$$
\begin{aligned}
\||\psi_3\rangle\|^2 &= \int_{-\infty}^{\infty} |\psi_3(x)|^2 dx = 2\int_0^{\infty} |\psi_3(x)|^2 dx \\
&= 2\int_0^1 \frac{1}{x^\alpha} dx \\
&= 2\times\left[\begin{array}{ll} \frac{-1}{\alpha-1}\cdot\frac{1}{x^{\alpha-1}} & (\alpha\neq 1) \\ \log x & (\alpha=1) \end{array}\right]_0^1 \\
&= 2\times\begin{cases} \frac{-1}{\alpha-1}(1-\infty) & (\alpha>1) \\ (0-(-\infty)) & (\alpha=1) \\ \frac{-1}{\alpha-1}(1-0) & (\alpha<1) \end{cases} = 2\times\begin{cases} \infty & (\alpha>1) \\ \infty & (\alpha=1) \\ \frac{1}{1-\alpha} & (\alpha<1) \end{cases}
\end{aligned}
\tag{S.138}
$$

よって $\alpha < 1$ のときのみノルム $\||\psi_3\rangle\|$ は有限で，

$$
\||\psi_3\rangle\| = \sqrt{\frac{2}{1-\alpha}} \tag{S.139}
$$

である．

## 18.2 非有界演算子としての微分演算子

本書 p.26 の練習問題の解答としては以上で完了しているのだが，波動関数のノルムの計算に慣れたついでに，微分演算子が作用した後の波動関数のノルムも計算して，非有界演算子の存在を感じてもらおう．

波動関数に作用する微分演算子 $\hat{D}$ を

$$
\hat{D}|\psi\rangle := \frac{\partial\psi}{\partial x} = \psi'(x) \tag{S.140}
$$

で定める．運動量演算子 $\hat{P}$ は微分演算子 $\hat{D}$ と $\hat{P} = -i\hbar\hat{D}$ という関係にある．(S.130), (S.131), (S.132) の各関数を微分した結果を書いておくと

$$
\psi_1'(x) = \begin{cases} \alpha e^{\alpha x} & (x>0) \\ \text{不定} & (x=0) \\ -\alpha e^{-\alpha x} & (x<0) \end{cases} \tag{S.141}
$$

$$
\psi_2'(x) = \begin{cases} 0 & (-1<x<1) \\ \text{不定} & (x=-1 \text{ または } x=1) \\ \frac{\alpha}{2}(-x)^{-\frac{\alpha}{2}-1} & (x<-1) \\ -\frac{\alpha}{2}x^{-\frac{\alpha}{2}-1} & (x>1) \end{cases} \tag{S.142}
$$

$$
\psi_3'(x) = \begin{cases} \frac{\alpha}{2}(-x)^{-\frac{\alpha}{2}-1} & (-1<x<0) \\ -\frac{\alpha}{2}x^{-\frac{\alpha}{2}-1} & (0<x<1) \\ 0 & (x<-1 \text{ または } x>1) \\ \text{不定} & (x=-1 \text{ または } x=0 \text{ または } x=1) \end{cases} \tag{S.143}
$$

となる．導関数 $\psi'$ のノルムを調べてみると面白いことがわかる．元の関数 $\psi(x)$ は偶関数であり，導関数 $\psi'(x)$ は奇関数だが，その絶対値 2 乗 $|\psi'(x)|^2$ は偶関数になるので，積分は $x \geq 0$ の範囲だけ計算すればよい．$\|\hat{D}|\psi_1\rangle\|^2$ は

$$\begin{aligned}\|\hat{D}|\psi_1\rangle\|^2 &= 2\int_0^\infty |\psi_1'(x)|^2 dx \\ &= 2\int_0^\infty \left|\alpha e^{\alpha x}\right|^2 dx = 2\int_0^\infty \alpha^2 e^{2\alpha x} dx = \left[\alpha e^{2\alpha x}\right]_0^\infty \end{aligned} \tag{S.144}$$

となり，これは $\alpha < 0$ のときだけ収束して

$$\|\hat{D}|\psi_1\rangle\|^2 = -\alpha = |\alpha| \qquad \text{よって} \qquad \|\hat{D}|\psi_1\rangle\| = \sqrt{|\alpha|} \tag{S.145}$$

となる．これと (S.135) との比をとると，

$$\frac{\|\hat{D}|\psi_1\rangle\|}{\||\psi_1\rangle\|} = |\alpha| \tag{S.146}$$

となる．指数関数 $e^{\alpha x}$ は微分すれば $\alpha$ 倍になるので，ノルムの比が (S.146) のように $|\alpha|$ 倍になるのは当たり前である．一方，本書 p.38 で，一般に演算子 $\hat{A}$ に対して正の実数定数 $C_{\hat{A}}$ が存在して任意のベクトル $|\psi\rangle \in \mathscr{H}$ について

$$\|\hat{A}|\psi\rangle\| \leq C_{\hat{A}}\||\psi\rangle\| \tag{S.147}$$

が成立するならば，演算子 $\hat{A}$ を**有界演算子**と呼ぶことにした．$\||\psi\rangle\| \neq 0$ ならば (S.147) を

$$\frac{\|\hat{A}|\psi\rangle\|}{\||\psi\rangle\|} \leq C_{\hat{A}} \tag{S.148}$$

と書いてもよい．ところが (S.146) の $|\alpha|$ はいくらでも大きくとることができるので，(S.148) のように抑えになる数 $C$ は (S.146) に対しては存在しない．従って，$\hat{D}$ は**非有界演算子**であることがわかる．

次に $\|\hat{D}|\psi_2\rangle\|$ を計算してみよう．

$$\begin{aligned}\|\hat{D}|\psi_2\rangle\|^2 &= 2\int_0^\infty |\psi_2'(x)|^2 dx \\ &= 2\int_1^\infty \left|\frac{-\alpha}{2}x^{-\frac{\alpha}{2}-1}\right|^2 dx = 2\int_1^\infty \frac{\alpha^2}{4}x^{-\alpha-2}\,dx = \left[\frac{-\alpha^2}{2(\alpha+1)}x^{-\alpha-1}\right]_1^\infty \end{aligned} \tag{S.149}$$

