量子力学のTips

〜座標表示と運動量表示について〜

KENZOU

2008年5月24日

♣ゴールデンウィークも過ぎたある暑い日，宇治川沿いの緑の樹林の間を自転車で駆け抜けてキャサリンが久しぶりにK氏を訪ねてきた。

- キャサリン：こんにちは〜Kさん，ずいぶんご無沙汰しています。
- K氏：やぁ〜キャサリン，ずいぶん久しぶりだね。血色のいい顔色をしてるじゃないか。元気はつらつといった感じだね。結構なことだ。ところでなにか用事でもあってきたのかい。ちょうどぼんやりしていたところだから用事は welcome だよ。
- キャサリン：ありがとう。折角のお休みのところ申し訳ないと思うんだけどご厚意に甘えるわ。実はね，最近量子力学を勉強してちょっと気になることがあって，スッキリしておきたいなと思っているの。
- K氏：そうなの。ところでその気になることって何なんだい。
- キャサリン：いわゆる x-表示とか p-表示とかいわれるものがあるじゃない。テキストには、その話題がでるまでは、波動関数は $\psi(x,t)$ とすつとか書かれていたのが，その話題に入ると、例えば x-表示では $\langle x\,|\psi(t)\rangle$ と表されると書かれているのだけど、そう書かれてもすぐにはピンとこないのよ。わざわざブラケット記号を使わなくても $\psi(x,t)$ の方がスッキリしていていいじゃないかなと思うの。それとブラケット記号の意味もいまいち掴めていないの。
- K氏：そうなんだ。たしかに普通テキストには波動関数を $\psi(x,t)$ と書いておいて，状態の表示の話にいたって $\langle x|\,\psi(t)\rangle$ とか $\langle p|\,\psi(t)\rangle$ という波動関数が登場してきて，ナ，ナンダこれは〜と混乱してしまうよね。また、ブラとかケットとかは慣れれば大変便利なものなんだが、慣れるまでは敷居が結構高いよね。まっ、そういうことならざっと量子力学の復習を兼ねて君の疑問を解いていこうか。
- キャサリン：ありがとう、助かるわ。

1　ブラとケット

n 次元 (複素) ベクトル空間 $\mathbf{V}$ の正規直交基底[1]を $\mathbf{e}_i (i=1,2,\cdots,n)$ とすると，ベクトル空間内の任意のベクトル $\mathbf{x}$ は

$$\boldsymbol{x} = x_1\mathbf{e}_1 + x_2\mathbf{e}_2 + \cdots + x_n\mathbf{e}_n \tag{1}$$

で表される。ベクトルの成分を縦に並べた列ベクトルをケットベクトル $|x\rangle$，ベクトルの成分の複素共役を横に並べた行ベクトル（転置複素共役）をブラベクトル $\langle x|$ と定義しよう。そうするとブラとケットは次のように表される[2]。

$$\text{ケットベクトル}\quad |x\rangle \equiv \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_n \end{pmatrix} \tag{2}$$

$$\text{ブラベクトル}\quad \langle x| \equiv (x_1^*, x_2^*, \cdots, x_n^*) \tag{3}$$

[1] 内積 $(\mathbf{e}_i \cdot \mathbf{e}_j) = \delta_{ij}$
[2] 以降ブラベクトル，ケットベクトルをそれぞれブラ，ケットということにする。

ここで、*は複素共役を表す。また、のちほど触れるが、2つのケット $|x\rangle$, $|y\rangle$ 内積を $\langle y|\,x\rangle$ と表すと

$$\langle y|\,x\rangle = (y_1,\, y_2,\, \cdots, y_n)\begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_n \end{pmatrix} = x_1y_1 + x_2y_2 + \cdots + x_ny_n \tag{4}$$

となる[3]。

1.1 ブラとケットの対応

物理量を表す演算子を $\mathbf{A}$ とすると、$\mathbf{A}$ はケットベクトル $|\phi\rangle$ に左から作用し、新たなケットベクトル $|\phi'\rangle$ を作る。

$$|\phi'\rangle = \mathbf{A}\,|\phi\rangle \tag{5}$$

一方、ブラベクトルには、右から作用し、新たなブラベクトル $\langle\varphi|$ をつくる。

$$\langle\varphi| = \langle\phi|\,\mathbf{A} \tag{6}$$

一般に、$|\phi'\rangle = \mathbf{A}\,|\phi\rangle$ の対になるブラベクトル $\langle\phi'|$ は $\langle\phi|\,\mathbf{A}$ ではないことに注意。$|\phi'\rangle = \mathbf{A}\,|\phi\rangle$ の対になるブラベクトルは $\langle\phi|\,\mathbf{A}^\dagger$ と表す。この関係を双対関係と呼ぶ。

$$|\phi'\rangle = \mathbf{A}\,|\phi\rangle \longleftrightarrow \langle\phi|\,\mathbf{A}^\dagger = \langle\phi'| \tag{7}$$

また、以下の代数が成立する。

$$|\phi\rangle^\dagger = \langle\phi| \tag{8}$$

$$\langle\phi|^\dagger = |\phi\rangle \tag{9}$$

$$(c_1\,|\phi\rangle_1 + c_2\,|\phi\rangle_2)^\dagger = c_1^*\,\langle\phi|_1 + c_2^*\,\langle\phi|_2 \tag{10}$$

$$(c_1\,\langle\phi|_1 + c_2\,\langle\phi|_2)^\dagger = c_1^*\,|\phi\rangle_1 + c_2^*\,|\phi\rangle_2 \tag{11}$$

$$\langle\phi|\,\psi\rangle^\dagger = |\psi\rangle^\dagger\,\langle\phi|^\dagger = \langle\psi|\,\phi\rangle \tag{12}$$

* を複素共役，† はエルミート共役を示すものとする。

1.2 ブラとケットの内積

適当な2つのベクトル a，b があったとする。その内積を次のように定義する。内積はスカラー量である。

$$\langle a|\,b\rangle = (\langle a|)\cdot(|b\rangle) \tag{13}$$

内積 $\langle a|\,b\rangle$ に対して次の2つの性質を要請する。

1. **ベクトルの順序を入れ替えると、複素共役となる。**

$$\langle a|\,b\rangle = \langle b|\,a\rangle^* \tag{14}$$

尚、自分自身との内積 $\langle a|\,a\rangle$ は実数となる。

2. **正値計量の要請**

$$\langle a|\,a\rangle \geq 0 \tag{15}$$

$\langle a|\,a\rangle$ はケット $|a\rangle$ のノルム[4]と呼ばれる。

[3] 積分表示で書けば $\langle\alpha|\,\beta\rangle = \int d\boldsymbol{x}\psi_\alpha^*(\boldsymbol{x},t)\psi_\beta(\boldsymbol{x},t)$
[4] ベクトルの長さのことで、負の長さというのはないから正値計量が要請される。

また、内積は、(13) の表現以外に、通常のベクトルの内積の公式

$$\mathbf{A}\cdot \mathrm{B} = \sum_{i=all} (\mathbf{A}\cdot \mathbf{e}_i)(\mathbf{e}_i \cdot \mathbf{B}) = A_1B_1 + A_2B_2 + A_3B_3 \tag{16}$$

からの類推でわかるように

$$\langle a|\, b\rangle = \sum_{i=all} \langle a|\, i\rangle \langle i|\, b\rangle \tag{17}$$

と書ける。ここで i は基底ベクトルで，異なる基底ベクトルは互いに直交するから、次の条件を満たす。

$$\langle i|\, j\rangle = \delta_{ij} = \begin{cases} 1 & (i = j) \\ 0 & (i \neq j) \end{cases}$$

(17) の表記は重要である。

♣ *Q&A* ———

- キャサリン：(17) は重要かも知れないけど、いきなり記号のオンパレードでは先が思いやられるわね。ところで、冒頭、ブラとケットがでてきたけど、ブラとケットというのは、物理的にはどう把握すればいいの？[-5pt]
- K氏：そうだね、その説明は特にしなかったね。ブラとかケットというは系の状態を表わす記号と捉えればいいんだ。いろんな状態があるわけで、各状態を状態 A、B、C、$\cdots$ とすると、ブラケットはその状態に対応して、ケットならば $|A\rangle$、$|B\rangle$、$|C\rangle$、$\cdots$、ブラでは $\langle A|$、$\langle B|$、$\langle C|\cdots$ 表される。このブラケット記法のメリットは追々わかってくると思うよ。ところで、物理量の測定というには、そのような状態に対してある観測をし、そこから何かしらの物理量を取りだすということなんだね。
先ほど、重要だといった (17) の物理的な意味を少し言っておくと、今 a と b の２つの状態があり、b から始まって a に終わる確率振幅は、b から基本状態の一つに移る確率振幅 $\langle i|\, b\rangle$ と、その基本状態から a に移る確率振幅 $\langle b|\, i\rangle$ の積で表される、ということなんだ。
- キャサリン：基本状態というのは、基本というから、先ほどでてきた正規直交基底ベクトルというものが相当するの？。
- K氏：そうなんだ。正規直交と完全性という条件を満たすものなんだが、完全性についてはのち程でてくるから聞き流してもらうとして、基本状態というのは、だから１個じゃないよね。上の式はそれらすべての基本状態についての和をとっているんだ。
- キャサリン：$\sum_{i=all}$ という奴ね。
- K氏：このあたりの詳しい話はまた後でやるから楽しみにしておいて。
- キャサリン：わかりました、それではお話を続けてくださる。

1.2.1 規格化

１つの状態に対応するブラベクトルあるいはケットベクトルを作る場合、ベクトルの方向だけが与えられているわけで、ベクトル自身には任意の数因子だけの不定さがある。この数因子をベクトルの長さが１になるように選ぶと便利である。この手続きを規格化と呼ぶ。

