Rigged Hilbert Space とブラケット記法

北野 正雄

京都大学工学研究科

2014 年 1 月 11–12 日

第 3 回 QUATUO 研究会
高知工科大学

20140113

Dirac のブラケット記法 $\langle\psi|\hat{A}|\chi\rangle$

前回の復習

- 量子論における標準言語
- 基底に依存しない記述が可能 (成分より実体)
- スペクトルが離散, 連続どちらの場合も統一的に扱える
- 式の見通しがよく, 計算が簡単になる
- 双対構造との親和性　(内積ではなく)

Dirac

In mathematical thoeries the question of notation, while not of primary importance, is yet worthy of careful consideration, since a good notation can be of great value in helping the development of a theory, by making it easy to write down those quantities or combination of quantities that are important, and difficult or impossible to write down those that are unimportant.

P.A.M. Dirac: “A new notation for quantum mechanics,” Math. Proc. Cambridge Phil. Soc. **35**, 416 (1939)

離散 vs 連続

- **ブラケット記法は、離散、連続スペクトルを統一的に扱える**

$\hat{A}\lvert e_i\rangle = a_i \lvert e_i\rangle$	$\hat{A}\lvert a\rangle = a\lvert a\rangle$	**固有値問題**
$\lvert\psi\rangle = \sum_{i\in I} c_i \lvert e_i\rangle$	$\lvert\psi\rangle = \int_A \mathrm{d}a\, \psi(a)\lvert a\rangle$	**展開**
$c_i = \langle e_i\lvert\psi\rangle$	$\psi(a) = \langle a\lvert\psi\rangle$	**確率振幅**
$\langle e_i\lvert e_j\rangle = \delta_{ij}$	$\langle a\lvert b\rangle = \delta(a-b)$	**正規直交性**
$\sum_{i\in I} \lvert e_i\rangle\langle e_i\rvert = \hat{1}$	$\int_A \mathrm{d}a\, \lvert a\rangle\langle a\rvert = \hat{1}$	**完全性**
$\sum_{i\in I} \lvert e_i\rangle a_i \langle e_i\rvert = \hat{A}$	$\int_A \mathrm{d}a\, \lvert a\rangle a \langle a\rvert = \hat{A}$	**スペクトル分解**

- **デルタ関数の存在が気にかかるが、**Dirac **は正にこの目的のために導入した。**

量子論の 2 つの道　— von Neumann vs Dirac

- von Neumann
  - 無限次元 Hilbert 空間論の精密化— 作用素のスペクトル分解
  - 関数論から演算子代数へ
- Dirac
  - デルタ関数の導入　— 非数学的
    後に Schwartz らによって超関数として正当化
  - ブラケット記法　— 線形代数、双対性

von Neumann 流

- **量子力学の数学的基礎　— ヒルベルト空間（無限次元）の線形作用素の一般固有値問題** (1932)　**数学的厳密性**
- **自己共役作用素 $\hat{A}$ に対して、射影演算子の族 $\{\hat{E}(\lambda)|\lambda \in \mathbb{R}\}$ (単位の分解) が存在して**

$$\hat{A} = \int_{-\infty}^{\infty} \lambda \, \mathrm{d}\hat{E}(\lambda), \quad (\textbf{連続＋離散スペクトル})$$

$$\mathrm{Domain}(\hat{A}) = \left\{ f \in \mathcal{L}^2(\mathbb{R}) \,\middle|\, \int_{-\infty}^{\infty} |\lambda|^2 ||\mathrm{d}\hat{E}(\lambda) f||^2 < \infty \right\}$$

- "I would like to make a confession which may seem immoral: I do not believe absolutely in Hilbert space no more."
(von Neumann to Birkhoff, 1935)
- **ヒルベルト空間を棚上げし、代数的アプローチに転換**

Dirac 流

- Principles of Quantum Mechanics (1930, 1935, 1947, 1958)
  - **デルタ関数の導入　（連続スペクトル）　物理的考察**
  - **ブラケット記法　（連続＋離散スペクトル、双対構造）**
- **デルタ関数の数学的正当化**
  - L. Schwartz, **超関数の理論** (1957–59)
    急減少関数空間 $\mathcal{S}$ **とその双対空間** $\mathcal{S}^*$　**超関数は** $\mathcal{S}^*$ **のメンバー**
  - I.M. Gel'fand *et al.*, **一般化関数**　(1960)
    Rigged Hilbert space, Gel'fand triplet: $\Phi \subset \mathcal{H} \subset \Phi^*$, Φ: **核型空間**
- **超関数の理論は関数解析の言葉で語られており、ブラケット記法との融合は未完**
- **試みはいくつかあるがいずれも説得性に乏しい**