となり，これは，$-\alpha-2=-1$（$\alpha=-1$）のときは対数発散．$-\alpha-1<0$ のとき，すなわち $\alpha > -1$ のときだけ収束して

$$\|\hat{D}|\psi_2\rangle\|^2 = \frac{\alpha^2}{2(\alpha+1)} \qquad \text{よって} \qquad \|\hat{D}|\psi_2\rangle\| = \sqrt{\frac{\alpha^2}{2(\alpha+1)}} \tag{S.150}$$

となる．$\alpha > 1$ のとき，これと (S.137) との比をとることができて，

$$\frac{\|\hat{D}|\psi_2\rangle\|}{\||\psi_2\rangle\|} = \sqrt{\frac{\alpha^2}{2(\alpha+1)}} \cdot \sqrt{\frac{\alpha-1}{2\alpha}} = \sqrt{\frac{\alpha(\alpha-1)}{4(\alpha+1)}} \tag{S.151}$$

となる．これは $\alpha \to \infty$ で発散する．このことは $\hat{D}$ が非有界演算子であることを確かめているにすぎない．

面白いのは $\|\hat{D}|\psi_3\rangle\|$ である．

$$\begin{aligned}\|\hat{D}|\psi_3\rangle\|^2 &= 2\int_0^\infty |\psi_3'(x)|^2 dx \\ &= 2\int_0^1 \left|\frac{-\alpha}{2}x^{-\frac{\alpha}{2}-1}\right|^2 dx = 2\int_0^1 \frac{\alpha^2}{4}x^{-\alpha-2}\,dx = \left[\frac{-\alpha^2}{2(\alpha+1)}x^{-\alpha-1}\right]_0^1\end{aligned} \tag{S.152}$$

となり，これは $-\alpha-1>0$ のとき，すなわち $\alpha < -1$ のときだけ収束して

$$\|\hat{D}|\psi_3\rangle\|^2 = \frac{-\alpha^2}{2(\alpha+1)} \qquad \text{よって} \qquad \|\hat{D}|\psi_3\rangle\| = \sqrt{\frac{\alpha^2}{-2(\alpha+1)}} \tag{S.153}$$

となる．注目すべきはノルムの有限性の条件である．(S.139) のところで見たように，$\alpha < 1$ のときのみ $\||\psi_3\rangle\|$ は有限である．ところが，$\alpha < -1$ のときのみ $\|\hat{D}|\psi_3\rangle\|$ は有限である．ということは，$-1 \le \alpha < 1$ のときは $\||\psi_3\rangle\|$ は有限だが，$\|\hat{D}|\psi_3\rangle\|$ は発散している．言い換えると，$-1 \le \alpha < 1$ に対する $|\psi_3\rangle$ はヒルベルト空間 $L^2(\mathbb{R})$ の元であるが，$\hat{D}|\psi_3\rangle$ はヒルベルト空間 $L^2(\mathbb{R})$ の元ではない．

つまり，形式的に書かれた演算子 $\hat{D}$ がヒルベルト空間 $\mathscr{H}$ 上の線形写像 $\hat{D}: \mathscr{H} \to \mathscr{H}$ として定まっているように見えて，任意の $|\psi\rangle \in \mathscr{H}$ に対して $\hat{D}|\psi\rangle$ が定まっているように見えても，$\hat{D}|\psi\rangle \in \mathscr{H}$ となるとは限らず，$\hat{D}|\psi\rangle \notin \mathscr{H}$ かもしれない．こういう場合は，$\hat{D}$ が作用するベクトルの集合を $\hat{D}|\psi\rangle \in \mathscr{H}$ が成立するように限定した方がよい．こう考えると，$\hat{D}$ が作用してよいベクトルの集合

$$\mathrm{dom}\,\hat{D} := \{\, |\psi\rangle \in \mathscr{H} \mid \hat{D}|\psi\rangle \in \mathscr{H} \,\} \tag{S.154}$$

を定めたくなる．この集合 $\mathrm{dom}\,\hat{D}$ を $\hat{D}$ の**定義域**とか**ドメイン**という（後で，もっと一般的な文脈でドメインの定義を述べる）．$\mathrm{dom}\,\hat{D}$ はもちろん $\mathscr{H}$ の部分集合である．

微分演算子の場合は，ドメインはヒルベルト空間よりも真に小さい部分集合になっていた（$-1 \le \alpha < 1$ に対する $|\psi_3\rangle$ はヒルベルト空間の元だが，$\hat{D}$ のドメインの元ではなかった）．ドメインがあまりにも小さい演算子は，事実上，ほとんどのベクトルに作用できないことになり，演算子として役に立たない．「演算子の作用っぷりが荒すぎて，作用後のベクトルのノルムがすぐに発散してしまう．作用した結果で

きるベクトルのノルムが発散しないようにと作用する相手を慎重に選ぶと，事実上，ほとんど何にも作用できない」という事態が発生するのである．

ノルムが発散するという事象そのものが有限次元空間では決して起きず，無限次元空間でしか起きないことなので，非有界演算子の存在と，ドメインの限定は，無限次元独特の数学的事象である．これが無限次元空間の難しいところである．このことを次節で議論しよう．

# 19　無限次元空間に関して注意すべきこと

## 19.1　無限次元空間の手ごたえ

正準交換関係に従う位置と運動量演算子を持つ粒子が 1 個でもあれば，その状態を表すためのヒルベルト空間は必然的に無限次元になる．また，無限個のスピンからなる量子統計力学のモデルや，場の量子論のモデルも，無限次元のヒルベルト空間を用いる．内積を扱わず和とスカラー倍だけを扱うベクトル空間でも，無限次元になると，さっそく基底の定義が微妙になる．無限次元空間の基底は無限集合になるに決まっているのだが，そうすると無限個のベクトルの線形結合を書きたくなり，無限和を導入すると収束性の吟味が必要になり，収束性の問題は代数演算だけを扱うベクトル空間論の枠組みには収まらず，**位相線形空間**や**距離空間**の枠組みで分析せざるを得なくなる．このことがノルムと内積を備えたヒルベルト空間を導入する理由にもなっている．そういった手ごたえを感じておこう．