ゼロでない任意の大きさのノルムをもつ $|a'\rangle$ に対して

$$|a\rangle = \frac{|a'\rangle}{\sqrt{\langle a'|\, a'\rangle}}$$

をつくることで、規格化したケット $|a\rangle$ をつくることができる。規格化されたケットは

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

を満たす[5]。ここで留意すべきは、規格化しても状態に対応するケットはまだ完全には決まらないという点。というのは、絶対値 1 のかってな数 、つまり δ を実数として $e^{i\delta}$ というかってな数を掛けてもそのケットのノルムは変わらない。このような数のことを位相因子と呼ぶが、ケットは常に位相因子の不定性を伴っている[6]。

1.2.2 ブラとケットの外積

内積 $\langle a|\, b\rangle$ に対して外積を次のように定義する。

$$|a\rangle \langle b| \tag{18}$$

内積はスカラーとなったが、外積は演算子となる。ちなみに、(18) の右からケット $|\gamma\rangle$ を作用させると

$$(|a\rangle \langle b|)\, |\gamma\rangle = |a\rangle\, (\langle b|\, \gamma\rangle) = (\langle b|\, \gamma\rangle)\, |a\rangle \tag{19}$$

となる。内積 $\langle b|\, \gamma\rangle$ はスカラーとなるから、ケット $|a\rangle$ の前にもってくることができて、(19) の表式となる。外積演算子 $|a\rangle \langle b|$ はケット $|\gamma\rangle$ の方向をケット $|a\rangle$ の向きに変える働きをする。

1.2.3 射影演算子

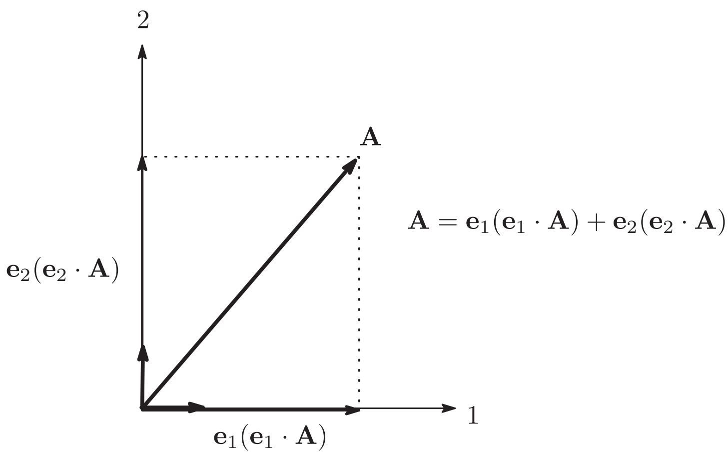
式 (17) から $\langle a|$ をはずした式を考える。

$$|b\rangle = \sum_{i=all} |i\rangle \langle i|\, b\rangle \tag{20}$$

これは $\mathbf{e}_i$ を基底ベクトルとした 3 次元空間のベクトル公式

$$\mathbf{A} = \sum_{i=1}^{3} \mathbf{e}_i(\mathbf{e}_i \cdot \mathbf{A}) = A_1\mathbf{e}_1 + A_2\mathbf{e}_2 + a_3\mathbf{e}_3 \tag{21}$$

と比較すれば理解しやすい。



このベクトル公式からの類推で、(20) はケット $|b\rangle$ を基底ケット $|i\rangle$ で展開した式であることがわかる。この式の意味は重要で、物理量 (演算子) $\mathbf{A}$ の固有ケットを $|a_i\rangle$ としたとき、$|a_i\rangle$ は完全系 (後述) をなし、任意の状

[5]いわゆる波動関数のケースでいえば、ある空間で粒子が一つ存在し、それを記述する波動関数を ψ とすると、ψ のノルムに関して $\int |\psi|^2 d\boldsymbol{x} = 1$ とすることを規格化という。

[6]$|a\rangle$ と $^{i\delta}\, |a\rangle$ は同じ状態を表しているので、位相因子のことを忘れても実害はない。つまり、波動関数の絶対値の二乗が測定値の観測確率を与えるので位相因子はこの場合問題にならない。が、位相因子が関係する問題もあることを記憶に止めておきましょう。

態ケット $|\psi\rangle$ は固有ケット $|a_i\rangle$ で展開できるということである。$|a_i\rangle$ の係数 $\langle a_i|\psi\rangle$ は確率振幅と呼ばれ、この絶対値の 2 乗 $|\langle a_i|\psi\rangle|^2$ は、状態 $|\psi\rangle$ において物理量 A を測定した時にある特定の値 a_i が得られる確率を与える。

$$|\psi\rangle = \sum_{i=all} |a_i\rangle \langle a_i|\psi\rangle \tag{22}$$

(20) から $|b\rangle$ を抜いた次の式を考えてみる。

$$\mathbf{I} = \sum_{i=all} |i\rangle \langle i| \tag{23}$$

となる。ここで $\mathbf{I}$ は恒等演算子[7]である。(23) は完全性 (完備性) と呼ばれる。この式はきわめて利用範囲の広い重要な式である。
ところで、(20) は、

$$|b\rangle = \sum_{i=all} |i\rangle \langle i|b\rangle = \alpha \sum_{i=all} |i\rangle, \quad \alpha = \langle i|b\rangle$$

と書けるが、これはケット ケット $|b\rangle$ から $|i\rangle$ に平行な成分を選び出す働きをしていることがわかる[8]。このことから、$|i\rangle\langle i|$ は基底ケット $|i\rangle$ への射影演算子と呼ばれる。

ここで、くどいようだが、(23) の重要性について少し触れておこう。それは、式 (23) の右辺が $\mathbf{1}$ であることから，ケットやブラ，あるいはこれらの積が与えられたとき，都合のよい場所に $\sum_i |i\rangle\langle i| (= \mathbf{I})$ を挿入できる点にあった。

$$\begin{aligned}\langle m|\mathbf{A}|\psi\rangle &= \sum_{i,n=1}^{N} \langle m|i\rangle \langle i|\mathbf{A}|n\rangle \langle n|\psi\rangle = \sum_{n=1}^{N} \langle m|\mathbf{A}|n\rangle \langle n|\psi\rangle \\ &= \sum_{n=1}^{N} \mathbf{A}_{mn}\psi_n \end{aligned}\tag{24}$$

ここで $\mathbf{A}_{mn} = \langle m|\mathbf{A}|n\rangle$，$\psi_n = \langle n|\psi\rangle$ である。この式は任意の $|m\rangle$、$|\psi\rangle$ について成り立つので，両辺より $|m\rangle$ を落とすと

$$\mathbf{A}|\psi\rangle = \sum_{i,n=1}^{N} |i\rangle \langle i|\mathbf{A}|n\rangle \langle n|\psi\rangle \tag{25}$$

となり、演算子 $\mathbf{A}$ を $|\psi\rangle$ に作用させてできた状態 $\mathbf{A}|\psi\rangle$ の具体的な形を示している。
ついでに $|\psi\rangle$ も落とすと

$$\mathbf{A} = \sum_{i,n=1}^{N} |i\rangle \langle i|\mathbf{A}|n\rangle \langle n| \tag{26}$$

となる。ここで見やすくするために n を j と書き換えると、

$$\mathbf{A} = \sum_{i,j=1}^{N} |i\rangle \langle i|\mathbf{A}|j\rangle \langle j| \tag{27}$$

と書ける。行列の要素は全部で N^2 個の $\langle i|\mathbf{A}|j\rangle$ あり、行と列の要素を $\langle i|\mathbf{A}|j\rangle$ となるように並べると

$$[\mathbf{A}_{ij}] = \begin{pmatrix} \langle 1|A|1\rangle & \langle 1|A|2\rangle & \cdots & \langle 1|A|N\rangle \\ \langle 2|A|1\rangle & \langle 2|A|2\rangle & \cdots & \langle 2|A|N\rangle \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ \langle N|A|1\rangle & \langle N|A|2\rangle & \cdots & \langle N|A|N\rangle \end{pmatrix} \tag{28}$$

と表せる。$\mathbf{A}\psi$ の成分を与える式は,

$$(\mathbf{A}|\psi\rangle)_i = \sum_k \mathbf{A}_{ik}\psi_k \tag{29}$$

となる。

[7] 単位演算子のこと。

[8] もっと具体的に言えば、$|\psi\rangle = c_1|a_1\rangle + c_2|a_2\rangle + \cdots + c_n|a_n\rangle$ として、射影演算子 $\Lambda_k = \langle a_k|a_k\rangle$ と定義する。$\Lambda_k|\psi\rangle = |a_k\rangle\langle a_k|(c_1|a_1\rangle + c_2|a_2\rangle + \cdots + c_n|a_n\rangle = |a_k\rangle(c_k\langle a_k|a_k\rangle) = c_k|a_k\rangle$ となって、射影演算子 $\Lambda_k = \langle a_k|a_k\rangle$ は、ψ から $c_k|a_k\rangle$ を選びだす働きがある。

1.3 演算子

$\mathbf{X},\mathbf{Y}$ を演算子[9]をとする。

1. 任意のケット $|a\rangle$ に対して
$$\mathbf{X}|a\rangle = \mathbf{Y}|a\rangle$$
が成り立つとき，2 つの演算子は等しい（$\mathbf{X}=\mathbf{Y}$）。

2. 恒等演算子：任意の $|a\rangle$ に対し
$$\mathbf{I}|a\rangle = |a\rangle$$
が成り立つとき，$\mathbf{I}$ を恒等演算子と呼ぶ。恒等演算子は $\mathbf{1}$ とも書かれる。

