岩波講座 現代物理学の基礎
量子力学 I 第 4 章
の誤りについて

北野 正雄

京都大学大学院工学研究科
615-8510 京都市西京区京都大学桂

2021 年 1 月 6 日

1 はじめに

文献 [1] で指摘したように, 岩波講座 現代物理学の基礎 (第 2 版) 量子力学 I, 第 4 章のブラケット記法の扱いには決定的な誤りがある [2]. 文献 [1] では, より一般的に内積との折衷記法の問題点を指摘することに重点をおいたこともあって, すべての誤り箇所を指摘できなかった. 初心者がこれらを修正しながら読むことは容易ではないので, ここで逐一指摘するとともに, それぞれ修正例を示す. また, なぜこのような一連の誤りが生じたのかについても考える.

2 誤りの修正例

1. 194 ページ下 12 行目:

   > この K 上の線形汎関数の全体なる線形空間を K の~~共役~~双対空間とよび K^* と記す習慣である.

   慣習的には必ずしも誤りとはいえないが, この文脈では双対と共役の概念をはっきり分けることが重要である.

2. 195 ページ, 10 行目:

   > 仮定 1 と (4.2.1) から $f_{\alpha|\psi\rangle} = \alpha^* f_{|\psi\rangle}$ となる (ただし f_ψ をていねいに $f_{|\psi\rangle}$ と書いた). ~~これはブラ記法では書きにくいが~~つまり, $\alpha|\psi\rangle$ の共役~~を仮に~~ ~~$\{\langle\psi|\alpha\}$と書けば,$\{\langle\psi|\alpha\} = \alpha^*\langle\psi|$~~ は $\alpha^*\langle\psi|$ となる. そして
   >
   > $$f_{\alpha|\psi\rangle+\beta|\varphi\rangle}(|\chi\rangle)\ \cancel{\{\langle\psi|\alpha+\langle\varphi|\beta\}|\chi\rangle} = \alpha^*\langle\psi|\chi\rangle + \beta^*\langle\varphi|\chi\rangle \quad (4.1.4)$$
   >
   > すなわち, $\alpha|\psi\rangle + \beta|\varphi\rangle$ の共役は $\alpha^*\langle\psi| + \beta^*\langle\varphi|$ となるが, この事実を “(4.1.3) は $|\psi\rangle$ の関数と見たとき**反線形**である” と言い表す, 汎関数 $\langle\psi|$ が $\alpha|\chi\rangle$ でとる値をていねいに $\langle\psi|\{\alpha|\chi\rangle\}$ と書けば, $\langle\psi|\{\alpha|\chi\rangle\} =$ $\cancel{\{\langle\psi|\alpha^*\}|\chi\rangle}$ $f_{\alpha^*|\psi\rangle}(|\chi\rangle)$ となることに注意しよう.

ここで無理に $\alpha|\psi\rangle$ の共役を $\{\langle\psi|\alpha\}$ と置いたところが誤りの原因となっている．すでに，$|\psi\rangle$ に共役な汎関数を $f_{|\psi\rangle}$ と表し，$f_{\alpha|\psi\rangle} = \alpha^* f_{|\psi\rangle}$ を示しているのだから，$\alpha|\psi\rangle$ の共役は $\alpha^*\langle\psi|$ と書けばよい．ここで「仮に」導入された括弧記号は $\{\langle\psi|\alpha\} \neq \alpha\langle\psi|$ であり，演算の優先度を指示する通常の括弧 $\{\}$ やスカラー倍の交換可能性と両立しないものである．以降，括弧に特殊な意味を持たせる必要がないように，修正を施す．また，節を改めて，この特殊な記法の起源について考察を行う．

3. 197 ページ，下 10 行にミスプリントがある；(誤) (4.2.3)，(正) (4.2.4)．新しい版では修正されている．

4. 197 ページの最後の行:

   ケット $\hat{A}^\dagger|\psi\rangle$ に共役なブラを $\cancel{\{\langle\psi|\hat{A}^\dagger\}}$ $\{\langle\psi|\hat{A}\}$，または $\langle\hat{A}^\dagger\psi|$ と書けば，(4.2.4) は