今日の話題

- ブラケット記法と Rigged Hilbert Space の融合を目指す
- 準備が全くできていないので、その前段でお茶を濁します。
- 連続スペクトルの系の問題点を眺めるために
  - 離散（無限）系から連続系への移行
    スケーリング、物理次元
  - 波束　vs　特異関数（平面波、デルタ関数)
    現実と理想の関係

素朴な連続化

- 1 次元空間を幅 Δx で離散化し、各区間に離散的な基底 $|n\rangle$ を割当

$$|\psi\rangle = \sum_{n=-\infty}^{\infty} u_n|n\rangle, \quad \sum_{-\infty}^{\infty} |u_n|^2 = 1$$

$\Delta x \to 0,\ x_n = n\Delta x \to x$ に対して、$u_n \to 0$ だが、ψ_n は有限

$$\psi_n := \frac{u_n}{\sqrt{\Delta x}} \quad \to \quad \psi(x) \quad \overset{\text{SI}}{\sim} \frac{1}{\sqrt{\mathrm{m}}}$$

- 基底 $|n\rangle$ もとりあえず同様にスケールさせる（発散することに注意）

$$|x_n\rangle := \frac{|n\rangle}{\sqrt{\Delta x}} \quad \to \quad |x\rangle \quad \overset{\text{SI}}{\sim} \frac{1}{\sqrt{\mathrm{m}}}$$

- $\psi_n|x_n\rangle \overset{\text{SI}}{\sim} 1/\mathrm{m}$ が長さあたりの量となり、状態 $|\psi\rangle$ は積分で表される

$$|\psi\rangle = \sum_{n=-\infty}^{\infty} \psi_n|x_n\rangle\Delta x \quad \to \quad \int_{-\infty}^{\infty} \psi(x)|x\rangle \mathrm{d}x \quad \overset{\text{SI}}{\sim} 1$$

素朴な連続化 — デルタ関数

- **基底の完備性**

$$\hat{1} = \sum_{n=-\infty}^{\infty} |n\rangle\langle n| = \sum_{n=-\infty}^{\infty} |x_n\rangle\langle x_n|\Delta x \quad \to \quad \int_{-\infty}^{\infty} |x\rangle\langle x|\mathrm{d}x$$

- **基底の正規直交性**

$$\langle x_{n'}|x_n\rangle = \frac{\langle n'|n\rangle}{\Delta x} = \frac{\delta_{n',n}}{\Delta x} \quad \to \quad \langle x'|x\rangle = \delta(x'-x) \quad \sim \mathrm{m}^{-1}$$

これは、次のようにして確かめられる。

$$\int_{-\infty}^{\infty} \langle x'|x\rangle \mathrm{d}x' \sim \sum_{n'=-\infty}^{\infty} \langle x_{n'}|x_n\rangle \Delta x = \sum_{n'=-\infty}^{\infty} \delta_{n',n} = 1$$

- **スケーリングの重要性**

素朴な連続化 — 位置の演算子

- **離散系における番地の演算子**

$$\hat{n} = \sum_{n=-\infty}^{\infty} n|n\rangle\langle n|$$

- **位置の演算子**

$$\hat{n}\Delta x = \sum_{n=-\infty}^{\infty} (n\Delta x)|x_n\rangle\langle x_n|\Delta x \quad \rightarrow \quad \hat{x} = \int_{-\infty}^{\infty} x|x\rangle\langle x|\mathrm{d}x$$