3. 線形演算子：任意の $|a\rangle, |b\rangle$ と λ に対し
$$\mathbf{X}(|a\rangle + |b\rangle) = \mathbf{X}|a\rangle + \mathbf{Y}|b\rangle, \quad \mathbf{X}(\lambda|a\rangle) = \lambda(\mathbf{X}|a\rangle)$$
が成り立つとき，$\mathbf{X}$ を線形演算子と呼ぶ。

4. 演算子の和，スカラー倍を
$$(\mathbf{X}+\mathbf{Y})|a\rangle = \mathbf{X}|a\rangle + \mathbf{Y}|a\rangle, \quad (\lambda\mathbf{X})|a\rangle = \lambda(\mathbf{X}|a\rangle)$$
で定義する。
・和の結合則　$\mathbf{X}+(\mathbf{Y}+\mathbf{Z}) = (\mathbf{X}+\mathbf{Y})+\mathbf{Z}$
・和の交換則　$\mathbf{X}+\mathbf{Y} = \mathbf{Y}+\mathbf{X}$

5. 演算子の積を
$$(\mathbf{X}\mathbf{Y})|a\rangle = \mathbf{X}(\mathbf{Y}|a\rangle)$$
で定義する。
・結合則　$(\mathbf{X}\mathbf{Y})\mathbf{Z} = \mathbf{X}(\mathbf{Y}\mathbf{Z})$
・分配則　$(\mathbf{X}+\mathbf{Y})\mathbf{Z} = \mathbf{X}\mathbf{Z}+\mathbf{Y}\mathbf{Z}$

6. **逆演算**子：演算子 $\mathbf{X}$ に対し，
$$\mathbf{X}\mathbf{Y} = \mathbf{Y}\mathbf{X} = \mathbf{I}$$
となるような $\mathbf{Y}$ が存在するとき，$\mathbf{Y}$ を $\mathbf{X}$ の逆演算子と呼び，$\mathbf{Y}\equiv\mathbf{X}^{-1}$ と書く。

7. **エルミート共役**：任意の $|a\rangle, |b\rangle$ に対し，
$$\left\langle a \middle| \mathbf{X}^\dagger \middle| b \right\rangle = \langle b|\mathbf{X}|a\rangle^*$$
を満たす演算子 $\mathbf{X}^\dagger$ を $\mathbf{X}$ の**エルミート共役**という。
定義より
$$(\mathbf{X}^\dagger)^\dagger = \mathbf{X}$$
$$(\lambda\mathbf{X})^\dagger = \lambda^*\mathbf{X}^\dagger$$
$$(\mathbf{X}+\mathbf{Y})^\dagger = \mathbf{X}^\dagger + \mathbf{Y}^\dagger$$
$$(\mathbf{X}\mathbf{Y})^\dagger = \mathbf{Y}^\dagger\mathbf{X}^\dagger$$

8. **エルミート演算子**：演算子が自分自身のエルミート共役に等しい時
$$\mathbf{X} = \mathbf{X}^\dagger$$
$\mathbf{X}$ をエルミート演算子と呼ぶ[10]。

[9]量子力学では、位置や運動量という物理量は演算子として表される。
[10]演算子 $\mathbf{X}$ が任意の $|\psi\rangle$，$|\phi\rangle$ に対して $(\mathbf{X}|\phi\rangle, |\psi\rangle) = (|\phi\rangle, \mathbf{X}|\psi\rangle)$ を満たすとき，演算子 $\mathbf{X}$ はエルミートであるという。ブラケット記法では $\langle\phi|\mathbf{X}^\dagger|\psi\rangle = \langle\phi|\mathbf{X}|\psi\rangle$ となるので，エルミート条件は $\mathbf{X}^\dagger = \mathbf{X}$ とも書ける。

- エルミート演算子同士の和はエルミート演算子である。

$$(\mathbf{X}+\mathbf{Y})^\dagger = \mathbf{X}+\mathbf{Y}$$

- エルミート演算子同士の積は一般にエルミート演算子ではない。

$$(\mathbf{XY})^\dagger = \mathbf{YX} \neq \mathbf{XY}$$

  しかし，$\mathbf{X}, \mathbf{Y}$ が交換可能 ($[\mathbf{X}, \mathbf{Y}] = 0$) であればその積はエルミート演算子となる。

- エルミート交代演算子：演算子が自分自身のエルミート共役と逆符号のとき，

$$\mathbf{X} = -\mathbf{X}^\dagger$$

  エルミート交代演算子と呼ぶ。

9. **ユニタリー演算子**

$$\mathbf{UU}^\dagger = \mathbf{U}^\dagger\mathbf{U} = \mathbf{I}$$

が成り立つとき，$\mathbf{U}$ をユニタリー演算子と呼ぶ。

$$|\psi'\rangle = \mathbf{U}\,|\psi\rangle\,,\quad \langle\phi'| = \langle\phi|\,\mathbf{U}^\dagger$$

としたとき (これを $|\psi\rangle$ はユニタリー変換されて $|\psi'\rangle$ になったという)。

$$\langle\phi'|\,\psi'\rangle = \left\langle\phi\left|\mathbf{U}^\dagger\mathbf{U}\right|\psi'\right\rangle = \langle\phi|\,\psi\rangle$$

であり，内積は変化しない。 $|\psi'\rangle = \mathbf{U}\,|\psi\rangle$ の両辺に左から $\mathbf{U}^\dagger$ をかけ，$\mathbf{U}^\dagger\mathbf{U} = \mathbf{I}$ より

$$\mathbf{U}^\dagger\,|\psi'\rangle = \mathbf{U}^\dagger\mathbf{U}\,|\psi\rangle = |\psi\rangle$$

同様にして

$$\langle\phi| = \langle\phi'|\,\mathbf{U}$$

が得られる。

$$\langle\phi|\,\mathbf{A}|\,\psi\rangle = \left\langle\phi'\left|\mathbf{UAU}^\dagger\right|\psi'\right\rangle$$

なので，$\mathbf{A} = \mathbf{UAU}^\dagger$ と定義すれば

$$\langle\phi'|\,\mathbf{A}|\,\psi'\rangle = \langle\phi|\,\mathbf{A}|\,\psi\rangle$$

となる。

ユニタリー変換の話がでてきたので、ついでに正規直交基底ベクトルである基底ケット系 $\{|\alpha\rangle\}$、$\{|i\rangle\}$ は、互いにユニタリー変換で結ばれることを見ておこう。これは、正規直交基底 (正規直交系) を正規直交基底に写す変換はユニタリ変換である。逆に，ユニタリ行列は正規直交基底を正規直交基底に写す変換行列であるということである。
基底ケットは次の条件を満たすものであればよい[11]ので、一般に複数組存在する。

$$\langle i|\,j\rangle = \delta_{ij} \text{ かつ } \sum_i |i\rangle\,\langle i| = 1$$

$$\langle\alpha|\,\beta\rangle = \delta_{\alpha\beta} \text{ かつ } \sum_\alpha |\alpha\rangle\,\langle\alpha| = 1$$

ケット $|\alpha\rangle$ や $|i\rangle$ は次のように展開できる。

$$|\alpha\rangle = \sum_i |i\rangle\,\langle i|\,\alpha\rangle = \sum_i U_{i\alpha}\,|i\rangle \tag{30a}$$

$$|i\rangle = \sum_\alpha |\alpha\rangle\,\langle\alpha|\,i\rangle \quad \sum_\alpha U^*_{\alpha i}\,|\alpha\rangle \tag{30b}$$

[11] (23) を参照。

ここで、$U_{i\alpha} = \langle i|\,\alpha\rangle$ とした。$U_{i\alpha}$ がユニタリー行列であることは、以下のようにして分かる。

(30a) の右から $\langle\beta|$ をかけると

$$\langle\beta|\,\alpha\rangle = \sum_i \langle\beta|\,i\rangle\,\langle i|\,\alpha\rangle = \sum_i U^*_{\beta i}U_{i\alpha} = (U^\dagger U)_{\beta\alpha} = \delta_{\alpha\beta}$$

同じように (30b) から

$$\langle j|\,i\rangle = \sum_\alpha \langle j|\,\alpha\rangle\,\langle\alpha|\,i\rangle = \sum_\alpha U_{j\alpha}U^*_{\alpha i} = (U\,U^\dagger)_{ji} = \delta_{ij} \tag{31}$$

ということで、2 つの基底ケット系 $\{|\alpha\rangle\}$、$\{|i\rangle\}$ は、(30) に見るように互いにユニタリー変換で関連付けられた。

♣ *Q&A* ———

- キャサリン：フウ〜っ、いろんなことを勉強したから少しクールダウンしないとね。窓を全快にして新鮮な空気を入れましょか。
- K氏：そうだね。頭もカッカ、カッカとしてきたことだから、少し冷やさないとね。
- キャサリン：ところで、ブラとケットの内積は普通のベクトルの内積と同じ考えで理解できるけど、外積はそういうわけにはいかないのね。
- K氏：そうなんだ、内積を $\langle a|\,b\rangle$ と定義しただろう。丁度この括弧を反対にひっくり返した $|a\rangle\,\langle b|$ を外積と定義するんだね。内積はスカラーになるが、外積は演算子となるんだった。
- キャサリン：ところでブラケット表記だけど、積分表記との関係は、内積では

  $$\langle\alpha|\,\beta\rangle = \int d\boldsymbol{x}\,\psi^*_\alpha(\boldsymbol{x},t)\psi_\beta(\boldsymbol{x},t)$$

  となるわね。外積はどうなるのかしら？
- K氏：例えば、$|\alpha\rangle\,\langle\beta|\,a\rangle$ は

  $$|\alpha\rangle\,\langle\beta|\,a\rangle = \psi_\alpha \int d\boldsymbol{x}\,\psi^*_\beta\psi_a$$

