ヒルベルト空間

量子力学でたまに出てくるヒルベルト空間の話を雑にします。知らなくても困らないです。

量子力学で必要なのは、フーリエ級数展開 (重ね合わせの原理) と確率解釈です。この 2 つを可能にしているのがヒルベルト空間です (何かの集まりという意味で空間という単語が使われます)。つまり、

(i) $\psi(x)=\sum_{n=1}^{\infty}a_n\phi_n(x)$

(ii) $\int_{-\infty}^{\infty}dx\ |\psi(x)|^2<\infty$

となっている関数 ψ の集まりがヒルベルト空間です (ϕ_n は完全正規直交系、a_n は展開係数)。ただし、ここで言っているヒルベルト空間は、量子力学で使われるヒルベルト空間という意味です。

(i) はフーリエ級数展開そのものです。(ii) は積分の結果が無限大でなければ適当な規格化定数によって積分の結果を 1 に出来るので、確率解釈に必要です (フーリエ変換ができるためにも必要)。(ii) を満たす関数を自乗可積分関数 (square integrable function) と呼びます。また、(ii) が成立するためには $\psi(x)$ が $\pm\infty$ で 0 に近づけばいいので、$\psi(x)$ は $\pm\infty$ で 0 になると出来ます。というわけで、波動関数 ψ はフーリエ級数展開できて、$|\psi|^2$ の積分が 1 になるという量子力学の導入部分で出てくる話になります。

線形代数で出てくるように、関数はベクトルとして扱える点に注意してください。これはベクトルの定義は和や定数倍とかによって与えられていることと、関数の和や定数倍は定義できることから分かると思います (数学的な抽象化されたベクトルの概念に関数は含められる)。このためベクトル空間 (ベクトルの集まり) であるヒルベルト空間を関数で構成できます。そして、(ii) を満たす関数の内積は

$$\int_{-\infty}^{\infty}dx\ \psi_1^*(x)\psi_2(x)$$

の形で与えられています。内積はベクトルから実数 (複素数) を作る操作のことなので、関数から実数 (複素数) を作るという意味で内積です。

ヒルベルト空間のもう少し詳しい定義を与えておきます。どちらでも同じですが、関数でなく感覚的に分かりやすいブラケットで言っていきます。まず、ベクトル空間を用意します。次に、内積はブラケットによる $\langle A|B\rangle$ で与え (一般的にはブラとケットである必要はない)、0 同士でないノルムは必ず正の値になること、そして完備である、という条件を持たせます。これらの条件を持たせることによって、重ね合わせの原理を満たす空間を作ることができ (全ての状態を重ね合わせても無限大に発散せず収束する)、この条件を満たす、つまり、内積と重ね合わせの原理が保証されるベクトル空間をヒルベルト空間と呼んでいます。数学的に言えば、ヒルベルト空間は完備な内積空間 (内積が定義されたベクトル空間) と定義されます。ちなみに内積だけを定義して完備を加えないものを前ヒルベルト空間と呼びます。

無限次元をとる理由は、3 次元空間は x,y,z という 3 方向を向いたベクトルに構成されるのに対して、無限個の状態を x,y,z 軸のようにして扱いたいからです (状態が無数にあれば無限個必要になる)。これによって、状態を表すケット $|a_1\rangle,|a_2\rangle,\cdots$ を基底として扱い、それらに完全性を持たせることで重ね合わせを実現させています (3 次元ベクトル空間での線形結合 $ae_x+be_y+ce_z=\boldsymbol{d}$ の拡張)。

ブラケットと波動関数のどちらを使うかはヒルベルト空間をどちらで作っているかの違いです。物理では関数 (波動関数) を使うと便利ですが、数学的にヒルベルト空間上の関数を扱うにはルベーグ積分が必要になるので面倒です ((ii) をリーマン積分で与えると完備にならないから)。

また、ヒルベルト空間上の状態は抽象的なもので、ユークリッド空間で表現される力学のような直接的な現実の状態ではないです。

たまに量子力学でも出てきますが、知らなくても困らない数学の話を見ていきます。

- **完全と完備**

  ブラケットにしないほうが見やすい気もしますが、ブラケットを使います (ブラケットはただのベクトルだと思ってください)。内積も $\langle\ |\ \rangle$ で書いてしまってますが、おそらく害はないです。この話はベクトルであれば成立します (内積は定義されている)。数学の領域の話をしますが、それほど厳密に扱っていないです。