$z_1, z_2, \cdots, w_1, w_2, \cdots, \lambda$ を任意の複素数として

$$|z\rangle = \begin{pmatrix} z_1 \\ z_2 \\ z_3 \\ z_4 \\ \vdots \end{pmatrix}, \qquad |w\rangle = \begin{pmatrix} w_1 \\ w_2 \\ w_3 \\ w_4 \\ \vdots \end{pmatrix} \tag{S.155}$$

とおき，

$$|z\rangle + |w\rangle := \begin{pmatrix} z_1 + w_1 \\ z_2 + w_2 \\ z_3 + w_3 \\ z_4 + w_4 \\ \vdots \end{pmatrix}, \qquad \lambda|z\rangle := \begin{pmatrix} \lambda z_1 \\ \lambda z_2 \\ \lambda z_3 \\ \lambda z_4 \\ \vdots \end{pmatrix} \tag{S.156}$$

で和とスカラー倍を定めることは，無限次元であっても問題なくできる．(S.155) のようなベクトル全体の集合を $\mathbb{C}^\infty$ 空間と呼ぶ．$\mathbb{C}^\infty$ 空間は $n$ 次元ベクトル空間 $\mathbb{C}^n$ の

延長であり，有限次元と比べてとくに代わり映えはなさそうな気がするが，基底の概念あたりで調子がおかしくなる．例えば

$$|\varepsilon_1\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ \vdots \end{pmatrix}, \qquad |\varepsilon_2\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \\ \vdots \end{pmatrix}, \qquad |\varepsilon_3\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \\ \vdots \end{pmatrix}, \cdots \tag{S.157}$$

とおいて定まる集合 $\{|\varepsilon_1\rangle, |\varepsilon_2\rangle, |\varepsilon_3\rangle, \cdots\}$ はいかにも $\mathbb{C}^\infty$ の基底になりそうに思える．では任意のベクトル $|\psi\rangle$ に対して

$$|\psi\rangle = \sum_r c_r |\varepsilon_r\rangle \tag{S.158}$$

となるような複素数 $c_r$ があるか？と問うと，例えば

$$|\psi\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \\ 1 \\ \vdots \end{pmatrix} \tag{S.159}$$

は $\mathbb{C}^\infty$ の元ではあるが，これを (S.157) の線形結合で作ろうとしたら

$$|\psi\rangle = |\varepsilon_1\rangle + |\varepsilon_2\rangle + |\varepsilon_3\rangle + \cdots \tag{S.160}$$

という**無限和**が必要になる．しかし，ベクトル空間の条件 (S.156) では 2 個のベクトルの和しか定められておらず，これを有限回繰り返しても，有限個のベクトルの和しか定められない．つまり，ベクトル空間というのは有限回の和で閉じていることが保証されているだけであり，無限和（＝無限級数）ができる保証はない．

線形結合は有限回の和で作られなければならないとしたら，このベクトル $|\psi\rangle$ は $\{|\varepsilon_1\rangle, |\varepsilon_2\rangle, |\varepsilon_3\rangle, \cdots\}$ の線形結合で作れない．ということは，$|\psi\rangle$ は $\{|\varepsilon_1\rangle, |\varepsilon_2\rangle, |\varepsilon_3\rangle, \cdots\}$ に対して一次独立であり，$\{|\varepsilon_1\rangle, |\varepsilon_2\rangle, |\varepsilon_3\rangle, \cdots\}$ は $\mathbb{C}^\infty$ の基底ではない．ベクトル $|\psi\rangle$ を付け加えた集合 $\{|\psi\rangle, |\varepsilon_1\rangle, |\varepsilon_2\rangle, |\varepsilon_3\rangle, \cdots\}$ に対しても一次独立なベクトルを見つけることができる（見つけてみてほしい）．

有限和とスカラー倍だけを使って任意のベクトルを作れるようなベクトルの組を**代数的基底**と呼ぶが，$\mathbb{C}^\infty$ 空間の代数的基底を作るのはかなり難儀である．上で見たとおり，(S.157) の $\{|\varepsilon_1\rangle, |\varepsilon_2\rangle, |\varepsilon_3\rangle, \cdots\}$ は $\mathbb{C}^\infty$ 空間の代数的基底になっていない．ベクトル空間の基底のような基本的な概念からして無限次元空間では容易には定められないのである．

もともとベクトル空間というのは有限回の演算操作のみを想定して作られた集合であり,「無限級数が収束するか？」のような問題を扱うようにはできていない．極限や収束性など**解析的性質**を扱うにはノルムのような**距離概念**が必要なのである．それで無限次元ベクトル空間を扱うときは，素(す)のベクトル空間では道具が足りず，ノルムと完備性を備えた**バナッハ空間** (Banach space) や内積とノルムと完備性を備えたヒルベルト空間が「使える舞台」になる．

(S.155) のベクトル $|z\rangle$ の $\ell^1$ ノルムを

$$\||z\rangle\|_1 := |z_1| + |z_2| + |z_3| + \cdots \tag{S.161}$$

で定め，この右辺の無限級数が収束するようなベクトル $|z\rangle$ 全部の集合を $\ell^1$ 空間という．例えば (S.159) の $|\psi\rangle$ の $\ell^1$ ノルムは $\||\psi\rangle\|_1 = 1+1+1+\cdots = \infty$ となって発散しており，この $|\psi\rangle$ は $\ell^1$ 空間の元ではない．$|z\rangle, |w\rangle$ の $\ell^1$ ノルムが有限なら，$|z\rangle + |w\rangle$ および $\lambda|z\rangle$ の $\ell^1$ ノルムが有限であることが証明できる．この性質のおかげで $\ell^1$ 空間はベクトル空間だと言える．また，ベクトルの差のノルム $\||z\rangle - |w\rangle\|_1$ により $|z\rangle$ と $|w\rangle$ の距離を定めることができて，ベクトル同士の「近さ」や「限りなく近づく」，「極限」という概念を述べることができるようになる．一つの複素数 $z$ を比とする等比数列を成分とするベクトル

$$|\chi_z\rangle := \begin{pmatrix} 1 \\ z \\ z^2 \\ z^3 \\ \vdots \end{pmatrix} \tag{S.162}$$