  と書ける。そこで、外積 $|\alpha\rangle\,\langle\beta|$ の積分表記は、

  $$\psi_\alpha \int d\boldsymbol{x}\,\psi^*_\beta \bigcirc$$

  の ◯ の部分に関数を代入する演算子という格好になる。これって結構ややこしいよね。
- キャサリン：そうね、外積の積分表示は見通しが悪いし、ディラックが発明したブラケット記法の有り難味がよく分かるというものね。ところで、射影演算子の射影といのは、ケットベクトルのある方向成分を取りだすことを言っているのね。
- K氏：うん。ところで射影演算子の性質なんだけど、今 $P_i = |i\rangle\,\langle i|$ という射影演算子を考えてみよう。$|i\rangle$ は規格化された基底ケットとして、射影演算子は基底の完全性から $\sum_i P_i = \mathbf{I}$ が成立し、また、$P_iP_i = P_i$ だよね。そして $P_i^\dagger = P_i$ だからエルミート演算子であることも分かる。ケットベクトル $|A\rangle = \sum_{j=1}^n A_j\,|j\rangle$ があるとしよう。$|i\rangle$ は基底ケットだ。射影演算子 P_i に $|A\rangle$ を作用させると

  $$P_i\,|A\rangle = |i\rangle\,\langle i|\,A = A_i\,|i\rangle$$

  となって、これはケットベクトル $|A\rangle$ から i 番目の成分とその向きの基底ベクトル $|i\rangle$ を取りだしている。これが射影という言葉の由来なんだね。射影演算子は特定の固有関数を見つける際に大いに活躍

し、射影演算子法というのもある。この話はまた別の機会に譲るけど、ついでだからそのさわりだけでも少し紹介しておこう。演算子 $\mathbf{A}$ の固有ケット系を $|i\rangle$ とし、その固有値を ω_i とすると

$$\mathbf{A}\,|i\rangle = \omega_i\,|i\rangle \tag{32}$$

射影演算子を $P_i = |i\rangle\langle i|$、任意の状態ケット任意の状態ケットを $|\alpha\rangle$ として、$P_i\,|\alpha\rangle$ を演算子 $\mathbf{A}$ に作用させると

$$\mathbf{A}P_i\,|\alpha\rangle = \mathbf{A}\,|i\rangle\,\langle i|\,\alpha\rangle = \omega_i\,|i\rangle\,\langle i|\,\alpha\rangle = \omega_i P_i\,|\alpha\rangle$$

となる。これは、$P_i\,|\alpha\rangle$ が演算子 $\mathbf{A}$ の固有値 ω_i を持つ固有ケットであるということになるね。つまり、必ずしも演算子 $\mathbf{A}$ の固有ケットではない基底ケット α に射影演算子 P_i を作用させると、演算子 $\mathbf{A}$ の特定の固有値 ω_i をもつ固有ケット（$P_i\,|\alpha\rangle$）が得られるということになる。

- キャサリン：なかなか奥が深いのね。ところで、ユニタリー演算子は、古い本にはウニタリー演算子とか書いてあったけど、$U^\dagger U = \mathbf{I}$ と積が単位行列になるのでユニタリーという名前がついたのね。ユニタリー演算子の有り難味というのをもう少し説明願えるかしら。

- K氏：そうだね、例えば、波動関数 Ψ がユニタリー演算子 U で波動関数 ψ に変換されたとしよう。つまり $\Psi = U\,\psi$ だね。両辺を 2 乗して積分すると

$$\int |\Psi|^2 d\mathbf{x} = \int |U\psi|^* U\psi d\mathbf{x} = \int \psi^* U^\dagger U\psi d\mathbf{x} = \int |\psi|^2 d\mathbf{x}$$

となって、変換前後で確率が保存されるよね。これがユニタリー変換が重宝される大きな理由なんだ。

- キャサリン：なるほどね、そういうことなんだ。

1.4 固有値，固有状態

線形演算子 $\mathbf{A}$ を状態ケット $|\psi\rangle$ に作用させると状態ケット $|\psi\rangle$ は別の状態ケット $|\phi\rangle$ に変換され、元の状態ケット $|\psi\rangle$ とは等しくならない。一般に $|\phi\rangle$ は $|\psi\rangle$ と大きさも向きも異なる。

$$|\phi\rangle = \mathbf{A}\,|\psi\rangle\,(\neq |\psi\rangle)$$

しかし，ケットをうまく選べば、演算子 $\mathbf{A}$ がケット $|\psi\rangle$ の向きを変えずに長さを a 倍だけ変化させるようにできる。すなわち

$$\mathbf{A}\,|\psi\rangle = a\,|\psi\rangle \tag{33}$$

この等式が成り立つとき，ケット $|\psi\rangle$ を演算子 $\mathbf{A}$ の固有ケット，a を固有値と呼ぶ。また、固有ケット $|\psi\rangle$ の表す物理状態を固有値 a に属する固有状態と呼ぶ。固有値 a の値は離散的な値の場合もあるし，連続的な値の場合もある。

＜連続固有値の規格化＞

位置演算子 $\boldsymbol{x}$ や運動量演算子 $\boldsymbol{p}$ などの固有値は連続的な値をとる。いま、ξ を連続値をとる物理量とし、その固有状態を $|\xi'\rangle$、固有値を ξ' とすると

$$\xi\,|\xi'\rangle = \xi'\,|\xi'\rangle$$

固有関数 $|\xi\rangle$ の直交条件は

$$\langle\xi'|\,\xi"\rangle = \delta(\xi' - \xi"), \quad \text{但し、}\delta(\xi' - \xi")\text{ はデルタ関数}$$

完全性の式は

$$\int d\xi'\,|\xi'\rangle\,\langle\xi'| = 1$$

で与えられる。

1.4.1 ■エルミート演算子の基本的性質

エルミート演算子 $\mathbf{A}$ の固有値と固有ケットをそれぞれ a_i, $|\psi_i\rangle\,(i=1,2,\cdots,)$ とする。

1. **エルミート演算子の固有値は実数である。**

$$\mathbf{A}\,|\psi_i\rangle = a_i\,|\psi_i\rangle \tag{34}$$

$\mathbf{A}$ はエルミート ($\mathbf{A}=\mathbf{A}^\dagger$) であるから共役虚の式

$$\langle\psi_j|\,\mathbf{A}^\dagger = \langle\psi_j|\,\mathbf{A} = a_i^*\,\langle\psi_j| \tag{35}$$

も成り立つ。式 (34) の両辺に左から $\langle\psi_j|$ をかけ，式 (35) の両辺に右から $|\psi_i\rangle$ をかけて差をとると

$$(a_i - a_j^*)\,\langle\psi_i|\,\psi_j\rangle = 0 \tag{36}$$

が得られる。$i=j$ の場合，$\langle\psi_i|\,\psi_j\rangle \neq 0$ であるから，結局 $a_i = a_i^*$ となって a_i は実数となる。逆に a_i が実数ならば $\mathbf{A}=\mathbf{A}^\dagger$ で，$\mathbf{A}$ はエルミート演算子である。

2. **異なる固有値に属する固有ケットは互いに直交する**[12]。

固有値が異なるので式 (36) が成り立つには $\langle\psi_i|\,\psi_j\rangle = 0$。これから $|\psi_i\rangle$ と $|\psi_j\rangle$ は直交することがわかる。固有ケット $|\psi_i\rangle$ を

$$|\psi_i\rangle = \frac{1}{\sqrt{\langle\psi_i|\,\psi_i\rangle}}\,|\psi_i\rangle$$

と規格化すると $|\psi_i\rangle$ は正規直交系をなすといわれ，

$$\langle\psi_i|\,\psi_j\rangle = \delta_{ij} = \begin{cases} i=j & 1 \\ i\neq j & 0 \end{cases} \tag{37}$$

と表すことができる。

3. **エルミート演算子の固有ケットの組は完全系をなす。**

任意の状態ケット $|\psi\rangle$ は固有ケット $|\psi_i\rangle$ で展開できる。

$$|\psi\rangle = \sum_i |\psi_i\rangle\,\langle\psi_i|\,\psi\rangle \tag{38}$$

この式の右辺 $\langle\psi_i|\,\psi\rangle$ は 1.2 のセクションで述べたように $|\psi_i\rangle$ と $|\psi\rangle$ の内積で、スカラー量である。ということで式 (38) は任意の状態ケット $|\psi\rangle$ を固有ケット $|\psi_i\rangle$ の線形結合で表した形になっている[13]。この式を

$$|\psi\rangle = \left(\sum_i |\psi_i\rangle\,\langle\psi_i|\right)|\psi\rangle \tag{39}$$

と考えると，

$$\left(\sum_i |\psi_i\rangle\,\langle\psi_i|\right) = 1 \tag{40}$$

この式は固有ケットの組の完全性の条件である。

1.5 期待値

測定によって得られる物理量の値は、状態が固有状態である場合には、その物理量に対応した演算子の固有値である。一方、固有状態ではない場合は、演算子の期待値 (測定を繰り返したときに得られる平均値) と等しい。状態 $|\psi\rangle$ において物理量 A を測定した時の期待値は

$$\langle A\rangle = \langle\psi|\,A|\,\psi\rangle$$

で与えられる。

[12]同じ固有値を持つ固有ケットが複数ある場合を縮退と呼ぶ。縮退がある場合，一般に $|\psi_i\rangle$ と $|\psi_j\rangle$ は直交するとは限らない。しかし，同じ固有値に属する任意のケットベクトルが互いに直交するように構成することは常に可能である（グラムシュミットの直交化)。