  完備の定義は全てのコーシー列 (基本列、Cauchy sequence) が収束するということです。簡単に説明しておきます。まず、数列 $x_1,x_2,\ldots,x_n$ というのを用意します。この数列の n が無限大の極限で x_0 になるとすれば

$$\lim_{n\to\infty} x_n = x_0$$

となり、これは数列が x_0 に収束することを表します。x_n の $n\to\infty$ は、例えば、直線上で左から $1,2,\dots$ と番号が振られた点が、$n=\infty$ で到達する直線上の点 x_0 ということです (0 から 1 の間を無限個で分割したら $n\to\infty$ で 1 の点につく)。つまり、収束する先が x_0 ということです。分かりやすい例が平方根です。例えば $\sqrt{2}$ とすれば、数列

$$x_1 = 1.4\ ,\ x_2 = 1.41\ ,\ x_3 = 1.414\ ,\ \dots$$

の極限として

$$\lim_{n\to\infty} x_n = \sqrt{2}$$

となります。

コーシー列は、$i=1,\dots,n$ と番号付けされたある数列 $|\phi_1\rangle, |\phi_2\rangle, \dots, |\phi_i\rangle, \dots, |\phi_n\rangle$ がある整数 $k>0$ に対して $i,j\geq k$ のとき、$|\phi_i\rangle - |\phi_j\rangle$ のノルムが有限 (無限大以外の値になる) になっている数列です。単純な実数だけの数列の場合で言えば、ある実数の数列 x_i $(i=1,2,\dots)$ があったとき

$$|x_i - x_j| < \epsilon \quad (i,j>N)$$

となることです ($|\ |$ は絶対値、ϵ は正の数)。面倒ならヒルベルト空間にはコーシー列という収束する数列があるというだけでいいです。

例えば、同じヒルベルト空間に、コーシー列 $|\phi_n\rangle$(n は 1 から無限大) と $|\phi\rangle$ がいるとしたとき

$$\lim_{n\to\infty} |\phi_n\rangle = |\phi\rangle \quad (\lim_{n\to\infty} \big||\phi\rangle - |\phi_n\rangle\big| = 0)$$

となることを完備と言います (この極限があることを収束すると言う)。ここからはノルムしか出てこないのでノルムを $|\ |$ で表し、$||\phi\rangle - |\phi_n\rangle|$ のようにしていきます。

数列の収束ということなら、わざわざこんな定義はいらないように思えますが、コーシー列の収束先を対象が含んでいない場合があります。先ほどの $\sqrt{2}$ もそうで、$1.4, 1.41, \dots$ の数列は有理数によるコーシー列ですが $\sqrt{2}$ は無理数です。このため有理数の中だけで考えると、収束する先の $\sqrt{2}$ がいません。これをなくすことで完備の定義となります (そのために同じヒルベルト空間としている)。

今度は完全を見てみます。有限次元では余計な話なしで正規直交系が完全であることを示せるので、無限次元ヒルベルト空間とします。ヒルベルト空間における正規直交系を

$$\langle\phi_m|\phi_n\rangle = \delta_{nm} \quad (m,n=1,2,\dots)$$

と与えます (これは常に与えることが出来る)。m,n は無限大まで取ります。ヒルベルト空間における任意の $|\psi\rangle$ が、正規直交系 $|\phi_n\rangle$ によって

$$|\psi\rangle = \sum_{n=1}^{\infty} a_n|\phi_n\rangle \quad (a_n = \langle\phi_n|\psi\rangle)$$

と書けるなら、$|\phi_n\rangle$ は完全正規直交系となります。このとき右辺の和が $|\psi\rangle$ に収束していることを見ます。

これのノルムにして

$$\lim_{N\to\infty}\Big||\psi\rangle-\sum_{n=1}^{N}a_n|\phi_n\rangle\Big|=0$$

としたものを考えます。そうすると $\Sigma a_n|\phi_n\rangle$ を和の上限 N の値によって区別して $|\psi_N\rangle$ とすれば

$$\lim_{N\to\infty}\Big||\psi\rangle-|\psi_N\rangle\Big|=0$$

となるので、$|\psi_1\rangle,\dots,|\psi_N\rangle$ が $N\to\infty$ で $|\psi\rangle$ に収束するという式になります。つまり、$|\psi_N\rangle$ がコーシー列なら完備の定義と同じになり、ヒルベルト空間は完備なので

$$|\psi\rangle=\lim_{N\to\infty}|\psi_N\rangle$$

が言えて、完全の式が書けることになります。実際に

$$|\psi_N\rangle=\sum_{n=1}^{N}a_n|\phi_n\rangle=\sum_{n=1}^{N}\langle\phi_n|\psi\rangle|\phi_n\rangle$$