素朴な連続化 — 2 準位系との対応

- **パウリ演算子との対応**

$$\hat{\sigma}_3 = |+\rangle\langle +| - |-\rangle\langle -| \qquad \hat{n} = \hat{k}_3 = \sum_{n=-\infty}^{\infty} n|n\rangle\langle n|$$

$$\hat{\sigma}_1 = |+\rangle\langle -| + |-\rangle\langle +| \qquad \hat{k}_1 = \frac{1}{2}\sum_{n=-\infty}^{\infty} \left(|n+1\rangle\langle n| + |n\rangle\langle n+1|\right)$$

$$\hat{\sigma}_2 = \frac{1}{\mathrm{i}}\left(|+\rangle\langle -| - |-\rangle\langle +|\right) \qquad \hat{k}_2 = \frac{1}{2\mathrm{i}}\sum_{n=-\infty}^{\infty} \left(|n+1\rangle\langle n| - |n\rangle\langle n+1|\right)$$

- $\Delta x \to 0$ **の極限**

$$\hat{k}_3 \Delta x = \hat{n}\Delta x \quad \to \quad \hat{x}$$

$$\hat{k}_1 \quad \to \quad \hat{1}$$

$$\hat{k}_2/\Delta x \quad \to \quad \mathrm{i}\widehat{\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}}$$ **微分演算子**

素朴な連続化 — 微分演算子

- $\hat{k}_2/\Delta x$ の極限を求める。任意の $|\psi\rangle = \int \psi(x)|x\rangle \mathrm{d}x$ に作用させると、

$$\frac{\hat{k}_2}{\Delta x}|\psi\rangle = \frac{\mathrm{i}}{2\Delta x}\sum_{n'}\sum_{n}|n'\rangle\left(\delta_{n'+1,n} - \delta_{n',n+1}\right)\langle n|\psi\rangle$$

$$= \mathrm{i}\sum_{n'}|x_{n'}\rangle\frac{\psi_{n'+1} - \psi_{n'-1}}{2\Delta x}\Delta x$$

$$\to \quad \mathrm{i}\int\frac{\mathrm{d}\psi}{\mathrm{d}x}|x\rangle\mathrm{d}x$$

すなわち、

$$\frac{\hat{k}_2}{\Delta x} \quad \to \quad \mathrm{i}\widehat{\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}} = \mathrm{i}\int \mathrm{d}x' \int \mathrm{d}x |x'\rangle\delta'(x'-x)\langle x| = -\frac{\hat{p}}{\hbar}$$

- **素朴な連続化は初等的だが有用である。ただし、スケーリングや次元に配慮が必要である。**

素朴な連続化 — 交換関係

- $\hat{k}_1 \to \hat{1}$ なので、考慮すべき交換関係は $[\hat{n}, \hat{k}_2]$ のみである。簡単な計算から、

$$
\begin{aligned}
[\hat{n}\Delta x, \hat{k}_2/\Delta x] = [\hat{n}, \hat{k}_2] &= \frac{1}{\mathrm{i}}\hat{k}_1 \\
\to [\hat{x}, \widehat{\mathrm{d}/\mathrm{d}x}] &= \frac{1}{\mathrm{i}}\hat{1}
\end{aligned}
$$

- **正準交換関係が得られた**

素朴な連続化 — まとめ

- **素朴な連続化はそれなりに有効である**
- **ただし、スケーリング、次元に対する配慮が必要**

$$|\psi\rangle \overset{\mathsf{SI}}{\sim} 1, \quad \langle\psi| \overset{\mathsf{SI}}{\sim} 1, \quad |x\rangle \overset{\mathsf{SI}}{\sim} \frac{1}{\sqrt{\mathrm{m}}}, \quad \langle x| \overset{\mathsf{SI}}{\sim} \frac{1}{\sqrt{\mathrm{m}}},$$

であることから、次のような関係が得られる

$$\psi(x) = \langle x|\psi\rangle \overset{\mathsf{SI}}{\sim} \frac{1}{\sqrt{\mathrm{m}}}, \quad \langle x'|x\rangle = \delta(x'-x) \overset{\mathsf{SI}}{\sim} \frac{1}{\mathrm{m}},$$

$$\int \mathrm{d}x\, |x\rangle\langle x| \overset{\mathsf{SI}}{\sim} 1$$

波束と平面波

- 平面波 $\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega t}\mathrm{e}^{\mathrm{i}kx}$ はよい性質 (並進対称性) をもっている
- その空間部分 $\{\mathrm{e}^{\mathrm{i}kx}\}$ は波動関数の展開基底として利用される
  - 本来 1 に正規化されるべき 2 乗積分が発散　$\notin \mathcal{L}^2(\mathbb{R})$
  - 空間的に無限の広がりは非現実
- 空間的なサイズが有限な波, すなわち波束を考える波束は波数がやや異なった波の重ね合わせ
- 2 乗積分が 1 になるように正規化することができる.