[13]式 (20) を見よ。

1.6 演算子の行列要素

ある演算子を $\mathbf{A}$ として、演算子 $\mathbf{A}$ が状態 i、j で挟まれた次のような

$$\mathbf{A}_{ij} = \langle i\,|\mathbf{A}|\,j\rangle \tag{41}$$

行列を考える。これは演算子 $\mathbf{A}$ の表示行列と呼ばれ、この表記は、メモの項の (24) に既にでていた。具体的に書けば

$$\begin{aligned}
\text{第 1 成分} \quad \langle 1\,|\mathbf{A}\,|\psi\rangle &= \mathbf{A}_{11}\psi_1 + \mathbf{A}_{12}\psi_2 + \cdots + \mathbf{A}_{1n}\psi_{1n} \\
\text{第 2 成分} \quad \langle 2\,|\mathbf{A}\,|\psi\rangle &= \mathbf{A}_{21}\psi_1 + \mathbf{A}_{22}\psi_2 + \cdots + \mathbf{A}_{2n}\psi_{2n} \\
&\vdots \\
\text{第 } n \text{ 成分} \quad \langle n\,|\mathbf{A}\,|\psi\rangle &= \mathbf{A}_{n1}\psi_1 + \mathbf{A}_{n2}\psi_2 + \cdots + \mathbf{A}_{nn}\psi_{nn}
\end{aligned}$$

また、行列形式に整えると

$$\mathbf{A}\,|\psi\rangle = \begin{bmatrix} \langle 1\,|\mathbf{A}\,|\psi\rangle \\ \langle 2\,|\mathbf{A}\,|\psi\rangle \\ \vdots \\ \langle n\,|\mathbf{A}\,|\psi\rangle \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \mathbf{A}_{11} & \mathbf{A}_{12} & \cdots & \mathbf{A}_{1n} \\ \mathbf{A}_{21} & \mathbf{A}_{22} & \cdots & \vdots \\ \cdots & \cdots & \cdots & \vdots \\ \mathbf{A}_{n1} & \mathbf{A}_{n2} & \cdots & \mathbf{A}_{nn} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \langle 1|\,\psi\rangle \\ \langle 2|\,\psi\rangle \\ \vdots \\ \langle n|\,\psi\rangle \end{bmatrix} \tag{42}$$

と表される[14]。
基底ケットを $|i\rangle$ として演算子 $\mathbf{A}$ の固有ケット $\mathbf{A}\,|i\rangle = a_i\,|i\rangle$ を考えると

$$A_{ij} = \langle i\,|\mathbf{A}|\,j\rangle = a_i\delta_{ij}$$

であるから、演算子 $\mathbf{A}$ は対角行列になる。演算子 $\mathbf{A}$ の固有値と固有ケットを求めることは, 行列の言葉でいえば, 演算子 $\mathbf{A}$ に対応する行列を**対角化**することである。
エルミート演算子はユニタリー変換によって対角化されるが、これを以下に少し復習しておこう。n 行 n 列のエルミート行列 $\mathbf{A}$ を考える。エルミート行列 $\mathbf{A}$ の固有値を a_i, 固有ケットを $|\psi_i\rangle$ とすると

$$\mathbf{A}\,|\psi_i\rangle = a_i\,|\psi_i\rangle$$

固有ケットは

$$\langle\psi_i|\,\psi_j\rangle = \delta_{ij} = \begin{cases} 1 & (i = j) \\ 0 & (i \neq j) \end{cases}$$

を満たす。固有ケット $|\psi_i\rangle$ の成分を行列表記で次のように書いておく。

$$|\psi_i\rangle = \begin{pmatrix} |\psi_i\rangle_1 \\ |\psi_i\rangle_2 \\ \vdots \\ |\psi_i\rangle_n \end{pmatrix}$$

この固有ケットを成分とする次のような行列を作る。

$$\mathbf{U} \quad = \quad (|\psi_1\rangle\,, |\psi_2\rangle\,, \cdots, |\psi_n\rangle)$$

$\mathbf{U}$ のエルミート共役を $\mathbf{U}^\dagger$ として

$$\mathbf{U}^\dagger = \begin{pmatrix} |\psi_1\rangle^\dagger \\ |\psi_2\rangle^\dagger \\ \cdots \\ |\psi_n\rangle^\dagger \end{pmatrix}$$

[14]【メモ】の項を参照されたい。

で作られるユニタリー行列 $\mathbf{U}$ を導入する[15]。このユニタリー行列 $\mathbf{U}$ を使うと、演算子 $\mathbf{A}$ はユニタリー変換 $\mathbf{U}^\dagger\mathbf{A}\mathbf{U}$ により対角行列に変換される。

$$\mathbf{A}\mathbf{U} = \mathbf{A}\cdot(|\psi_1\rangle, |\psi_2\rangle, \cdots, |\psi_n\rangle) = (a_1|\psi_1\rangle, a_2|\psi_2\rangle, \cdots, a_n|\psi_n\rangle)$$

$$\mathbf{U}^\dagger\mathbf{A}\mathbf{U} = \begin{pmatrix} |\psi_1\rangle^\dagger \\ |\psi_2\rangle^\dagger \\ \cdots \\ |\psi_n\rangle^\dagger \end{pmatrix} (a_1|\psi_1\rangle, a_2|\psi_2\rangle, \cdots, a_n|\psi_n\rangle) = \begin{pmatrix} a_1 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & a_2 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & 0 \\ 0 & 0 & 0 & a_n \end{pmatrix}$$

対角成分の a_i は固有値である。

以上まとめると，対角化を行うユニタリー行列というのは，固有値に対応した規格化された固有ベクトルを行列の成分に当てはめたものであるということになる。

ここで、先ほどのユニタリー行列を具体的に成分表示で示しておく。

$$\mathbf{U} = (|\psi_1\rangle, |\psi_2\rangle, \cdots, |\psi_n\rangle) = \begin{pmatrix} |\psi_1\rangle_1 & |\psi_2\rangle_1 & \cdots & |\psi_n\rangle_1 \\ |\psi_1\rangle_2 & |\psi_2\rangle_2 & \cdots & |\psi_n\rangle_n \\ \vdots & \vdots & \cdots & \vdots \\ |\psi_1\rangle_n & |\psi_2\rangle_n & \cdots & |\psi_n\rangle_n \end{pmatrix}$$

$$\mathbf{U}^\dagger = \begin{pmatrix} |\psi_1\rangle^\dagger \\ |\psi_2\rangle^\dagger \\ \cdots \\ |\psi_n\rangle^\dagger \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} |\psi_1\rangle_1^* & |\psi_1\rangle_2^* & \cdots & |\psi_1\rangle_n^* \\ |\psi_2\rangle_1^* & |\psi_2\rangle_2^* & \cdots & |\psi_2\rangle_n^* \\ \vdots & \vdots & \cdots & \vdots \\ |\psi_n\rangle_1^* & |\psi_n\rangle_2^* & \cdots & |\psi_n\rangle_n^* \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \langle\psi_1|_1 & \langle\psi_1|_2 & \cdots & \langle\psi_1|_n \\ \langle\psi_2|_1 & \langle\psi_2|_2 & \cdots & \langle\psi_2|_n \\ \vdots & \vdots & \cdots & \vdots \\ \langle\psi_n|_1 & \langle\psi_n|_2 & \cdots & \langle\psi_n|_n \end{pmatrix}$$

［問題］

エルミート行列 $\mathbf{A} = \begin{pmatrix} 1 & 1+i \\ 1-i & 1 \end{pmatrix}$ をユニタリー行列 $\mathbf{U}$ で対角化せよ。

<答>

行列 $\mathbf{A}$ の固有値は $a_1 = 1-\sqrt{2}, a_2 = 1+\sqrt{2}$ 。それぞれに対応する固有ベクトルは

$$\lambda_1 = \begin{pmatrix} (1+i)/\sqrt{2} \\ -1/\sqrt{2} \end{pmatrix}, \lambda_2 = \begin{pmatrix} (1+i)/\sqrt{2} \\ 1/\sqrt{2} \end{pmatrix}$$

ユニタリー行列を

$$\mathbf{U} = \begin{pmatrix} (\lambda_1)_1 & (\lambda_2)_1 \\ (\lambda_1)_2 & (\lambda_2)_1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} (1+i)/\sqrt{2} & (1+i)/\sqrt{2} \\ -1/\sqrt{2} & 1/\sqrt{2} \end{pmatrix}$$

ととれば、

$$\mathbf{U}\mathbf{A}\mathbf{U}^\dagger = \begin{pmatrix} 1-\sqrt{2} & 0 \\ 0 & 1+\sqrt{2} \end{pmatrix}$$

（了）

さて、演算子の対角成分は $\langle\psi_i|\mathbf{A}|\psi_j\rangle$ で表された。ここで 1.2.3 で述べた表記を思い出すと、これは次のように書ける。

$$\langle\psi_i|\mathbf{A}|\psi_j\rangle = \sum_{\ell,m} \langle\psi_i|\phi_\ell\rangle \langle\phi_\ell|\mathbf{A}|\phi_m\rangle \langle\phi_m|\psi_j\rangle$$

ここで $\mathbf{U}_{i\ell} = \langle\psi_i|\phi_\ell\rangle$，$\mathbf{U}^\dagger_{mj} = \langle\phi_m|\psi_j\rangle$ と置くと

$$\begin{aligned} \langle\psi_i|\mathbf{A}|\psi_j\rangle &= \sum_{\ell,m} \langle\psi_i|\phi_\ell\rangle \langle\phi_\ell|\mathbf{A}|\phi_m\rangle \langle\phi_m|\psi_j\rangle \\ &= \sum_{\ell m} \mathbf{U}_{i\ell}\mathbf{A}_{\ell m}\mathbf{U}^\dagger_{mj} \end{aligned} \tag{43}$$