はコーシー列です。

コーシー列ということ ($a_n=\langle\phi_n|\psi\rangle$ になっている理由) を示しておきます。そのためには $|\psi_M\rangle-|\psi_N\rangle$ の内積がどこかの値に収束することを示せばいいです。まず

$$|f_N\rangle=|\psi\rangle-|\psi_N\rangle$$

とすると、$|\phi_n\rangle$ が正規直交系なので

$$\langle\phi_n|f_N\rangle=\langle\phi_n|\psi\rangle-\langle\phi_n|\psi_N\rangle=\langle\phi_n|\psi\rangle-\sum_{i=1}^{N}\langle\phi_n|\phi_i\rangle\langle\phi_i|\psi\rangle=\langle\phi_n|\psi\rangle-\langle\phi_n|\psi\rangle=0$$

ここで、N が有限のときの完全性はすでに証明されているとして

$$\sum_{i=1}^{N}\langle\phi_n|\phi_i\rangle\langle\phi_i|\psi\rangle=\langle\phi_n|\psi\rangle$$

を使っています (N が有限のときは普通の線形結合でしかない)。$|\psi_N\rangle$ は $|\phi_n\rangle$ に比例しているので、これから $\langle f_N|\psi_N\rangle$ と $\langle\psi_N|f_N\rangle$ は消えることが分かるので

$$\langle\psi|\psi\rangle=\langle f_N+\psi_N|f_N+\psi_N\rangle=\langle f_N|f_N\rangle+\langle\psi_N|\psi_N\rangle+\langle f_N|\psi_N\rangle+\langle\psi_N|f_N\rangle=\langle f_N|f_N\rangle+\langle\psi_N|\psi_N\rangle$$

内積の定義から $\langle f_N|f_N\rangle\geq 0$ なので

$$\langle\psi_N|\psi_N\rangle \leq \langle\psi|\psi\rangle$$

この関係はベッセルの不等式と呼ばれるものです。そして $\langle\psi_N|\psi_N\rangle$ は

$$\langle\psi_N|\psi_N\rangle = \sum_{n=1}^{N}\sum_{m=1}^{N}\langle\phi_m|\psi\rangle^*\langle\phi_n|\psi\rangle\langle\phi_m|\phi_n\rangle = \sum_{n=1}^{N}\langle\phi_n|\psi\rangle^*\langle\phi_n|\psi\rangle = \sum_{n=1}^{N}|\langle\phi_n|\psi\rangle|^2$$

なので

$$\sum_{n=1}^{N}|\langle\phi_n|\psi\rangle|^2 \leq \langle\psi|\psi\rangle$$

これから、和は何かしらの内積の値以下になっているので、この和は収束していることが分かります。そうすると

$$|\psi_M\rangle - |\psi_N\rangle$$

は和を $N+1$ から M まで取ったものなので

$$||\psi_M\rangle - |\psi_N\rangle|^2 = \sum_{n=N+1}^{M}|\langle\phi_n|\psi\rangle|^2$$

となり、これも当然収束します。よって、$|\psi_N\rangle$ はコーシー列です。

こんな理由からなのか英語で両方とも complete と言ってるからなのか知りませんが、完備と完全の両方が同じ式に使われることがあります。ただ、完全と言ってることの方が多いです。本来は、完備はヒルベルト空間の定義、完全は完全正規直交系の定義という使われ方ですが、量子力学関連の話だと混ざっていることがあります (完備だから完全ではないことに注意)。英語でも意図的に完全のほうに complete を使わないようにしている場合もあります。

先に完全性を要求したので、どんなヒルベルト空間でも完全正規直交系がいるように思えますが、そうではないです (上の話は完全正規直交系での和が収束することを示しただけ)。なので、どんなヒルベルト空間なら完全正規直交系が存在するのかも大雑把に見ておきます (細かいことは全部省いて雰囲気だけで示します)。