を定めると，これの $\ell^1$ ノルムは

$$\||\chi_z\rangle\|_1 = 1 + |z| + |z^2| + |z^3| + \cdots = \frac{1}{1-|z|} \tag{S.163}$$

となって $|z| < 1$ のときだけ収束する．従って，$|z| < 1$ の $|\chi_z\rangle$ は $\ell^1$ 空間の元である．$|z| \geq 1$ では $|\chi_z\rangle$ は $\ell^1$ 空間の元ではない．$|z| < 1$ の場合，$n$ 個の項の和で

$$|\chi_z^{(n)}\rangle := \sum_{r=1}^{n} z^{r-1}|\varepsilon_r\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ z \\ z^2 \\ \vdots \\ z^{n-2} \\ z^{n-1} \\ 0 \\ \vdots \end{pmatrix} \tag{S.164}$$

を定めると，

$$\Big\| |\chi_z\rangle - |\chi_z^{(n)}\rangle \Big\|_1 = \sum_{r=n}^{\infty} |z^r| = \frac{|z|^n}{1-|z|} \tag{S.165}$$

となる．$|z|<1$ なら $n\to\infty$ の極限で $\||\chi_z\rangle - |\chi_z^{(n)}\rangle\|_1 \to 0$ となり，ベクトルの列 $|\chi_z^{(1)}\rangle, |\chi_z^{(2)}\rangle, |\chi_z^{(3)}\rangle, \cdots$ は $|\chi_z\rangle$ に収束する．この意味で

$$|\chi_z\rangle = \lim_{n\to\infty} |\chi_z^{(n)}\rangle = \lim_{n\to\infty} \sum_{r=1}^{n} z^{r-1}|\varepsilon_r\rangle = \sum_{r=1}^{\infty} z^{r-1}|\varepsilon_r\rangle \tag{S.166}$$

と書いてよい．ノルムを使って収束性が評価できたおかげで無限和が意味を持つようになった．

ベクトル空間に導入できるノルムは一通りではない．(S.155) のベクトル $|z\rangle$ に対して $\ell^2$ ノルムと呼ばれる

$$\||z\rangle\|_2 := \sqrt{|z_1|^2 + |z_2|^2 + |z_3|^2 + \cdots} \tag{S.167}$$

を定めることもできる．この右辺の無限級数が収束するようなベクトル $|z\rangle$ 全部の集合を $\ell^2$ 空間という．$|z\rangle, |w\rangle$ の $\ell^2$ ノルムが有限なら，$|z\rangle + |w\rangle$ および $\lambda|z\rangle$ の $\ell^2$ ノルムも有限であることが証明できる．この性質のおかげで $\ell^2$ 空間はベクトル空間だと言える．また，$|z\rangle, |w\rangle$ の $\ell^2$ ノルムが有限なら，

$$\langle z|w\rangle := \sum_{r=1}^{\infty} z_r^* w_r \tag{S.168}$$

も有限値に収束する．これにより 2 つのベクトルの内積が定義できて，ノルムと内積が

$$\Big( \big\| |z\rangle \big\|_2 \Big)^2 = \langle z|z\rangle = \sum_{r=1}^{\infty} |z_r|^2 \tag{S.169}$$

という関係で結ばれ，しかもこのノルムに関して完備で，$\ell^2$ 空間はヒルベルト空間だ，というのが $\ell^2$ 空間の著しい性質である．

以上で導入した 3 種類のベクトル空間には

$$\ell^1 \subsetneq \ell^2 \subsetneq \mathbb{C}^\infty \tag{S.170}$$

という包含関係がある．ただし不等号付きの包含関係 $\ell^1 \subsetneq \ell^2$ は，$\ell^1$ ノルムが有限なベクトルは必ず $\ell^2$ ノルムも有限であるが，$\ell^2$ ノルムが有限であっても $\ell^1$ ノルムが発散するようなベクトルがあることを意味している．いちおう証明しておこう．複

素数ベクトル

$$|z\rangle = \begin{pmatrix} z_1 \\ z_2 \\ z_3 \\ z_4 \\ \vdots \end{pmatrix} \tag{S.171}$$

の $\ell^1$ ノルムが有限であるとは，無限級数

$$\||z\rangle\|_1 = |z_1| + |z_2| + |z_3| + \cdots \tag{S.172}$$

が収束するということである．これが収束するならば，$|z_n| \geq 1$ となるような項は有限個である（対偶：$|z_n| \geq 1$ となるような項が無限個あったら，(S.172) は発散する）．そうすると，有限個の項を除いて $|z_n| < 1$ であるゆえに，有限個の項を除いて $|z_n|^2 \leq |z_n|$ である．従って，ある正の数 $C$ があって

$$\Big(\||z\rangle\|_2\Big)^2 = |z_1|^2 + |z_2|^2 + |z_3|^2 + \cdots \leq C + |z_1| + |z_2| + |z_3| + \cdots \tag{S.173}$$

は収束する．よって $|z\rangle$ の $\ell^2$ ノルムも有限．以上より $\ell^1 \subset \ell^2$ が言えた．また，

$$z_1 = 1, \quad z_2 = \frac{1}{2}, \quad z_3 = \frac{1}{3}, \cdots, z_n = \frac{1}{n}, \cdots \tag{S.174}$$

と選べば

$$\||z\rangle\|_1 = 1 + \frac{1}{2} + \frac{1}{3} + \cdots = \infty \tag{S.175}$$

$$\Big(\||z\rangle\|_2\Big)^2 = 1 + \frac{1}{2^2} + \frac{1}{3^2} + \cdots = \frac{\pi^2}{6} \tag{S.176}$$