[15] $\mathbf{U}^\dagger\mathbf{U} = \mathbf{I}$ を満たすことを確認されたし。

となる。$\langle \phi_m | \psi_j \rangle = \langle \psi_j | \phi_m \rangle^*$ であるから，$\mathbf{U}^\dagger_{mj} = \mathbf{U}^*_{jm}$ が成り立つ。また，$\mathbf{U}^\dagger \mathbf{U} = \mathbf{U}\mathbf{U}^\dagger = \mathbf{I}$ である。基底ベクトルとして演算子 $\mathbf{A}$ の固有状態 $|\psi_j\rangle$ を選ぶと、$\mathbf{A}\,|\psi_j\rangle = a_j\,\langle \psi_i | \psi_j \rangle = a_j \delta_{ij}$ となるから、左辺は $\langle \psi_i | \mathbf{A} | \psi_j \rangle = a_j \delta_{ij}$ となって，式 (43) はユニタリ行列 $\mathbf{U}$ による対角化に対応する。

♣ *Q&A* ———

- キャサリン：演算子 $\mathbf{A}$ を状態 i、j で挟んだ $\mathbf{A}_{ij} = \langle i | \mathbf{A} | j \rangle$ という行列要素は物理的にはどういう意味をもつの？
- K氏：例えばある粒子を状態 $|j\rangle$ でスタートさせ、それを装置 $\mathbf{A}$ に送りこみ、粒子が状態 $|i\rangle$ にあるかどうかを測定すると、その結果は確率振幅 $\langle i | \mathbf{A} | j \rangle$ で与えられる、という意味なんだ。このあたりの大変分かりやすい解説は「砂川重信訳：ファインマン物理学　量子力学」(岩波書店) に載っているから図書館等で見るといいよ。
- キャサリン：そうするわ。ところでエルミート演算子というのは実の固有値をもつので、物理量を表す演算子はエルミート演算子でなければならないのね。
- K氏：そうなんだ。だから観測される物理量は必ずエルミート演算子でなければならない、つまりエルミート性は演算子の選択基準となるわけだ。
- キャサリン：最後にもう一つ。期待値と固有値の違いを簡単に説明して欲しいんだけど。
- K氏：ちょっと確率統計的な話になるんだけど、期待値というのは、例えば同じ状態にある粒子の集まり、これを標本の集合とか言うけど、そういうものを仮想的に考えて、それぞれの標本に対してある時刻 t に物理量 $\boldsymbol{A}$ を測定したとき、それぞれの標本に対する測定値はバラツクけど、その平均値ということなんだ。一方、固有値というのは、そのバラツキがゼロ、つまり、ある時刻 t にどの標本について測定しても常に同じ測定値が得られる、この値を固有値というんだね。
- キャサリン：そういうことなの。なんとなくイメージがつかめたわ。
- K氏：以上、駆け足だったけど、一応復習を終わることにしよう。いろいろ言い足りない分もあるけど、それは適当な量子力学のテキストで補ってください。さっ、ここらでコーヒーブレイクだな。気分を一新して、今回の本論に入っていこう。

1.7 x-表示，p-表示

1.7.1 x-表示

位置演算子を $\boldsymbol{x}$ とし，その固有ケットを $|x\rangle$ とすると

$$\boldsymbol{x}|x\rangle = x\,|x\rangle \tag{44}$$

固有ケット $|x\rangle$ は規格直交条件

$$\langle x' | x \rangle = \delta(x' - x) \tag{45}$$

と完全性条件

$$\int dx\,|x\rangle\,\langle x| = 1 \tag{46}$$

を満たしているものとする。任意のケット $|\alpha\rangle$ は，固有ケット $|x\rangle$ で

$$|\alpha\rangle = \int dx\,|x\rangle\,\langle x | \alpha \rangle = \int dx \psi_\alpha(x)\,|x\rangle \tag{47}$$

と表すことができる[16]。展開係数 $\langle x|\,\alpha\rangle$ は、ある状態 $|\alpha\rangle$ において粒子が位置 x に見出される確率振幅[17]で、x の関数となる。$\langle x|\,\alpha\rangle$ は通常「**$\boldsymbol{x}$-表示での波動関数**」と呼ばれ、$\psi_\alpha(x)$ と表す。

$$\psi(x)_\alpha = \langle x|\,\psi\rangle \tag{48}$$

■ x-表示における内積の表記

x-表示での内積 $\langle\beta|\,\alpha\rangle$ を上ででてきた波動関数 $\psi(x)$ を使って表すと

$$\langle\beta|\,\alpha\rangle = \int dx\,\langle\beta|\,x\rangle\,\langle x|\,\alpha\rangle = \int dx\,\psi^*_\beta(x)\psi_\alpha(x) \tag{49}$$

となる。

■ x-表示における期待値の表記

次に物理量 (演算子) A の期待値を波動関数で表してみると

$$\langle\beta|\,\mathbf{A}|\,\alpha\rangle = \int dx_i \int dx_j\,\langle\beta|\,x_i\rangle\,\langle x_i\,|\mathbf{A}|\,x_j\rangle\,\langle x_j|\,\alpha\rangle = \int dx_i \int dx_j \psi^*_\beta(x_i)\,\langle x_i\,|\mathbf{A}|\,x_j\rangle\,\psi_\alpha(x_j) \tag{50}$$

となる。ここで演算子 $\mathbf{A}$ が位置演算子 $\boldsymbol{x}$だけの関数である場合、$\boldsymbol{x}|x\rangle = x\,|x\rangle$ なので

$$\mathbf{A}(\boldsymbol{x})\,|x\rangle = A(x)\,|x\rangle$$

となり、左辺の $\mathbf{A}$ の括弧内の $\boldsymbol{x}$は演算子の $\boldsymbol{x}$であるが、右辺の $A(x)$ の x はただの数となることに注意。つまり、$A(x)$ はもはや演算子ではなく、ただの数になる。ということで

$$\langle x_i\,|\mathbf{A}|\,x_j\rangle = \langle x_i\,|A(x_j)|\,x_j\rangle = A(x_j)\,\langle x_i|\,x_j\rangle = A(x_j)\delta(x_i - x_j) = A(x_i)$$

となって、(50) は

$$\langle\beta|\,\mathbf{A}|\,\alpha\rangle = \int d\boldsymbol{x}_i\psi^*_\beta A(x_i)\psi_\alpha(x_i) \tag{51}$$

と表される。

■ x-表示における演算子の表記

任意の演算子 $\mathbf{A}$ は、恒等演算子 $\mathbf{I}$ を使って

$$\begin{aligned}\mathbf{A} = \mathbf{IAI} &= \left(\int dx'\,|x'\rangle\,\langle x'|\right)\mathbf{A}\left(\int dx\,|x\rangle\,\langle x|\right)\\ &= (\,\langle x'|\,\mathbf{A}|\,x\rangle)\,|x'\rangle\,\langle x|\\ &= \int dx'\mathbf{A}(x',x)\,|x'\rangle\,\langle x|\end{aligned} \tag{52}$$

と書ける。ここで $\langle x'|\,\mathbf{A}|\,x\rangle = \mathbf{A}(x',x)$ とした。演算子 $\mathbf{A}$ に状態 $|\alpha\rangle$ を作用させ状態 $|\beta\rangle$ が観測されたとすると

$$|\beta\rangle = \mathbf{A}\,|\alpha\rangle$$

この式の両辺に左から $\langle x|$ をかけると

$$\begin{aligned}\langle x|\,\beta\rangle = \langle x\,|\mathbf{A}|\,\alpha\rangle &= \int dx'\,\langle x\,|\mathbf{A}\,|x'\rangle\;\langle x'|\,\alpha\rangle\\ &= \int dx'\mathbf{A}(x,x')\,\langle x'|\,\alpha\rangle\end{aligned} \tag{53}$$

となり、x-表示の波動関数 $\psi_\beta(x) = \langle x|\,\beta\rangle$，$\psi_\alpha(x) = \langle x|\,\alpha\rangle$ を使って式 (53) を書き直すと

$$\psi_\beta(x) = \int dx'\mathbf{A}(x,x')\psi_\alpha(x') =: (\mathbf{A}\psi)(x) \tag{54}$$

[16]特に断らないが、簡単のため 1 次元の場合を考える。22) を参照。ここでは一般性を持たすために $\sum \longrightarrow \int$ とした。
[17]x の近傍の狭い間隔 dx に粒子を見出す確率は $|\,\langle x|\,\psi\rangle|^2 dx$ である。

となる。これは波動関数に関する演算子の作用を一般的に表したものである[18]。$\mathbf{A}$ が x-表示で対角的な場合，$\mathbf{A}\,|x\rangle = a\,|x\rangle$ であるので

$$\langle x'|\,\mathbf{A}|\,x\rangle = a\,\langle x'|\,x\rangle = a\delta(x'-x)$$

となり，式 (52) の積分は簡単になる。

$$\mathbf{A} = \int dx'\,\mathbf{A}(x',x)\,|x'\rangle\,\langle x| = \int dx \int dx'\,a\,|x'\rangle\,\langle x|\,\delta(x'-x) = \int dx\,a\,|x\rangle\,\langle x| \tag{55}$$

特に，$\boldsymbol{x}|x\rangle = x\,|x\rangle$ であるから

$$\boldsymbol{x} = \int dx\,x\,|x\rangle\,\langle x| \tag{56}$$

これらを式 (54) に代入すると，それぞれ

$$(\mathbf{A}\psi)(x) = a\psi(x), \quad (\boldsymbol{x}\psi)(x) = x\psi(x) \tag{57}$$

つまり，$x-$ 表示の波動関数 $\psi(x)$ に対して，これらの演算子の作用はそれぞれ

$$\mathbf{A} \longrightarrow a\times, \quad \boldsymbol{x} \longrightarrow x\times$$