ヒルベルト空間 X を用意して、その部分集合 A を考えます。このとき、ヒルベルト空間 X における $|\psi\rangle$ と部分集合 A における数列 $|\psi_N\rangle$ がノルムにおいて

$$\lim_{N\to\infty}||\psi\rangle - |\psi_N\rangle| = 0$$

となっているなら、ヒルベルト空間 X における部分集合 A は X で稠密 (ちゅうみつ、dense) と言われます。稠密は、ヒルベルト空間 X の $|\psi\rangle$ は部分集合 A の $|\psi_N\rangle$ の極限として近似できることと言えます (稠密の説明には実数と有理数がよく例に使われます)。

これを踏まえて $|\psi_N\rangle$ を上の $\Sigma a_n|\phi_n\rangle$ $(n=1,2,\ldots,N)$ とすれば、A に正規直交系 $|\phi_n\rangle$ があり、A が稠密であるなら、$|\phi_n\rangle$ による線形結合 $|\psi_N\rangle$ は $N\to\infty$ の極限でヒルベルト空間 X でのベクトル $|\psi\rangle$ になります。よって、任意のベクトル $|\psi\rangle$ は $|\phi_n\rangle$ によって

$$|\psi\rangle = \sum_{n=1}^{\infty} a_n|\phi_n\rangle$$

となり、完全正規直交系になります ($a_n = \langle\phi_n|\psi\rangle$ となるのは上の話から)。というわけで、ヒルベルト空間の部分集合において正規直交系による線形結合があり、それがヒルベルト空間で稠密であるなら、完全正規直交系が存在します。かなり乱暴に言ってしまえば、ヒルベルト空間において、その部分空間での正規直交系による線形結合の極限がヒルベルト空間の任意のベクトルになるなら (線形結合の集まりがヒルベルト空間で稠密)、完全正規直交系になるということです。このようなヒルベルト空間を可分 (separable) なヒルベルト空間と言います。量子力学では可分なヒルベルト空間を使うので、完全正規直交系が必ずいます。

可分の感覚的なイメージを大雑把に言っておきます。箱とある程度の大きさを持ったボール A と砂粒程度の大きさのボール B を用意します。まず、箱に A を詰め込めるだけ詰め込みます。この状態が稠密です。つまり、何かがある範囲内に大量に詰め込まれている状態です。しかし、この箱には砂粒みたいな B はまだ大量に入れられるので、B をより大量に詰め込みます。そうすると、今の方がボールは多く詰め込まれています。なので、ボール A だけより、ボール A, B の方がさらに多くのボールが詰め込められた状態になります。このように、与えられた状況でどれだけ詰め込まれているかが変わります。そして、箱の中に A がいくつ入っているかは数えられるとするなら、箱は可分となります。つまり、ある範囲内にギチギチに何かが詰め込まれている対象 (ボール A, B が詰め込まれた箱) において、それなりにギチギチに詰め込まれている数えることができる物 (ボール A) がいるなら、その対象 (箱) を可分と言います。よく出てくる例は実数で、実数は有理数と無理数を含んでいるために可分となります。例えば 1 と 2 の間に有理数は大量にあり (数えられる無限個。可算無限個)、無理数はさらに大量にある (数えられない無限個。非可算無限個) からです。なので、ヒルベルト空間の中に完全正規直交系 (構成するベクトルは可算無限個) がいるなら、ヒルベルト空間は可分となります。

- **ブラケットの数学的背景**

物理をやる分には気にしなくていいブラケット表記の数学の話をします。数学用語をなるべく使わずに簡単に見ていくので、証明や数学的な厳密さは無視しています。ここで言うベクトルはヒルベルト空間のものとします。

まず、ブラとケットの定義を与えます。簡単に言ってしまえば、ケットはヒルベルト空間のベクトル、ブラはケットのいるヒルベルト空間の双対空間上で与えられます。この双対空間はヒルベルト空間にいる線形汎関数による集まりのことです (線形は省いて汎関数と言っていきます)。ここでの汎関数 F は、ヒルベルト空間での 2 つのベクトル $\boldsymbol{g}, \boldsymbol{f}$ に対する内積 (ブラケット表記と区別するためにベクトルの内積を $(\boldsymbol{g}, \boldsymbol{f})$ と書き、$(a\boldsymbol{g}, \boldsymbol{f}) = a^*(\boldsymbol{g}, \boldsymbol{f})$ とします)