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

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

   ここでも「仮の」括弧 $\{\}$ が使われている．やはり，$\{\langle\psi|\hat{A}\} = \langle\psi|\hat{A}^\dagger \neq \langle\psi|\hat{A}$ であり，演算の優先度を指示する通常の括弧や演算子の後置記法と両立しないものである．

5. 198 ページ 3 行目:

   さて，線形演算子 $\alpha\hat{A}$ の共役はどうなるか，(4.2.4) に当たる式を書いてみると，$\langle\psi|\{\alpha\hat{A}|\chi\rangle\} = \langle\varphi'|\chi\rangle$，つまり，$|\varphi'\rangle = (\alpha\hat{A})^\dagger|\psi\rangle$．一方，(4.2.6) の記号法で，

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

   これらから，$\langle\varphi'| = \alpha\langle\varphi|$，つまり，$|\varphi'\rangle = \alpha^*|\varphi\rangle = \alpha^*\hat{A}^\dagger|\psi\rangle$． ~~後段で~~ブラ $\alpha\langle\psi|$ がケット $\alpha^*|\psi\rangle$ の共役であることを用いた．この結果から，

   $$(\alpha\hat{A})^\dagger = \alpha^*\hat{A}^\dagger \qquad (4.2.7)$$

6. 198 ページ，上 13 行:

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

7. 198 ページ下から 11 行:

   演算子 $\hat{A}$ が自己共役 ~~$\hat{A}^\dagger = \hat{A}$ ならば，~~かどうかによらず，(4.2.6) は簡単に $\langle\psi|\hat{A}|\chi\rangle$ として誤解を生じない．この $\hat{A}$ はケットに作用すると見てもよいし，ブラに作用すると見てもよいのである．Dirac の記号法~~が力を発揮するのはこういうときだ~~は，演算子が自己共役かどうかによらず，つねに力を発揮する．

8. 199 ページ，上 12 行:

   異なる固有値に属するする固有ベクトルがあれば直交する．すなわち，ν と ν' が同じでも異なっても

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

これは, 自己共役な $\hat{A}$ ~~はケット側に作用させてもブラ側に作用させてもよいことから~~に関しては, 固有ケット $|a',\nu\rangle$ の共役ブラ $\langle a',\nu|$ が右から作用する演算子 $\hat{A}$ の固有値 a' の固有ブラになっていることが本質的である. すなわち, 一般の演算子の場合には $\hat{A}|a',\nu\rangle = a'|a',\nu\rangle$ から $\langle a',\nu|\hat{A}^\dagger = a'^*\langle a',\nu|$ がいえるが, 自己共役の場合には, さらに $\langle a',\nu|\hat{A} = a'\langle a',\nu|$ がいえる. これより,

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

を得て, 右辺同士の差をつくれば証明される.

自己共役でない演算子も, ケット側に作用させてもブラ側に作用させてもよいので, 正しい証明になっていない.

3 誤りの原因

これまで見てきたように, 共役関係に関する部分に多くの誤りが含まれている. 一連の誤りの原因は共役関係を明示的に表現する適切な記法を導入しなかったことにある.

中身が同じブラとケットは互いに共役であるという暗黙のルールのおかげで, 共役関係を明示的に表す必要は少ない. そのような場合には, 共役関係を

$$|\psi\rangle \overset{\dagger}{\leftrightarrow} \langle\psi|, \quad あるいは, \quad |\psi\rangle^\dagger = \langle\psi|, \quad \langle\psi|^\dagger = |\psi\rangle \tag{1}$$

などと表わすのがよい. これらを用いると,

$$\alpha|\psi\rangle \overset{\dagger}{\leftrightarrow} \alpha^*\langle\psi|, \quad \hat{A}|\psi\rangle \overset{\dagger}{\leftrightarrow} \langle\psi|\hat{A}^\dagger \tag{2}$$

あるいは

$$(\alpha|\psi\rangle)^\dagger = \alpha^*\langle\psi|, \quad (\hat{A}|\psi\rangle)^\dagger = \langle\psi|\hat{A}^\dagger, \tag{3}$$

などが自然に表せる.

これらに相当するものとして, 文献 [2] では, 前節の 2. におけるように, $|\psi\rangle \overset{\dagger}{\leftrightarrow} f_{|\psi\rangle} = \langle\psi|$ や,

$$\alpha|\psi\rangle \overset{\dagger}{\leftrightarrow} \{\langle\psi|\alpha\}, \quad \hat{A}|\psi\rangle \overset{\dagger}{\leftrightarrow} \{\langle\psi|\hat{A}\}, \tag{4}$$

が導入されている.