となるので，このベクトルは $\ell^1$ の元ではないが，$\ell^2$ の元になっている．すなわち $\ell^1 \neq \ell^2$．従って，$\ell^1 \subsetneq \ell^2$．

　また，$\ell^2 \subset \mathbb{C}^\infty$ は明らかであり，例えば

$$|\psi\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \\ 1 \\ \vdots \end{pmatrix} \tag{S.177}$$

は $\mathbb{C}^\infty$ の元だが $\ell^2$ の元ではない．ゆえに $\ell^2 \subsetneq \mathbb{C}^\infty$．

## 19.2　写像のドメインとコドメイン

次の節で演算子のドメインの問題を論じたいのだが，用語を明確にするために，一般論の文脈で述べておく．

集合 $X, Y$ と写像 $f : X \to Y$ が与えられたとき，$X$ を $f$ の**定義域**あるいは**始域**あるいは**ドメイン** (domain) という．「定義域」という呼び方が一番よく使われている気はするが,「ドメイン」と呼んだ方が印象が強い気がするので，以下，このノートではそう呼ぶことにする．$X = \mathrm{dom}\, f$ と書く．

$Y$ を $f$ の**終域**あるいは**コドメイン** (codomain) といい，$Y = \mathrm{cod}\, f$ と書く．また，

$$\mathrm{Im}\, f := \{f(x) \,|\, x \in X\} = \{y \in Y \,|\, \exists x \in X,\, f(x) = y\} \tag{S.178}$$

を $f$ の**像** (image) という．$\mathrm{Im}\, f \subset Y$ である．

## 19.3　無限次元空間上の演算子の機微

有限次元ヒルベルト空間上ではどのような線形演算子も有界演算子であり，エルミート演算子は必ず自己共役演算子でもある．一方で，無限次元ヒルベルト空間上には有界ではない演算子が存在するし，自己共役ではないエルミート演算子も存在する．そのような例として，有限区間上の波動関数に固定端条件を課した運動量演算子がよく引き合いに出される．では，無限次元の「行列」で，いかにもエルミート行列のように見えながら，自己共役ではないものはあるだろうか？

こんな行列を考えてみよう：

$$\hat{T} = \begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 & 1 & \cdots \\ 1 & 1 & 1 & 1 & \cdots \\ 1 & 1 & 1 & 1 & \cdots \\ 1 & 1 & 1 & 1 & \cdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix}. \tag{S.179}$$

「$\cdots$」や「$\vdots$」は，行列要素として際限なく 1 が続くことを表している．すべての行列要素が 1 であり，発散しているわけではないのだから，とくにおかしなところはないと思われるかもしれない．ナイーブに考えれば $\hat{T}$ は $\hat{T} : \mathbb{C}^\infty \to \mathbb{C}^\infty$ という線形写像であろう．$z_1, z_2, \cdots$ を任意の複素数として

$$|z\rangle = \begin{pmatrix} z_1 \\ z_2 \\ z_3 \\ z_4 \\ \vdots \end{pmatrix} \tag{S.180}$$

という無限次元ベクトルを定め，これに行列 $\hat{T}$ を作用させると

$$\hat{T}|z\rangle = \begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 & 1 & \cdots \\ 1 & 1 & 1 & 1 & \cdots \\ 1 & 1 & 1 & 1 & \cdots \\ 1 & 1 & 1 & 1 & \cdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix} \begin{pmatrix} z_1 \\ z_2 \\ z_3 \\ z_4 \\ \vdots \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} z_1 + z_2 + z_3 + z_4 + \cdots \\ z_1 + z_2 + z_3 + z_4 + \cdots \\ z_1 + z_2 + z_3 + z_4 + \cdots \\ z_1 + z_2 + z_3 + z_4 + \cdots \\ \vdots \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} S \\ S \\ S \\ S \\ \vdots \end{pmatrix} \tag{S.181}$$

となる．無限級数 $S := z_1 + z_2 + z_3 + z_4 + \cdots$ が収束しなければ，このベクトルは定まらない．従って，どんなベクトルにでも $\hat{T}$ が作用してよいわけではなく，$\hat{T}$ のドメイン $\mathrm{dom}\,\hat{T}$ は制限される．(S.161) で定めた $\ell^1$ ノルム $\||z\rangle\|_1 = |z_1| + |z_2| + |z_3| + \cdots$ が収束すれば $S = z_1 + z_2 + z_3 + \cdots$ も収束するので，$\mathrm{dom}\,\hat{T} = \ell^1$ とするのが順当である．こうしておけば $\hat{T}$ は線形写像 $\hat{T} : \ell^1 \to \mathbb{C}^\infty$ として well-defined である．

しかし，$S \neq 0$ なら (S.181) の結果得られるベクトルは $\ell^1$ ノルムも $\ell^2$ ノルムも発散している．$\hat{T}$ が作用した結果が有限ノルムになるようなベクトルは，$S = 0$ となるベクトルであり，そのようなベクトル全体は集合

$$N := \{\, |z\rangle \in \mathbb{C}^\infty \mid z_1 + z_2 + z_3 + z_4 + \cdots = 0 \,\} \tag{S.182}$$

をなす．ドメインを制限して $\hat{T} : \ell^1 \cap N \to \ell^2$ とすれば，すべて有限ノルムの範囲で扱えるが，このドメイン上では必ず $\hat{T}|z\rangle = 0$ になってしまう．いま見たことは,「演算子 $\hat{T}$ の定義式 (S.179) は，いかにも $\hat{T} \neq 0$ であるように書かれているのに，コドメインがヒルベルト空間 $\ell^2$ に収まるようにドメインを制限すると必ず $\hat{T}|z\rangle = 0$ になる，つまり，このドメインでは $\hat{T} = 0$ だ」ということである．端的に言えば,「定義式 (S.179) は $\hat{T} \neq 0$ であるように書かれているのに，ヒルベルト空間上の演算子としては $\hat{T} = 0$ である」．このことが，後に見るように，$\hat{T}$ のスペクトルの異常な性質を醸（かも）し出す．

