4/12 金

§. Dirac のブラ・ケット記法　201110860 佐藤 拓磨

◎ 量子力学の基本方程式

量子力学における基本方程式は、

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(\mathbf{r},t) = H \psi(\mathbf{r},t)$$

というSchrödinger eq. である。

量子力学の概念として、物理量は確率的解釈を要求する。
物理量: θ に対応するエルミート演算子: $\hat{\theta}$ によって、
観測値: $\langle \theta \rangle$ は

$$\langle \theta \rangle \equiv \int d^3r\ \psi^* \hat{\theta} \psi$$

で求められる。

(但し、波動関数: ψ は、規格化条件

$$\int d^3r\ |\psi|^2 = 1$$

を満たしているとする。)

◎ 関数空間の内積

今、簡単のため 1次元を考える。
区間 $[a,b]$ において関数 $f(x)$, $g(x)$ があるとき、
関数の内積は次のように定義される

$$(f, g) = \int_a^b dx\ f^*(x)\ g(x) \qquad (※1)$$

この記法に従えば、波動関数の規格化条件は、
次のように書ける。

$$\int d^3r\ |\psi|^2 = \int d^3r\ \psi^*(\mathbf{r})\ \psi(\mathbf{r})$$

$$= (\psi, \psi)$$

(*1) において 次のように ブラケット記法を定義する。

$$(f, g) = \int_a^b dx\, f^*(x)\, g(x)$$

$$\equiv \langle f \mid g \rangle$$

◎ bra と ket

$|f\rangle$: ket vector

$\langle f|$: bra vector

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

今、

$$\hat{A} : f \longmapsto Af$$

という演算子: $\hat{A}$ があるとき、

ket vector : $|f\rangle$ に operator : $\hat{A}$ を作用させると、

$$|f\rangle \longmapsto |Af\rangle$$

となる。

これを operator : $\hat{A}$ の ket への作用という。

また、A の期待値（観測値）は、

$$\langle A \rangle = \langle \psi \mid A\psi \rangle$$

であり、一般に、

$$\langle f \mid Ag \rangle \equiv \langle f \mid \hat{A} \mid g \rangle$$

で定義される。

i.e.

A の期待値は、A に対応する operator : $\hat{A}$ を $\langle f|$ と $|g\rangle$ で挟むことで得られる。

演算子のエルミート共役演算子

Aに対して.
$\forall$関数: f, g があるとき. $A^\dagger$ は.

$$\langle A^\dagger f | g \rangle = \langle f | A g \rangle \quad \text{——— (*2)}$$

という性質がある。

(*2) の右辺は.

$$\langle f | A g \rangle = \langle f | \hat{A} | g \rangle \quad \text{——— (*3)}$$

(*3) の左辺は

$$\langle f | A g \rangle = \langle A^\dagger f | g \rangle \quad \text{——— (*4)}$$

(*3) と (*4) より.

$$\langle A^\dagger f | = \langle f | \hat{A}$$

である必要がある。

この要求より.

$$\langle A^\dagger f | \equiv (\hat{A}^\dagger | f \rangle)^\dagger = \langle f | (\hat{A}^\dagger)^\dagger$$

※ $(AB)^\dagger = A^\dagger B^\dagger$

であることを用いれば.

$$(\hat{A}^\dagger)^\dagger = \hat{A}$$

であることがわかる。

cf). エルミート演算子

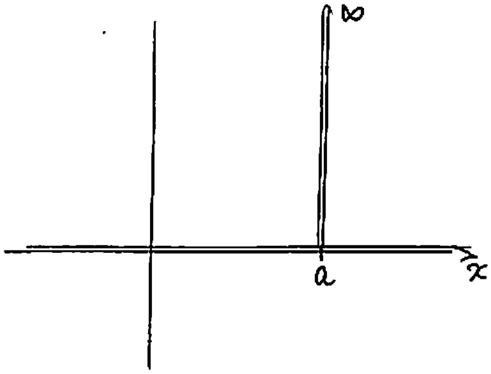
エルミート演算子とは.