波束の導入

- **波束の元になる関数** $g(\,) \in \mathcal{L}^2(\mathbb{R})$:

$$\xi \in \mathbb{R} \mapsto g(\xi) \in \mathbb{C}$$

原点付近 ± 1 **程度の広がりと正規化条件**

$$\int_{-\infty}^{\infty} |g(\xi)|^2 \mathrm{d}\xi = 1$$

- **波数の次元をもつ量** K, κ **に対して**

$$h_\kappa(K) := \frac{1}{\sqrt{\kappa}} g\left(\frac{K}{\kappa}\right) \ \overset{\text{SI}}{\sim} \ \sqrt{\mathrm{m}}$$

は波数空間の原点を中心として $\pm\kappa$ **程度に広がった関数を与える**.
係数を $1/\sqrt{\kappa}$ **とすることによって**, **正規化**

$$\int_{-\infty}^{\infty} |h_\kappa(K)|^2 \mathrm{d}K = 1$$

波束の構成

- **フーリエ変換**

$$H_{1/\kappa}(x) = \int_{\infty}^{\infty} h_\kappa(K)\mathrm{e}^{\mathrm{i}Kx}\mathrm{d}K \overset{\mathrm{SI}}{\sim} 1/\sqrt{\mathrm{m}}$$

実空間で, $1/\kappa$ **程度広がり**. **正規化されている**;

$$\int_{-\infty}^{\infty} |H_{1/\kappa}(x)|^2 \mathrm{d}x = 1$$

$H_{1/\kappa}(x)$ **は実空間における波動関数の次元をもっている**.

$$H_w(x) = \frac{1}{\sqrt{w}} G\left(\frac{x}{w}\right), \quad w = 1/\kappa, \quad G = \mathcal{F}g$$

位置と運動量の固有関数と波束

w は波束の空間拡がりを表す.

	$\hat{x}$ の固有状態 $\vert x'\rangle$	一般的波束 $\vert \psi\rangle$	$\hat{k}$ の固有状態 $\vert k'\rangle$
空間拡がり Δx	0	w	∞
波数拡がり Δk	∞	$1/w$	0
x 表示成分	$\delta(x-x')$	$\psi(x)$	$(2\pi)^{-1/2}\mathrm{e}^{\mathrm{i}k'x}$
x 成分の大きさ	$\infty \ (\sim 1/w)$	$1/\sqrt{w}$	1
k 表示成分	$(2\pi)^{-1/2}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}x'k}$	$\phi(k)$	$\delta(k-k')$
k 成分の大きさ	1	$\sqrt{w}$	$\infty \ (\sim w)$

波束のスケーリングと特異関数

- **長さに関するスケーリングを考慮した波束**

$$\psi_w(x) = \tilde{\psi}_w(x)\mathrm{e}^{\mathrm{i}kx}, \quad \tilde{\psi}_w(x) = \frac{1}{\sqrt{w}}G(x/w) \overset{\text{SI}}{\sim} \frac{1}{\sqrt{\mathrm{m}}}$$

正規化条件: $$\int_{-\infty}^{\infty} |\psi_w(x)|^2 \mathrm{d}x = \int_{-\infty}^{\infty} |G(\eta)|^2 \mathrm{d}\eta = 1.$$

幅の狭い波束 $\neq$ デルタ関数

- **波束の幅を小さくする極限** $w \to 0$: **波束の高さ（振幅）** $\sim 1/\sqrt{w}$

面積： $$\int_{-\infty}^{\infty} |\tilde{\psi}_w(x)| \mathrm{d}w \sim \frac{1}{\sqrt{w}} w = \sqrt{w} \to 0 \quad (\neq 1)$$

- **波束の幅** w **を単純に小さくした極限はデルタ関数ではない！**

$$\tilde{\psi}_w(x) \to 0 \quad (w \to 0)$$

- **デルタ関数にするためには, 余分に因子** $1/\sqrt{w}$ **をかける必要がある**.