$\hat{T}$ の固有値と固有ベクトルを求めてみよう．以下のベクトル

$$\begin{pmatrix} 1 \\ -1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ \vdots \end{pmatrix}, \quad \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ -1 \\ 0 \\ 0 \\ \vdots \end{pmatrix}, \quad \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ -1 \\ 0 \\ \vdots \end{pmatrix}, \quad \begin{pmatrix} 2 \\ -1 \\ -1 \\ 0 \\ 0 \\ \vdots \end{pmatrix} \tag{S.183}$$

はいずれも $\hat{T}$ の固有値 0 に属する固有ベクトルである．どんなベクトルでも $\hat{T}$ が作用すると (S.181) の形になるのだから，固有値ベクトルの定義式 $\hat{T}|z\rangle = \lambda|z\rangle$ を満た

すとしたら，

$$\hat{T}|z\rangle = \begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 & 1 & \cdots \\ 1 & 1 & 1 & 1 & \cdots \\ 1 & 1 & 1 & 1 & \cdots \\ 1 & 1 & 1 & 1 & \cdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix} \begin{pmatrix} z_1 \\ z_2 \\ z_3 \\ z_4 \\ \vdots \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} S \\ S \\ S \\ S \\ \vdots \end{pmatrix} = \lambda \begin{pmatrix} z_1 \\ z_2 \\ z_3 \\ z_4 \\ \vdots \end{pmatrix} \tag{S.184}$$

を満たさなければならない．$\lambda = 0$ だとしたら，$S = z_1 + z_2 + z_3 + z_4 + \cdots = 0$ で固有値 0 の固有ベクトルが得られる．(S.183) はそのような例になっている．

$\lambda \neq 0$ だとしたら，(S.184) は $z_1 = z_2 = z_3 = \cdots = S/\lambda$ を意味する．そうすると $S$ の定義から

$$S = z_1 + z_2 + z_3 + z_4 + \cdots = \frac{S}{\lambda} + \frac{S}{\lambda} + \frac{S}{\lambda} + \frac{S}{\lambda} + \cdots \tag{S.185}$$

となり，これが収束するのは $S = 0$ のときだけである．そうすると $z_1 = z_2 = z_3 = \cdots = S/\lambda = 0$ となり，(S.184) を満たす非自明な固有ベクトルは存在しない．

以上より，**$\hat{T}$ そのものは 0 ではない演算子のように書かれているが，$\hat{T}$ の固有値は 0 のみである**ことがわかった．$\hat{T}$ の固有ベクトルは (S.183) のように $\sum_r z_r = 0$ を満たすベクトル，すなわち (S.182) の $N$ に属する任意のベクトルである．そうすると，例えば

$$|\phi\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ \vdots \end{pmatrix} \tag{S.186}$$

は別に悪いベクトルには見えないが，固有ベクトル (S.183) の線形結合で作ることができない．つまり，**$\hat{T}$ の固有ベクトルの集合でベクトル空間の CONS を作ることができない．**これはいかにも**自己共役演算子が持つべき性質を満たしていない．**

(S.179) の $\hat{T}$ はかなりおかしな演算子らしい，ということはわかってきてもらえたと思う．ついでに無限次元ベクトル (S.180) における $\hat{T}$ の期待値を求めてみよう．$|z\rangle \in \mathbb{C}^\infty$ における期待値は，形式的に

$$\langle z|\hat{T}|z\rangle = S^* S = (z_1 + z_2 + z_3 + \cdots)^*(z_1 + z_2 + z_3 + \cdots) \tag{S.187}$$

となる．例えば，$z_1 = 1/\sqrt{2}$，$z_2 = -1/\sqrt{2}$，その他の $z_r = 0$ と選べば $\langle z|\hat{T}|z\rangle = 0$ となる．

$|z\rangle$ 自体の $\ell^2$ ノルムは (S.169) なので，例えば $\zeta$ を $|\zeta| < 1$ であるような任意の複素数として

$$z_r = (1 - |\zeta|^2)^{1/2} \cdot \zeta^{r-1} \qquad (r = 1, 2, 3, \cdots) \tag{S.188}$$

とおけば $|z\rangle$ は単位ベクトルとなり，

$$S = \sum_{r=1}^{\infty} z_r = (1 - |\zeta|^2)^{1/2} \sum_{r=1}^{\infty} \zeta^{r-1} = (1 - |\zeta|^2)^{1/2} \cdot (1 - \zeta)^{-1} \tag{S.189}$$

となって，期待値は

$$\langle z|\hat{T}|z\rangle = |S|^2 = \frac{1 - |\zeta|^2}{|1 - \zeta|^2} \tag{S.190}$$

となる．$\varepsilon$ を $0 < \varepsilon \leq 1$ なる実数とし，$\zeta = 1 - \varepsilon$ とおくと，

$$\langle z|\hat{T}|z\rangle = \frac{1 - |\zeta|^2}{|1 - \zeta|^2} = \frac{1 - (1 - 2\varepsilon + \varepsilon^2)}{|1 - (1 - \varepsilon)|^2} = \frac{2\varepsilon - \varepsilon^2}{\varepsilon^2} = \frac{2}{\varepsilon} - 1 \tag{S.191}$$

となるので，$\varepsilon \to +0$ の極限で $\langle z|\hat{T}|z\rangle$ は正の無限大に発散する．$\varepsilon$ を $0 < \varepsilon \leq 1$ の範囲で動かせば，$\langle z|\hat{T}|z\rangle$ は任意の正の実数値をとる．つまり，**$\hat{\boldsymbol{T}}$ の固有値は $\mathbf{0}$ のみであるにもかかわらず，$\hat{\boldsymbol{T}}$ の期待値は任意の非負実数値をとる．**