この「仮の」括弧の働きを認め, 一貫して用いれば, ここで指摘した誤りの多くは正当化される. おそらく著者の意図もそのようなものだと考えられる. しかし, 同じ記号がケットを囲むのにも使われており, 単なる演算順序のためのものと区別されていない. 特に,

$$\begin{aligned}\hat{A}|\psi\rangle \overset{\dagger}{\leftrightarrow} \{\langle\psi|\hat{A}\} &= \langle\psi|\hat{A}^\dagger \\ &\neq \langle\psi|\hat{A}\end{aligned} \tag{5}$$

といった計算規則は極めて不自然である. その結果として, 前節の 7. および 8. のように記法の問題として片付けられない誤りに陥っているのである.

この「仮の」括弧は, 内積との折衷記法に近い考え方である;

$$\hat{A}|\psi\rangle = |\hat{A}\psi\rangle \overset{\dagger}{\leftrightarrow} \langle\hat{A}\psi| = \{\langle\psi|\hat{A}\} \tag{6}$$

つまり, $\langle\psi|\hat{A}\chi\rangle = \langle\hat{A}^\dagger\psi|\chi\rangle$ に対応して,

$$\langle\psi|\{\hat{A}|\chi\rangle\} = \{\langle\psi|\hat{A}^\dagger\}|\chi\rangle \tag{7}$$

と書くのである. このような危うい記法を仮りに導入して, 本来のブラケット記法に近づける努力をしているのだが, 折衷記法の方が間違いが入る可能性はずっと低い[1]. 前節の 7. の記述を折衷記法にあてはめると, 「$\langle\psi|\hat{A}\chi\rangle = \langle\hat{A}^\dagger\psi|\chi\rangle$ において, $\hat{A}$ が自己共役ならば, χ に作用すると見てもよいし, ψ に作用すると見てもよい. 折衷記法が力を発揮するのはこういうときだ. 」となるが, このおかしさは誰でもすぐに気がつくだろう.

いずれにせよ, 欠如しているのは, ブラに対する演算子が, “無条件に” 後ろから作用するという考えである. Dirac の教科書 [3] には以下のように明記されている.

> $\hat{A}$ をブラ $\langle\psi|$ に施した結果得られるブラを表す記号としては $\langle\psi|\hat{A}$ が適当である[2]. なぜならこの記号を用いると $\langle\psi|\hat{A}$ を定義する方程式は, $|\chi\rangle$ を任意のケットとして
>
> $$\{\langle\psi|\hat{A}\}|\chi\rangle = \langle\psi|\{\hat{A}|\chi\rangle\}$$
>
> となるが[3], これは単に $\langle\psi|$, $\hat{A}$, $|\chi\rangle$ の 3 重の積について掛け算の結合の公理を表したものであるからである. したがって一般的な規則として, ブラと 1 次演算子との積ではブラはいつでも左側に置くものとする. こうなると $\langle\psi|$, $\hat{A}$, $|\chi\rangle$ の 3 重の積を, 括弧を取り去って簡単に $\langle\psi|\hat{A}|\chi\rangle$ と書くことができる.

これに対応する記述は文献 [2] には見当たらない[4]. これを補うことで, 修正は完了する.

参考文献

[1] 北野正雄: 日本物理学会誌 **68**, 239 (2013)

[2] 湯川秀樹，豊田利幸 (編): 「現代物理学の基礎 (第 2 版) 3, 量子力学 I」 (岩波書店, 1972) 第 4 章, pp. 194–199. 復刻版が 2011 年に発刊された.

[3] P.A.M. Dirac (著), 朝永振一郎 他 (訳): 「量子力学 原著第 4 版」 (岩波書店, 1968) 第 II 章, p. 32.

[1] 文献 [2] の記法は, 折衷記法と本来のブラケット記法の折衷であると考えられる.
[2] 記号はここでの議論に合わせるために少し変更した.
[3] ここの括弧は演算の優先度を示す通常のものである.
[4] それどころか, 両立しないように見える式 (7) が導入されている.