$$F_g(\boldsymbol{f}) = (\boldsymbol{g}, \boldsymbol{f})$$

を与えることができ (ヒルベルト空間のベクトル $\boldsymbol{f}$ を複素数 $(\boldsymbol{g}, \boldsymbol{f})$ にするもの)、F_g と添え字 g を付けているように、これを満たす $\boldsymbol{g}$ は 1 つに決まります。これはリースの表現定理 (Riesz representation theorem) と呼ばれます。汎関数 F_g ($F_g(\boldsymbol{f})$ と書かないときは汎関数そのものを指しています) はベクトル $\boldsymbol{g}$ から

$$\Phi(\boldsymbol{g}) = F_g$$

と作られています (ヒルベルト空間のベクトル $\boldsymbol{g}$ を双対空間の汎関数 F_g にする関数 Φ)。$\Phi(\boldsymbol{g})$ は複素数 a に対して

$$\Phi(a\boldsymbol{g}) = a^*\Phi(\boldsymbol{g})$$

となっています。この $\Phi(\boldsymbol{g}) = F_g$ をブラ $\langle g|$ として、$(\boldsymbol{f})$ をケット $|f\rangle$ とすることで

$$F_g(\boldsymbol{f}) = (\boldsymbol{g}, \boldsymbol{f}) = \langle g|f\rangle$$

このようなブラケットの表記になります。ケット $|f\rangle$ はそのままベクトル $\boldsymbol{f}$ に対応し、ブラ $\langle g|$ は F_g によってベクトル $\boldsymbol{g}$ と対応しています。

ついでに汎関数 F_g をベクトル $\boldsymbol{g}$ と対応させられることを示しておきます。内積において $\boldsymbol{f}$ が $\boldsymbol{g}$ とすれば

$$F_g(\boldsymbol{g}) = (\boldsymbol{g}, \boldsymbol{g})$$

シュワルツの不等式 (左辺の | | は絶対値)

$$|(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y})|^2 \leq (\boldsymbol{x}, \boldsymbol{x})(\boldsymbol{y}, \boldsymbol{y}) \quad (\text{ よくあるベクトルの表記で書けば } |\boldsymbol{x} \cdot \boldsymbol{y}|^2 \leq |\boldsymbol{x}|^2 |\boldsymbol{y}|^2)$$

を使うと

$$|(\boldsymbol{g}, \boldsymbol{f})|^2 \leq (\boldsymbol{g}, \boldsymbol{g})(\boldsymbol{f}, \boldsymbol{f})$$

であるので汎関数は

$$|F_g(\boldsymbol{f})|^2 \leq (\boldsymbol{g}, \boldsymbol{g})(\boldsymbol{f}, \boldsymbol{f}) \quad (|F_g(\boldsymbol{f})|^2 = F_g^*(\boldsymbol{f}) F_g(\boldsymbol{f}))$$

複素数の絶対値はノルムと同じ定義なので、汎関数 F_g のノルムに対して ($\boldsymbol{f}$ に作用していない段階なので、ベクトルと同じようにノルムとします)

$$\|F_g\|^2 \leq (\boldsymbol{g}, \boldsymbol{g})$$

絶対値と区別するためにノルムを $\|\ \|$ としています。$\boldsymbol{f}$ が $\boldsymbol{g}$ のときシュワルツの不等式は

$$|F_g(\boldsymbol{g})|^2 \leq (\boldsymbol{g}, \boldsymbol{g})(\boldsymbol{g}, \boldsymbol{g})$$

そして、$F_g(\boldsymbol{g}) = (\boldsymbol{g}, \boldsymbol{g})$ から等号しか成立しないので (ベクトルのノルムも $(\boldsymbol{g}, \boldsymbol{g}) = \|\boldsymbol{g}\|^2$ と書きます)

$$|F_g(\boldsymbol{g})|^2 = \|\boldsymbol{g}\|^2 \|\boldsymbol{g}\|^2$$
$$\|F_g\| = \|\boldsymbol{g}\|$$

このように、ヒルベルト空間のベクトルと双対空間の汎関数のノルムは等しくなるので、双対空間はヒルベルト空間と同一視することができます。

演算子の作用の仕方も見ていきます。ヒルベルト空間上の演算子を A とし、ベクトル $\boldsymbol{f}$ に作用するとして、A が $\boldsymbol{f}$ に作用することを $A\boldsymbol{f}$ と書きます。このときの内積 $(\boldsymbol{g}, A\boldsymbol{f})$ と等しくなる F を $F_h(\boldsymbol{f})$ として

$$(\boldsymbol{g}, A\boldsymbol{f}) = F_h(\boldsymbol{f}) = (\boldsymbol{h}, \boldsymbol{f})$$