のように ”ただの数 ”の掛け算として表すことができる[19]。

■ x-表示における運動量演算子の表記

よく知られているように、位置座標演算子 $\boldsymbol{x}$ と運動量演算子 $\boldsymbol{p}$ の間には交換関係が成立している。

$$[\boldsymbol{x},\,\boldsymbol{p}] = i\hbar \tag{58}$$

(58) の左右から $\langle x|$、$|x'\rangle$ をかけて整理していくと

$$\begin{aligned}\langle x\,|[\boldsymbol{x},\,\boldsymbol{p}]\,|x'\rangle\ &= i\hbar\,\langle x|\,x'\rangle\\ (x-x')\,\langle x\,|\boldsymbol{p}\,|x'\rangle\ &= i\hbar\delta(x-x')\end{aligned}$$

ここで δ 関数の公式

$$x\frac{d\delta(x)}{dx} = -\delta(x)$$

を使うと、

$$\begin{aligned}\langle x\,|\boldsymbol{p}\,|x'\rangle\ &= -i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\delta(x-x')\\ \therefore\quad \langle x|\,\boldsymbol{p} &= -i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\,\langle x|\end{aligned}$$

が得られる。これから x-表示における運動量演算子は

$$\boldsymbol{p} = -i\hbar\frac{\partial}{\partial x} \tag{59}$$

と微分演算子で表記されることがわかる。

1.7.2　$p-$ 表示

次に、基底を位置 x-基底から運動量 p-基底にかえてみる。この場合も x-表示の場合と同じ議論となる。

$$\boldsymbol{p}\,|p\rangle = p\,|p\rangle \tag{60}$$

固有ケット $|p\rangle$ は規格直交条件

$$\langle p'|\,p\rangle = \delta(p'-p) \tag{61}$$

[18]右辺の =: はそのように表現するという意味。
[19]位置座標演算子 $\boldsymbol{x}$ に遭遇しても、それをただの数 x で置き換えればいいということ。

と完全性条件

$$\int dx\,|p\rangle\,\langle p| = 1 \tag{62}$$

を満たしているものとする。任意のケット $|\alpha\rangle$ は，固有ケット $|p\rangle$ で

$$|\alpha\rangle = \int dp\,|p\rangle\,\langle p|\,\alpha\rangle = \int dp\psi_\alpha(p)\,|p\rangle \tag{63}$$

と表すことができる。ここで

$$\psi_\alpha(p) = \langle p|\,\alpha\rangle \tag{64}$$

とした。これはp**-表示の波動関数**で、ある状態 $|\alpha\rangle$ にある粒子の運動量を測定すると、それがpと観測される確率振幅を表す。

$\boldsymbol{x}$ と $\boldsymbol{p}$ の正準交換関係 (58) の両辺を $\langle x|\,,|x'\rangle$ で挟むと, 左辺は

$$\begin{aligned}
\langle x|\,[\boldsymbol{x},\,\boldsymbol{p}]\,|x'\rangle &= \langle x|\,[\boldsymbol{x}\,\boldsymbol{p} - \boldsymbol{p}\,\boldsymbol{x}]\,|x'\rangle \\
&= (x - x')\,\langle x\,|\boldsymbol{p}\,|x'\rangle \\
&= (x - x')\int dp \int dp'\,\langle x|\,p\rangle\,\langle p\,|\boldsymbol{p}\,|p'\rangle\ \langle p'|\,x'\rangle \\
&= (x - x')\int dp \int dp'\,\langle x|\,p\rangle\,\langle p'|\,x'\rangle\,p'\delta(p - p') \\
&= (x - x')\int dp\,\langle x|\,p\rangle\,\langle p|\,x'\rangle p
\end{aligned} \tag{65}$$

となる。一方、右辺の $i\hbar\,\langle x|\,x'\rangle$ は, 部分積分をうまく使って

$$\begin{aligned}
i\hbar\,\langle x|\,x'\rangle = i\hbar\delta(x - x') &= \frac{1}{2\pi}\int dp\,e^{ip(x-x')/\hbar} \\
&= \frac{1}{2\pi}\int dp\,e^{ip(x-x')/\hbar}\frac{\partial p}{\partial p} = -\frac{i\hbar}{2\pi}\int dp\,p\frac{\partial e^{ip(x-x')/\hbar}}{\partial p} \\
&= \frac{(x - x')}{2\pi\hbar}\int dpe^{ip(x-x')}p
\end{aligned} \tag{66}$$

となる。ここで式 (65) と (66) を比較してみると、(65) の右辺の中で

$$\langle x|\,p\rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}e^{ipx/\hbar} \tag{67a}$$

$$\langle p|\,x'\rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}e^{-ipx'/\hbar} \tag{67b}$$

とおけば、(65) の両辺の等号が成り立ち、交換関係 (58) が満たされることがわかる。

(67a)(67b) の 2 つの関数は、変換関数と呼ばれるもので (すぐ後にでてくる)、$\langle x|\,p\rangle$ の物理的な意味は、p を固定してこれを x の関数と見たとき、固有値 p をもつ固有状態において、位置 x に粒子を見出す確率振幅を表す。

■ p-表示における演算子の表記について

1.7.1 でやったことを x を p に置き換えてやればいいので、結果だけを書いておくと、

$$(\mathbf{A}\psi)(p) = b\psi(p), \quad (\boldsymbol{p}\psi)(p) = p\psi(p) \tag{68}$$

p-表示の波動関数 $\psi(p)$ に対して、p-表示で対角的となる演算子 $\mathbf{A}$、運動量演算子 $\boldsymbol{p}$ の作用は、それぞれ

$$\mathbf{A} \longrightarrow b\times, \quad \boldsymbol{p} \longrightarrow p\times$$

のように ”ただの数 ”の掛け算として表すことができる。つまり演算子 $\boldsymbol{p}$ がでてきても、それをただの数 p で置き換えればよい、ということになる。

■ p-表示における座標演算子 x の表記

$\boldsymbol{x}$ と $\boldsymbol{p}$ の正準交換関係 (58) の左右から $\langle p|$、$|p'\rangle$ をかけて整理していくと

$$\begin{aligned} \langle p\,|[\boldsymbol{x},\,\boldsymbol{p}]\,|p'\rangle &= i\hbar\,\langle p|\,p'\rangle \\ -(p-p')\,\langle p\,|\boldsymbol{x}|p'\rangle &= i\hbar\delta(p-p') \end{aligned}$$

ここで δ 関数の公式

$$p\frac{d\delta(p)}{dp} = -\delta(p)$$

を使うと、

$$\begin{aligned} \langle p\,|\boldsymbol{x}|p'\rangle &= i\hbar\frac{\partial}{\partial p}\delta(p-p') \\ \therefore \quad \langle p|\,\boldsymbol{x} &= i\hbar\frac{\partial}{\partial p}\,\langle p| \end{aligned}$$

が得られる。これから p-表示における座標演算子は

$$\boldsymbol{x} = i\hbar\frac{\partial}{\partial p} \tag{69}$$

と微分演算子で表記されることがわかる。

以上、表示と演算子の関係をまとめておくと下表のようになる。

表示	位置演算子	運動量演算子
x-表示	$\boldsymbol{x}$	$-i\hbar\frac{\partial}{\partial x}$
p-表示	$i\hbar\frac{\partial}{\partial p}$	$\boldsymbol{p}$

1.7.3 x-表示と p-表示の関係

状態ケット $|\alpha\rangle$ の p-表示から x-表示への変換は、(47) の両辺に左から $\langle x|$ をかけると

$$\begin{aligned} \langle x|\,\alpha\rangle &= \int d\boldsymbol{p}\,\langle x|\,p\rangle\,\langle p|\,\alpha\rangle \\ \therefore \quad \psi_\alpha(x) &= \int d\boldsymbol{p}\,\langle x|\,p\rangle\varphi_\alpha(p) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\int d\boldsymbol{p}e^{-ipx/\hbar}\varphi_\alpha(p) \end{aligned} \tag{70}$$

という関係式で結びつく。また、x-表示から p-表示への逆変換は、同様にして (47) の両辺に左から $\langle p|$ をかけて整理すると

$$\begin{aligned} \langle p|\,\alpha\rangle &= \int d\boldsymbol{x}\,\langle p|\,x\rangle\,\langle x|\,\alpha\rangle \\ \therefore \quad \varphi_\alpha(p) &= \int d\boldsymbol{p}\,\langle p|\,x\rangle\psi_\alpha(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\int d\boldsymbol{p}e^{ipx/\hbar}\psi_\alpha(x) \end{aligned} \tag{71}$$

ここで、(70) と (71) とはフーリエ変換とその逆変換で結びついていることがわかる。確率振幅 $\langle x|\,p\rangle$ や $\langle p|\,x\rangle$ は、x と p の関数で、先ほど述べたように、x-表示から p-表示へ、p-表示から x-表示への変換関数と呼ばれる。

x-表示から p-表示へ、p-表示から x-表示へはそれぞれフーリエ変換、逆フーリエ変換で結びついていることが分かった。この関係を代数的に一般的に表すと、例によってユニタリー変換で結ばれるということになるが、このことを記しておく。

$$\begin{aligned} \psi_\alpha(i) &= \langle i|\,\psi\rangle \\ \psi_\beta(j) &= \langle j|\,\psi\rangle \end{aligned}$$

とすると、(30) より

$$\psi_\alpha(i) = \langle i|\sum_j |j\rangle\langle j|\psi\rangle = \sum_j \langle i|j\rangle\langle j|\psi\rangle = \sum_j U_{ij}\psi_\beta(j)$$