$$\frac{1}{\sqrt{w}} \tilde{\psi}_w(x) \to \delta(x) \overset{\text{SI}}{\sim} 1/\mathrm{m} \quad (w \to 0).$$

幅の広い波束 $\neq$ 平面波

- 波束の幅 w を大きくする極限 $w \to \infty$: 波束の高さ $\sim 1/\sqrt{w}$
- 波束の幅 w を単純に広げた極限は平面波ではない！

$$\tilde{\psi}(x) \to 0 \quad (w \to \infty)$$

平面波に近づけるためには，　余分に因子 $\sqrt{w}$ をかける必要がある

$$\sqrt{w}\,\tilde{\psi}_w(x) \to \mathrm{e}^{\mathrm{i}kx} \ \overset{\text{SI}}{\sim} \ 1 \quad (w \to \infty)$$

波束 — まとめ

- 基底関数として標準的な $\delta(x)$, $\mathrm{e}^{\mathrm{i}kx}$ はいずれも, 波束の単純な極限ではない。
- これらの（特異）関数は $\hat{x}$, $\hat{p}$ の固有関数であるという性質を充足する代償として, 波束がつくる線形空間（2 乗可積分）の外にはみ出している。
- 展開の足場（基底）が空間の外にある。

2 乗可積分関数

- **一般に波動関数は 2 乗可積分：** $\psi(x) \in \mathcal{L}^2(\mathbb{R})\,(=\mathcal{H})$,

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\psi(x)|^2 \mathrm{d}x < \infty$$

- **確率解釈**

$$\mathrm{Prob}\{a < x < b\} = \int_a^b |\psi(x)|^2 \mathrm{d}x$$

- **問題点**
  - **各点の値が一意に決まらない。測度 0 の集合上で値を変えても、確率に影響はない　— 関数の同値類**
  - **微分できるとは限らない。運動量演算子を作用できない場合がある。**
  - $x\psi(x)$ **が 2 乗可積分とは限らない。位置演算子に関して閉じていない。**

連続スペクトル系の困難

- **定義域が限定**: $\mathrm{Domain}(\hat{A}) \subset \mathcal{H}$
- **値域がはみ出る**: $\mathcal{H} \subset \mathrm{Range}(\hat{A})$

cf. **有限次元の場合は、**$\mathrm{Domain}(\hat{A}) = \mathcal{H}$, $\mathrm{Range}(\hat{A}) \subset \mathcal{H}$

- **急減少関数の空間**　$\mathcal{S}(\mathbb{R})$
  — **無限回連続微分可能かつ、すべての導関数が急減少**

  すべての、$m, n \geq 0$　**に対して、**$\displaystyle\sup_{x\in\mathbb{R}} |x|^m |f^{(n)}(x)| < \infty$

- $\mathcal{S}(\mathbb{R}) \subset \mathcal{L}^2(\mathbb{R})$ **はベクトル空間であり、**$f \in \mathcal{S}(\mathbb{R})$ **なら**

$$f' = \frac{\mathrm{d}f}{\mathrm{d}x} \in \mathcal{S}(\mathbb{R}), \quad xf \in \mathcal{S}(\mathbb{R})$$

- **つまり、有限次元の場合のように**

$$\mathsf{Domain}(\hat{x}) = \mathsf{Domain}(\widehat{\mathrm{d}/\mathrm{d}x}) = \mathcal{S}(\mathbb{R}),$$

$$\mathsf{Range}(\hat{x}), \mathsf{Range}(\widehat{\mathrm{d}/\mathrm{d}x}) \subset \mathcal{S}(\mathbb{R})$$

が成り立ち、各点での値も定まるので、波動関数として望ましい性質を持つ　— **滑らかな波束**

急減少関数空間

- $\mathcal{S}(\mathbb{R})$ は $\mathcal{L}^2(\mathbb{R})$ で稠密
  — 近似可能性
- Fourier 変換：　$f \in \mathcal{S}(\mathbb{R})$ なら $\mathcal{F}f \in \mathcal{S}(\mathbb{R})$
  — 波数（運動量）空間の波束も急減少関数

ブラケット記法と Rigged Hilbert Space

J.-P. Antoine, Dirac Formalizem an Symmetry Problems in Quantum Mechanics. I., General Dirac Formalism, J. Math. Phys. **10**, 53 (1969).

来年はこの続きをお話できればと思います