$$\hat{A}^\dagger = \hat{A}$$

を満たすものである。
これを observable であるといい.
物理量に対応する演算子は. エルミートである。

◎ δ-関数

$$f(x) = \delta(x-a) = \begin{cases} +\infty & (x=a) \\ 0 & (\text{それ以外}) \end{cases}$$



今、δ-関数に対応する ket vector を

$$|\delta(x-a)\rangle = |a\rangle$$

と略して書くことにする。

(注 $|a\rangle$ とかいた時、常に $|\delta(x-a)\rangle$ を表わすわけではないことに注意)

任意の $f(x)$ について

$$\langle x|f\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dX \;\delta(X-x)\, f(X) = f(x)$$

とかける。

i.e.

$$\langle x|f\rangle = f(x)$$

更に言えば、

$$\langle x|y\rangle = \langle x|\delta(X-y)\rangle = \delta(x-y)$$

◎ 規格直交化された完全な関数列

関数列

$$\{\varphi_n(x)\}_{n=1,2,3,\cdots}$$

において

規格直交性とは、

$$\langle\varphi_n|\varphi_m\rangle = \int_a^b dx\, \varphi_n^*(x)\varphi_m(x) = \delta_{n,m} = \begin{cases} 1 & (n=m) \\ 0 & (\text{それ以外}) \end{cases}$$

であることをいう。

一方、"完全な"関数列とは：

$\forall$関数：$\psi(x)$ について

$$\psi(x) = \sum_n C_n \varphi_n(x)$$

と展開できるとき，$\{\varphi_n\}$は完全な関数列であるという。

このとき、

$$|\psi\rangle = \sum_n |\varphi_n\rangle C_n$$

であり、

$$\langle \varphi_m|\psi\rangle = \sum_n \langle \varphi_m|\varphi_n\rangle C_n$$

規格直交性より

$$= \sum_n \delta_{m,n} C_n$$

$$= C_m$$

$$C_n = \langle \varphi_n|\psi\rangle$$

を

$$|\psi\rangle = \sum_n |\varphi_n\rangle C_n$$

に代入して，

$$|\psi\rangle = \sum_n |\varphi_n\rangle\langle \varphi_n|\psi\rangle$$

i.e.

$$\sum_n |\varphi_n\rangle\langle\varphi_n| = 1 \qquad \text{——} \quad (*5)$$

であることがわかる。

これが完全性の条件である。

また、(*5) を $\langle x|$ と $|y\rangle$ ではさんでみると、

$$\langle x|\sum_n|\varphi_n\rangle\langle\varphi_n|y\rangle$$

$$= \sum_n \langle x|\varphi_n\rangle\langle\varphi_n|y\rangle$$

(*5) より

$$= \langle x|y\rangle$$

$$= \delta(x-y)$$

以上より，完全性の条件は次のようにも書ける。

$$\sum_n \varphi_n(x)\varphi_n^*(y) = \delta(x-y)$$

エルミート行列

(事実)

エルミート演算子の固有値は実である。

i.e.

$$\hat{A}^\dagger = \hat{A}$$

であり、

$$\hat{A}|a\rangle = |a\rangle a \qquad (但し、 a \in \mathbb{R})$$

[proof]

$$\langle a|a\rangle = 1$$

と $\langle a|$ が規格化されているとする。

今、$\hat{A}$ の固有値が λ, 固有ベクトルが $|a\rangle$ であるとする。

i.e.

$$\hat{A}|a\rangle = |a\rangle \lambda$$

このとき、

$$\begin{aligned}\langle a|\hat{A}|a\rangle &= \langle a|a\rangle \lambda \\ &= \lambda\end{aligned}$$

∵ 規格化条件

一方、

$$\begin{aligned}(\hat{A}|a\rangle)^\dagger &= \langle a|\hat{A}^\dagger \\ &= \langle a|\hat{A} \\ &= (|a\rangle\lambda)^\dagger \\ &= \lambda^*\langle a|\end{aligned}$$

よって、

$$\begin{aligned}\langle a|\hat{A}|a\rangle &= \lambda^*\langle a|a\rangle \\ &= \lambda^*\end{aligned}$$

∴

$$\lambda = \lambda^*$$

したがって、

λ は実である。

[q.e.d.]

(事実).