左辺から $\boldsymbol{h}$ は $\boldsymbol{g}$ に依存していて、そしてリースの表現定理から $\boldsymbol{h}$ は一意的に存在します。なので、$\boldsymbol{h}$ と $\boldsymbol{g}$ を結ぶ演算子が一意的に存在し、それを B とすれば、$\boldsymbol{h} = B\boldsymbol{g}$ となります。この B を A の共役演算子 (adjoint operator) と言い、B でなく $A^\dagger$ と書くことにします。つまり。A の共役 $A^\dagger$ は

$$(\boldsymbol{g}, A\boldsymbol{f}) = (A^\dagger \boldsymbol{g}, \boldsymbol{f})$$

と定義される演算子です。

次に汎関数 ϕ と $A\boldsymbol{f}$ から

$$\phi'(\boldsymbol{f}) = \phi A(\boldsymbol{f}) = \phi(A\boldsymbol{f})$$

という汎関数 ϕ' を定義します。真ん中のは A, ϕ の順に $\boldsymbol{f}$ に作用するという意味、最右辺は $\boldsymbol{f}$ に A が作用したベクトルに ϕ が作用するという意味です。

ϕ を ϕ_g として

$$\phi_g(\boldsymbol{f}) = \langle g|f\rangle$$

ベクトル $\boldsymbol{f}$ はそのままケット $|f\rangle$、汎関数 ϕ_g をブラ $\langle g|$ になる置き換えを適用すれば、表記としては $A\boldsymbol{f} = |Af\rangle = A|f\rangle$ になることから

$$\phi'(\boldsymbol{f}) = \phi(A\boldsymbol{f}) = \langle g|A|f\rangle$$

添え字の g は省いています。これは、$|f\rangle$ に対する汎関数 $\phi' = \phi A = \langle g|A$ とも見れます。なので、$\langle g|$ に作用する場合を

$$\phi A = \langle g|A$$

と表記します。また、A は ϕ に作用しないので、$\phi' = A'\phi$ となる A' がいるとすれば（A はヒベルト空間上、A' は双対空間上の演算子）

$$A'\phi = \phi A = \langle g|A$$

となります。また、結合法則 $\langle g|A|f\rangle = \langle g|(A|f\rangle) = (\langle g|A)|f\rangle$ も分かります。

共役演算子の定義から

$$\phi(A\boldsymbol{f}) = (\boldsymbol{g}, A\boldsymbol{f}) = (A^\dagger \boldsymbol{g}, \boldsymbol{f}) = \langle A^\dagger g|f\rangle$$

と表記できるので

$$\langle A^\dagger g| = \langle g|A$$

として、$\langle g|$ に作用します。これはベクトル $\boldsymbol{g}$ に $A^\dagger$ が作用することは、ブラ $\langle g|$ に A が作用することと同じと言っています。ブラケット表記で $|A\psi\rangle$ のようにブラケットの中に演算子を入れた表記を使うと、$\langle A^\dagger\psi| = \langle\psi|A$ ($\langle A\psi| = \langle\psi|A^\dagger$) という最初から $\langle\psi|A$ と書けば必要のない規則 (しかも内積との関連を示さないと理由が分からない規則) が出てくるので、あまり使わないほうがいいです。

内積の複素共役を取ると、内積の対称性 $(\boldsymbol{v}, \boldsymbol{w}) = (\boldsymbol{w}, \boldsymbol{v})^*$ から

$$(\boldsymbol{g}, A\boldsymbol{f})^* = (A\boldsymbol{f}, \boldsymbol{g}) = \langle Af|g\rangle = \langle f|A^\dagger|g\rangle$$

となるので、$(\boldsymbol{g}, A\boldsymbol{f}) = \langle g|A|f\rangle$ の複素共役は

$$\langle g|A|f\rangle^* = \langle f|A^\dagger|g\rangle$$

となっています。さらに、分かりやすくするために $A\boldsymbol{f}$ を $\boldsymbol{v}$ として

$$(\boldsymbol{g}, \boldsymbol{v}) = \langle g|v\rangle = \langle g|A|f\rangle\ ,\ (\boldsymbol{g}, \boldsymbol{v})^* = (\boldsymbol{v}, \boldsymbol{g}) = \langle v|g\rangle = \langle f|A^\dagger|g\rangle$$