$\mathrm{dom}\,\hat{T} = \ell^1 \cap N$ と選んでおいて，$\hat{T}$ のエルミート共役を形式的に

$$\langle \hat{T}^\dagger w|z\rangle = \langle w|\hat{T}z\rangle \tag{S.192}$$

を満たす演算子として定めることを考える．(S.182) で見たように $\hat{T}|z\rangle$ がヒルベルト空間の元になるときは必ず $\hat{T}|z\rangle = 0$ なので，結局，任意のベクトル $|w\rangle$ に対して

$$\langle \hat{T}^\dagger w|z\rangle = 0 \tag{S.193}$$

である．$|z\rangle$ を選べる範囲は $\ell^1 \cap N$ であり，これは $\ell^2$ の稠密な部分空間ではないので，この条件式 (S.193) だけでは $\hat{T}^\dagger$ は一意的に定まらない．もちろん恒等的に 0 であるような $\hat{T}^\dagger = 0$ は条件 (S.193) を満たす．そのドメインは $\mathrm{dom}\,\hat{T}^\dagger = \ell^2$ のようにヒルベルト空間全体であり，$\hat{T}^\dagger \neq \hat{T}$ である．やはり $\hat{T}$ は自己共役ではない．

## 19.4　正則化とカットオフ

以上で (S.179) に示した無限次元行列 $\hat{T}$ の奇妙な性質（見かけは自己共役だが，じつは自己共役ではないという性質）を調べたが，この奇妙さがどこから来るかとい

うことを感じるために $\alpha$ を任意の複素数として行列

$$\hat{T}(\alpha) := \begin{pmatrix} 1 \\ \alpha \\ \alpha^2 \\ \alpha^3 \\ \vdots \end{pmatrix} (1, \alpha^*, \alpha^{*2}, \alpha^{*3}, \cdots) = \begin{pmatrix} 1 & \alpha^* & \alpha^{*2} & \alpha^{*3} & \cdots \\ \alpha & \alpha\alpha^* & \alpha\alpha^{*2} & \alpha\alpha^{*3} & \cdots \\ \alpha^2 & \alpha^2\alpha^* & \alpha^2\alpha^{*2} & \alpha^2\alpha^{*3} & \cdots \\ \alpha^3 & \alpha^3\alpha^* & \alpha^3\alpha^{*2} & \alpha^3\alpha^{*3} & \cdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix} \tag{S.194}$$

を考えてみる．見かけ上は，$\hat{T}(\alpha)^\dagger = \hat{T}(\alpha)$ となり，$\hat{T}(\alpha)$ は自己共役であるように見える．$\alpha = 1$ のとき，これは (S.179) の $\hat{T}$ に帰着する．ベクトル

$$|\alpha\rangle := \begin{pmatrix} 1 \\ \alpha \\ \alpha^2 \\ \alpha^3 \\ \vdots \end{pmatrix} \tag{S.195}$$

は，演算子 $\hat{T}(\alpha)$ の固有値

$$\lambda := 1 + |\alpha|^2 + |\alpha|^4 + |\alpha|^6 + \cdots = \frac{1}{1 - |\alpha|^2} \qquad (\,0 \leq |\alpha| < 1 \text{ の場合，収束}) \tag{S.196}$$

に属する固有ベクトルである．$|\alpha| \geq 1$ では “固有ベクトル” $|\alpha\rangle$ のノルムも “固有値” $\lambda$ も発散する．いわば $|\alpha| = 1$ は $\hat{T}(\alpha)$ の臨界値 (critical value) であり，$|\alpha|$ の値を 0 から徐々に大きくしていくと $|\alpha| = 1$ を境に $\hat{T}(\alpha)$ は有界演算子から非有界演算子に移行する.「固有ベクトル $|\alpha\rangle$ のノルムが発散してしまうのであれば，最初から規格化しておけばよいではないか」と思われるかもしれないが，(S.195) を規格化して

$$|\rho_\alpha\rangle := \sqrt{1 - |\alpha|^2} \begin{pmatrix} 1 \\ \alpha \\ \alpha^2 \\ \alpha^3 \\ \vdots \end{pmatrix} \tag{S.197}$$

で置き換えても，$|\alpha| \to 1$ の極限で形式的には $|\rho_\alpha\rangle \to 0$ となってしまう（弱収束という）．$\alpha$ がいくらであっても $\langle\rho_\alpha|\rho_\alpha\rangle = 1$ なのに，他のどのようなベクトル $|\phi\rangle \in \ell^2$ に対しても，$|\alpha| \to 1$ の極限で $\langle\phi|\rho_\alpha\rangle \to 0$ になってしまうのである．

パラメータ $\alpha$ が $|\alpha| < 1$ である限り，$\hat{T}(\alpha)$ は自己共役演算子であり，その意味で「よい性質」を持った演算子である．このように，変動可能なパラメータを導入して，性質の悪かった $\hat{T} = \hat{T}(1)$ を性質の良い $\hat{T}(\alpha)$ で置き換えることを**正則化** (regularization) という．

無限次元空間上の演算子 $\hat{T}(\alpha)$ を**カットオフ** (cut-off) して有限サイズの $(n+1)$ 行 $(n+1)$ 列の行列

$$\hat{T}_n(\alpha) := \begin{pmatrix} 1 \\ \alpha \\ \alpha^2 \\ \vdots \\ \alpha^n \end{pmatrix} (1, \alpha^*, \alpha^{*2}, \cdots, \alpha^{*n}) = \begin{pmatrix} 1 & \alpha^* & \alpha^{*2} & \cdots & \alpha^{*n} \\ \alpha & \alpha\alpha^* & \alpha\alpha^{*2} & \cdots & \alpha\alpha^{*n} \\ \alpha^2 & \alpha^2\alpha^* & \alpha^2\alpha^{*2} & \cdots & \alpha^2\alpha^{*n} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \alpha^n & \alpha^n\alpha^* & \alpha^n\alpha^{*2} & \cdots & \alpha^n\alpha^{*n} \end{pmatrix} \tag{S.198}$$

を考えてみる．これはつねにランク 1 であり，0 でない固有値は

$$\lambda_n := 1 + |\alpha|^2 + |\alpha|^4 + \cdots + |\alpha|^{2n} = \begin{cases} \frac{1-|\alpha|^{2(n+1)}}{1-|\alpha|^2} & (|\alpha| \neq 1) \\ n+1 & (|\alpha| = 1) \end{cases} \tag{S.199}$$