エルミート演算子の異なる固有値に対応する固有ベクトルは直交する

i.e.

$$\langle a|a'\rangle = 0 \qquad (a \neq a')$$

[proof]

$$\hat{A}|a\rangle = |a\rangle a$$
$$\hat{A}|a'\rangle = |a'\rangle a'$$

ただし、

$$\langle a'|\hat{A}^\dagger = \langle a'|\hat{A}$$
$$= a'^*\langle a'|$$
$$= a'\langle a'|$$

∴

$$\langle a'|Aa\rangle = \langle a'|(\hat{A}|a\rangle) = \langle a'|a\rangle a$$
$$\overset{\downarrow}{=} (\langle a'|\hat{A})|a\rangle$$
$$= a'\langle a'|a\rangle$$

∴

$$(a-a')\langle a'|a\rangle = 0$$

今, $a \neq a'$ ならば.

$$(a-a') \neq 0$$

∴

$$\langle a'|a\rangle = 0$$

[q.e.d.]

(事実).

交換するエルミート演算子は同時に対角化できる(同時固有状態をとれる)。

今、エルミート演算子：$\hat{A}, \hat{B}$ に対して.
固有値：a, b が対応しているとする。

i.e.

$$\hat{A}|a,b\rangle = a|a,b\rangle$$
$$\hat{B}|a,b\rangle = b|a,b\rangle$$

[proof]

今 $|a\rangle$: $\hat{A}$ の固有ベクトル として.

$$\langle a'|\hat{A}\hat{B}|a\rangle = \langle a'|\hat{B}\hat{A}|a\rangle$$

$\llcorner$ $a'\langle a'|\hat{B}|a\rangle$ $\qquad$ $\llcorner$ $\langle a'|\hat{B}|a\rangle a$

∴

$$(a'-a)\langle a'|\hat{B}|a\rangle = 0$$

if.

$a' \neq a$ ならば.

$$\langle a'|\hat{B}|a\rangle = 0$$

$\hat{A}$ に縮退がなければ.

$$\begin{pmatrix} \langle 1| \\ \langle 2| \\ \vdots \\ \langle a'| \\ \vdots \end{pmatrix} \hat{B} \left(|1\rangle, |2\rangle, \cdots, |a\rangle, \cdots\right)$$

$$= \begin{pmatrix} \langle 1|\hat{B}|1\rangle & & & 0 \\ & \langle 2|\hat{B}|2\rangle & & \\ & & \ddots & \\ & & & \langle a'|\hat{B}|a\rangle \\ 0 & & & & \ddots \end{pmatrix} \quad \text{—————} \; (*6)$$

i.e.

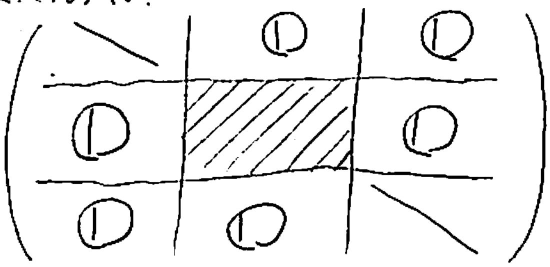
$$\hat{B}|a\rangle = |a\rangle b \quad , \quad |a\rangle \equiv |a, b\rangle$$

とかくことができる。

$\hat{A}$ に縮退があるときは、

$$\hat{A}|a, n\rangle = |a, n\rangle a \qquad (n = 1, 2, \cdots)$$

このとき.(*6) は.



となる。

したがって斜線部を今一度対角化しなければならない。
i.e.

$$\langle a,n|\hat{B}|a,m\rangle$$

を対角化する必要がある。

一方、

$$(\langle a,m|\hat{B}|a,n\rangle)^*$$

$$=\langle a,n|\hat{B}^\dagger|a,m\rangle$$

$$=\langle a,n|\hat{B}|a,m\rangle$$

∴
斜線部はエルミート行列である。
よって、
対角化が可能である。

$$\langle a,b'|\hat{B}|a,b\rangle = \delta_{b,b'}\, b$$

以上より、

$$\hat{A}\,|a,b\rangle = |a,b\rangle\, a$$

$$\hat{B}\,|a,b\rangle = |a,b\rangle\, b$$

[q.e.d]