から

$$|v\rangle = A|f\rangle\ ,\ \langle v| = \langle f|A^\dagger$$

と出来ます。なので

$$(|v\rangle)^\dagger = \langle v| \quad ((\langle v|)^\dagger = |v\rangle)$$

とすれば、$A, A^\dagger$ が繋がります。さらに、a を複素数として

$$(\boldsymbol{g}, a\boldsymbol{v})^* = (a\boldsymbol{v}, \boldsymbol{g}) = a^*(\boldsymbol{v}, \boldsymbol{g}) = a^*\langle f|A^\dagger|g\rangle$$

から、複素数に対して

$$(a|f\rangle)^\dagger = a^*\langle f|$$

となります。よって、ヒルベルト空間での内積の関係 $\langle af|g\rangle = a^*\langle f|g\rangle$ と分配法則を

$$(a|f_1\rangle + b|f_2\rangle)^\dagger|g\rangle = a^*\langle f_1|g\rangle + b^*\langle f_2|g\rangle$$

と書けます。この共役演算子の話を行列に持っていくと、「†」はエルミート共役になって、転置して複素共役を取れということになります。

このようにして、ブラケット表記は数学的な理由付けがされます。この話から予想できると思いますが、数学的な話でブラケット表記にすると見通しが悪くなります。また、ここでは内積の左側で複素共役を取るようにしていますが、数学の本では右側で複素共役を取るのが一般的なことに注意してください。

簡単にまとめれば、量子力学をやるときはブラケットを使って行列の計算を行い、数学をやるときは利点がない限りブラケットを導入しなければいいということです。言葉で言うと簡単ですが、この物理と数学のギャップ (温度差) を埋めるのは結構大変です。

- **自己共役演算子**

量子力学でのエルミート演算子の定義は数学的には 2 つの演算子に区別されることを説明します。ここでも数学的な定義を細かく与えないで見ていきます。

ヒルベルト空間における内積として

$$(A\boldsymbol{g},\boldsymbol{f})=(\boldsymbol{g},A\boldsymbol{f})$$

を満たす演算子 A を対称演算子 (symmetric operator)、もしくはエルミート演算子と呼び、対称演算子が演算子のみの関係として $A=A^\dagger$ を満たすとき自己共役 (self-adjoint) 演算子と呼びます。$A^\dagger$ は A の共役です。ブラケット表記にすれば (内積の対称性 $(\boldsymbol{v},\boldsymbol{w})=(\boldsymbol{w},\boldsymbol{v})^*$)

$$(A\boldsymbol{g},\boldsymbol{f})=(\boldsymbol{f},A\boldsymbol{g})^*=\langle f|A|g\rangle^*\ ,\ (\boldsymbol{g},A\boldsymbol{f})=\langle g|A|f\rangle\ \Rightarrow\ \langle f|A|g\rangle^*=\langle g|A|f\rangle$$

となって、量子力学でのエルミート演算子の形になります。

量子力学の話では対称演算子の定義と $A=A^\dagger$ は同じとしていますが、数学では明確に区別されています。簡単に違いを言えば、対称演算子では A の定義域 (A の変数の範囲)$D(A)$ と $A^\dagger$ の定義域 $D(A^\dagger)$ とが異なって定義されています。対称演算子の定義は、$A\subset A^\dagger$ ($A^\dagger$ の中に A がいる。部分集合) で、$A^\dagger$ が A の定義域にいるなら $A^\dagger=A$ になるというものです。自己共役演算子では元から $A=A^\dagger$ で、定義域も等しくなっています。

対称演算子の時点で固有値は実数、異なる固有値の固有ベクトルは直交するという性質を持っています。これはベクトル $\boldsymbol{f}$ が直交規格化されていて、対称演算子 A の固有値を a とし、内積の左側が複素共役になっていることから

$$(A\boldsymbol{f},\boldsymbol{f})=a^*(\boldsymbol{f},\boldsymbol{f})=a^*\ ,\ (\boldsymbol{f},A\boldsymbol{f})=a(\boldsymbol{f},\boldsymbol{f})=a\quad ((\boldsymbol{f},\boldsymbol{f})=1)$$

となるので、$a=a^*$ から実数になります。$\boldsymbol{f},\boldsymbol{g}$ を A の固有ベクトルとして、固有値を a,b とすれば

$$(A\boldsymbol{f},\boldsymbol{g})=a(\boldsymbol{f},\boldsymbol{g})\ ,\ (A\boldsymbol{f},\boldsymbol{g})=(\boldsymbol{f},A\boldsymbol{g})=b(\boldsymbol{f},\boldsymbol{g})\ \Rightarrow\ (a-b)(\boldsymbol{f},\boldsymbol{g})=0$$