となって，もちろん有限値である．$|\alpha| \geq 1$ だと $n \to \infty$ に伴って固有値 $\lambda_n$ は発散する．(S.179) の $\hat{T}$ は $n = \infty$ かつ $\alpha = 1$ という臨界点直上にあったのである．この事例なら，有限次元ではあり得なかったいろいろな「不都合」が無限次元空間上で発生する由来が見やすいのではないだろうか．

以上では，固有値が発散して自己共役性が破綻するエルミート演算子の例を見つけて，それを分析した．正則化パラメータ $\alpha$ とカットオフ次元 $n$ を導入すると，演算子の異常性の発生源を追跡できた．

湯川秀樹編著『量子力学 II』[25] には，純虚数 $-i$ を固有値に持つエルミート演算子（微分演算子）の例が示されている．虚数固有値が出現することは計算すれば確認できるが，その出現理由を直観的に理解するのは難しい．微分演算子ではなく，離散的に書かれた行列で，純虚数の固有値を持つような無限次元エルミート行列の例を私は知らない．誰か知っていたら教えてほしい．

# 参考文献


[1] 谷村省吾『ゼロから学ぶ数学・物理の方程式』，講談社 (2005). pp.205–208, 付録「複素数の積と図形との関係」.

[2] 前原昭二『記号論理入門』，日本評論社 (1967). 新装版も出ている．

[3] 永田雅宜「わが師・わが友・わが数学—生い立ちの記」，数学セミナー 1981 年 5 月号 pp.36–39.

[4] 永田雅宜「数学雑感」, 数学（日本数学会会誌）1997 年 49 巻 3 号 pp.297–299. `https://www.jstage.jst.go.jp/article/sugaku1947/49/3/49_3_297/_article/-char/ja/`

[5] 谷村省吾「手書きの文字」，窮理 14 号 pp.37–41, 2019 年 12 月 26 日．
http://kyuurisha.com/electronic14/

[6] ルネ・デカルト著，山形浩生 訳『もろもろの学問分野で，正しく理詰めで真理を探究するための方法についての考察』(Discourse on the Method of Rightly Conducting the Reason, and Seeking the Truth in the Sciences) （2021 年 11 月 25 日閲覧）．https://www.genpaku.org/dcart01/dcart10j.html

[7] ノイラートの船 (Neurath's boat)（2021 年 11 月 15 日閲覧）．
https://plaza.umin.ac.jp/kodama/ethics/wordbook/neurath's_boat.html
（URL の中のアポストロフィ「'」をタイプし直さないとうまくリンクしないようである．）

[8] 谷村省吾「量子論と代数—思考と表現の進化論」，数理科学（サイエンス社）2018 年 3 月号 pp. 42–48. 補足付きでリポジトリに公開してある．
http://hdl.handle.net/2237/00030854

[9] Y. Ohnuki and S. Kitakado, "Fundamental algebra for quantum mechanics on $S^D$ and gauge potentials", Journal of Mathematical Physics **34**, pp.2827–2851 (1993).

[10] S. Tanimura, "Gauge field, parity and uncertainty relation of quantum mechanics on $S^1$", Progress of Theoretical Physics **90**, pp. 271–291 (1993).

[11] 谷村省吾「座標系によらない量子力学，多様体上の量子力学」，数理科学（サイエンス社）2004 年 2 月号 pp.8–14.

[12] 谷村省吾「21 世紀の量子論入門：第 12 回 円周上の量子力学と鏡映対称性の破れ」，理系への数学（現代数学社）2011 年 4 月号 pp.56–61.

[13] 谷村省吾「干渉と識別の相補性—不確定性関係との関わりを巡る論争小史」，数理科学（サイエンス社）2009 年 2 月号 pp.14–21.

[14] T. Qureshi and R. Vathsan, "Einstein's recoiling slit experiment, complementarity and uncertainty", Quanta **2**, pp.58–65 (2013).

[15] M. Ozawa, "Quantum measuring processes of continuous observables", Journal of Mathematical Physics **25**, 79–87 (1984).

[16] M. Ozawa, "Uncertainty relations for noise and disturbance in generalized quantum measurements", Annals of Physics **311**, 350–416 (2004).

[17] 小澤正直「量子測定理論入門」，第 56 回物性若手夏の学校（2011 年度）講義ノート．http://hdl.handle.net/2433/172051

[18] 「21 世紀の量子論入門：第 15 回：観測問題の基本概念」，理系への数学（現代数学社）2011 年 7 月号 pp.56-61.

[19] 「21 世紀の量子論入門：第 16 回：測定における確率則と遷移則」，理系への数学（現代数学社）2011 年 8 月号 pp.56-61.

[20] ブックレビュー「尽きぬ疑問，絶えない論争，だけど面白い！」，フォン・バイヤー著『QBism キュービズム：量子情報時代の新解釈』（森北出版）についての書評．日経サイエンス 2018 年 6 月号 p.108.

[21] 谷村省吾「アインシュタインの夢 ついえる—測っていない値は実在しない」，日経サイエンス（日経サイエンス社）2019 年 2 月号 pp.64–71.

[22] 谷村省吾「『アインシュタインの夢 ついえる：測っていない値は実在しない』を読んで，もっと理解したいと思った人のための補足解説」，第 7 節 波動関数のよりよい解釈を求めて．日経サイエンス，ウェブ公開 2018 年 12 月 26 日，第 2 版 2019 年 2 月 15 日．http://www.nikkei-science.com/201902_064.html

[23] 谷村省吾「波動関数は実在するか—物質的存在ではない．二つの世界をつなぐ窓口である」，数理科学（サイエンス社） 2013 年 12 月号 pp.14–21.

[24] 谷村省吾「ミクロとマクロをつなげる—概念体系の網はいかにして世界を捉えるか」，数理科学（サイエンス社）2022 年 1 月号 pp. 52–57.

[25] 湯川秀樹編著『量子力学 II』（岩波講座 現代物理学の基礎 第 2 版 4 巻）(1978). 第 16.3 節, p.272–273 に，エルミート演算子であるが，純虚数 $-i$ を固有値に持つ演算子の例が示されている．