から $(\boldsymbol{f},\boldsymbol{g})=0$ となって、異なる固有値を持つ固有ベクトルは直交することになります。このように対称演算子は固有値が実数という性質を持っているので、対称演算子をエルミート演算子としていいように思えます。しかし、これは固有値が実数と言えるだけで、固有値が必ず存在するとは言っていません。固有値が存在するという性質を加えるために自己共役演算子が出てきます。これはスペクトル定理と関連します。

特に、有限次元ヒルベルト空間では対称演算子の固有値は存在し、無限次元ヒルベルト空間では存在するとは限らないという面倒な性質を持っています。しかし、通常の量子力学では固有値は存在するのが前提 (そうなるように作った) になっているので気にとめませんし、ブラケット表記では固有値を持つ行列として扱うので、余計に気にする必要性が出てきません。

対称演算子の関係がヒルベルト空間全体で成立していれば A は自己共役演算子になります。このとき A は有界 (bounded) です (有界な対称演算子)。有界はノルムに対して

$$\|A\boldsymbol{f}\|\leq c\|\boldsymbol{f}\|$$

となっていることです (c は定数)。これを素直に受け止めたのが、量子力学でのエルミート演算子の定義です。実際に、ブラケットの内積

$$(A^\dagger\boldsymbol{g},\boldsymbol{f})\ \Rightarrow\ \langle A^\dagger g|f\rangle=\langle f|A^\dagger g\rangle^*=\langle f|A^\dagger|g\rangle^*$$
$$(\boldsymbol{g},A\boldsymbol{f})\ \Rightarrow\ \langle g|A|f\rangle$$

と対称演算子の定義から

$$\langle f|A|g\rangle^* = \langle g|A|f\rangle$$

という量子力学でのエルミート演算子の定義が出てきます (ブラケットはヒルベルト空間全体で定義されている)。これを行列と同じように扱うことで、自動的に $A = A^\dagger$(エルミート行列) も出てきて、自己共役演算子となります。これを雑に広げた言い方をすれば、自己共役演算子ならエルミート行列と同じように扱えるということです。

というわけで、量子力学をやる上では対称演算子、自己共役演算子を区別せずに、自己共役演算子として、それをまとめてエルミート演算子と呼んだ方が便利ですし、害はほとんどありません (何も気にせずにエルミート演算子の定義を $A^\dagger = A$ として、この性質を使っている)。しかし、数学では対称演算子と自己共役演算子を区別することで、ヒルベルト空間の理論を作っています。

ついでに、この手の話で出てくる自己共役拡大 (self adjoint extension) についても簡単に触れておきます。これは対称演算子を自己共役演算子へ対応させることを指し、これが存在すれば対称演算子が自己共役演算子になっていることになります。簡単に言えば、自己共役演算子になる定義域を求めるという作業です。対称演算子と確認するのは簡単でも、そこからすぐに自己共役演算子になっているかは分からないことが多いです。

拡大から自己共役演算子になるための関係を見ておきます。ヒルベルト空間での演算子 A, B に対して、定義域が $D(A) \subset D(B)$ のように与えられていて、$D(A)$ の領域において

$$A\boldsymbol{f} = B\boldsymbol{f}$$

が成立するとき、B を A の拡大 (extension) と言います。つまり、A の定義域に揃えれば等しくなる演算子が B ということです (対称演算子では $A^\dagger$ が A の拡大になっている)。ここで A, B を対称演算子とします。B が対称演算子なら $B \subset B^\dagger$ なので

$$A \subset B \subset B^\dagger$$

そして、証明は省きますが共役演算子は $A \subset B$ なら

$$A^\dagger \supset B^\dagger$$

というように与えられるので

$$A \subset B \subset B^\dagger \subset A^\dagger$$

これから、B が自己共役なら

$$A \subset B = B^\dagger \subset A^\dagger$$

となります。これが成立すれば対称演算子 A の拡大 B は自己共役演算子で、自己共役拡大と呼ばれます。これを調べていくことで、自己共役演算子かを判定する定理が出てきます。

ちなみに、対称演算子の自己共役拡大が 1 つに決まる場合を本質的自己共役 (essentially self-adjoint) と言います。例えば、ある定義域で対称演算子が一意的に自己共役演算子として与えられるなら本質的自己共役です。