となって、ψ_α と ψ_β はユニタリー変換で結ばれていることが分かる。

1.7.4　具体的な例

このあたりの話は「メシア量子力学（１）第８章」に詳しく載っているので，参考にされたい。

(1) x-表示でのシュレーディンガー方程式

状態ケットを $|\Psi(t)\rangle$ とすると、この時間発展方程式は

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}|\Psi(t)\rangle = H|\Psi(t)\rangle = \left(\frac{\boldsymbol{p}^2}{2m} + V(\boldsymbol{x})\right)|\Psi(t)\rangle \tag{72}$$

で表される。$V(\boldsymbol{x})$ はポテンシャルエネルギーで、演算子 $\boldsymbol{x}$ だけの関数とする。(72) の両辺に左から $\langle x'|$ をかけて、x-表示で表すと

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\langle x'|\Psi(t)\rangle = \langle x'|H|\Psi(t)\rangle = \left\langle x'\left|\frac{\boldsymbol{p}^2}{2m} + V(\boldsymbol{x})\right|\Psi(t)\right\rangle \tag{73}$$

となる。セクション 1.7.1 より

$$V(\boldsymbol{x})|x'\rangle = V(x')|x'\rangle$$

で、このが成り立つ。ここで右辺の $V(x')$ は”ただの数”となることに注意。$V(\boldsymbol{x})$ はエルミート演算子である[20]ので、上式の複素共役をとると

$$\langle x'|V^\dagger(x) = \langle x'|V^*(x') = V(x')\langle x'|$$

となる。運動量演算子の方は x-表示では $\boldsymbol{p} = -i\hbar\nabla$ であるので

$$\left\langle x'\left|\frac{\boldsymbol{p}^2}{2m}\right|\Psi(t)\right\rangle = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla'^2\langle x'|\Psi(t)\rangle$$

となる。ここで $\langle x'|\Psi(t)\rangle = \Psi(x', t)$ と書くと、(73) は

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi(x', t) = \frac{\hbar^2}{2m}\nabla'^2\Psi(x', t) + V(x')\Psi(x', t) \tag{74}$$

となって、これはよく見慣れたシュレーディンガーの方程式となる。

(2) p-表示でのシュレーディンガー方程式

(2)-1．シュレーディンガー方程式　この場合は、運動エネルギー項はそのままにしておいて、ポテンシャル項の表現が問題となる。x は連続値をとるから、$\sum$ の変りに $\int$ となることに注意すると、次のように書ける。

$$\begin{aligned}
\langle p|V(x)|\Psi(t)\rangle &= \langle p|\int dx\,|x\rangle\langle x|V(x)\int dx'\,|x'\rangle\langle x'|\psi\rangle \\
&= \int dx\int dx'\,\langle p|x\rangle V(x)\int dx'\,\langle x|x'\rangle\langle x'|\Psi(t)\rangle \\
&= \int dx\int dx'\,\langle p|x\rangle V(x)\delta(x - x')\langle x'|\Psi(t)\rangle \\
&= \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\int dx e^{-ipx/\hbar}V(x)\Psi(x, t)
\end{aligned} \tag{75}$$

[20] $V^\dagger(\boldsymbol{x}) = V(\boldsymbol{x})$, $V^*(\boldsymbol{x}') = V(\boldsymbol{x}')$

従って、p-表示でのポテンシャル項の運動量表示は

$$V'(p) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int dx e^{-ipx/\hbar} V(x) \tag{76}$$

というフーリエ変換で与えられる。これを逆変換すると

$$V(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int dp e^{ipx/\hbar} V'(p) \tag{77}$$

また、

$$\Psi(x,t) = \langle x|\, \Psi(t)\rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int dp e^{-ipx/\hbar} \Psi'(p) \tag{78}$$

(77)(78) を (75) に入れると

$$\begin{aligned} \langle p\,|V(x)|\, \Psi(t)\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int dp' V'(p) e^{-ip'x/\hbar} \Psi'(p') \\ &= \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int dp' V'(p-p') \Psi'(p') \end{aligned} \tag{79}$$

が得られる。ということで、p-表示でのシュレーディンガー方程式は

$$\frac{p^2}{2m}\Psi'(p,t) + \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int dp' V'(p-p')\Psi'(p,t) = E\Psi'(p,t) \tag{80}$$

となる。

(2)-2．1 次元調和振動子　1 次元調和振動子のハミルトニアン H は

$$H = \frac{\boldsymbol{p}^2}{2m} + \frac{m\omega^2}{2}\boldsymbol{x}^2 \quad (\text{ただし } \omega = \sqrt{\frac{k}{m}}) \tag{81}$$

ここで，演算子 $\boldsymbol{x}$ は

$$\boldsymbol{x} = i\hbar\frac{\partial}{\partial p} \tag{82}$$

となるから，シュレーディンガーの方程式は

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi(p,t) = \left(\frac{\boldsymbol{p}^2}{2m} - \frac{m\omega^2\hbar^2}{2}\frac{\partial^2}{\partial p^2}\right)\Psi(p,t) \tag{83}$$

となる。エネルギー E の状態で，$\Psi(p,t) = \varphi(p)e^{-Et/\hbar}$ として，これをシュレーディンガーの方程式に入れると次式が得られる。

$$\frac{d^2\varphi(p)}{dp^2} + \frac{2}{m\omega^2\hbar^2}\left(E - \frac{p^2}{2m}\right)\varphi(p) = 0 \tag{84}$$

ここで，$\xi = p/\sqrt{m\omega\hbar}$, $\eta = 2E/\hbar\omega$ といおいて，上式を整理すると

$$\frac{d^3\varphi(p)}{dt^2} + (\eta - \xi^2)\varphi(p) = 0 \tag{85}$$

が得られる。この微分方程式は調和振動子の量子力学でお目にかかるものであるので，ここから先の展開は適当なテキストを参照されたい。

(2)-2．自由粒子　最後に，おまけとして自由粒子の場合を見てる。状態方程式は

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\left|\Psi(t)\right\rangle = \frac{\boldsymbol{p}^2}{2m}\left|\Psi(t)\right\rangle \tag{86}$$

で，この式を p-表示で解いてみよう。運動エネルギーの項は演算子ではなく、ただの数 $\frac{p^2}{2m}$ になることに注意すれば容易に解ける。

$$\begin{aligned} i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\left\langle p\right|\Psi(t)\rangle &= \frac{p^2}{2m}\left\langle p\right|\Psi(t)\rangle \\ i\hbar\frac{1}{\Psi(p,t)}\frac{\partial}{\partial t}\left|\Psi(p,t)\right\rangle &= \frac{p^2}{2m} \\ \therefore \quad \Psi(p,t) &= C\, e^{-i\frac{p^2}{2m}t} \end{aligned}$$

♣ *Q&A* ———

- K氏：以上で今回の話は終了だ。かなり長丁場になってしまったけど、疲れただろ。ちょっと僕も頭がクラクラしてきた。

- キャサリン：大変，お疲れ様でした。QMのポイント的な復習もできたし、x, p-表示のことも聞けたので気持ちはスッキリした感じ。こでれ $\langle x|\,\psi(t)\rangle$ という表示がでてきても驚かなくなるわ。結局 x-表示とか p-表示というのは、整理すると次のようになるのね。例えば 2 つの基底ケット $|\alpha\rangle$ と $|\beta\rangle$ をとりあげた場合、任意の状態ケット $|\Psi\rangle$ は次のように 2 通りに展開できる。

$$|\Psi\rangle = \begin{cases} \sum_\alpha |\alpha\rangle\,\langle\alpha|\,\Psi\rangle = \sum_\alpha \Psi(\alpha)\,|\alpha\rangle \quad (\longrightarrow \int d\alpha\Psi(\alpha)\,|\alpha\rangle) & : \ \alpha\text{表示} \\ \sum_\beta |\beta\rangle\,\langle\beta|\,\Psi\rangle = \sum_\beta \Psi(\beta)\,|\beta\rangle \quad (\longrightarrow \int d\beta\Psi(\beta)\,|\beta\rangle) & : \ \beta\text{表示} \end{cases}$$

  そして私たちが慣れ親しんでいる波動関数は、この状態ケットベクトル $|\Psi\rangle$ の展開係数 $\langle\alpha|\,\Psi\rangle$、$\langle\beta|\,\Psi\rangle$ のことで、例えば $|\alpha\rangle$ を $|x\rangle$ とすれば、$\langle x|\,\Psi\rangle = \Psi(x)$ の物理的な意味は、ある状態 $|\Psi\rangle$ において、粒子が位置 x に見出される確率振幅を与えるということね。

- K氏：そうなんだ。ところで運動量と波数の間には、$\boldsymbol{p} = \hbar\boldsymbol{k}$ というドブロイの関係式というのがあるよね。だから運動量表示の変わりに波数表示 (k-表示) というのもあるんだけど、まぁ、このあたりのことは適当なテキストをひもといてください。

- キャサリン：たしかにいろいろなとり方があるというのは、今までのお話で分かるわ。普通、シュレーディンガーの方程式を解くときは、暗黙のうちに x-表示を使っているのね。位置座標は演算子 $\boldsymbol{x}$ というのを特に気にしないで、平気にただの数 x とし、一方、運動量演算子は $-i\hbar\frac{\partial}{\partial x}$ という微分演算子に置き換えていたけど、p-表示に切り替えると、今度は運動量演算子というのを気にしなくて、それはただの 数 p に置き換えればよい。逆に座標 x は今度は $i\hbar\frac{\partial}{\partial p}$ という微分演算子に置き換えなければならない、というところは印象的だったわ。

- K氏：まぁ，以上の話は，名著「ディラック量子力学」に書かれてあるんだけど，なかなか敷居が高くてね。。。真正面にディラックの本と向き合うのは骨が折れるし，わかりにくくてすぐ退屈してくる。。。しかし，ある程度知識がついてきたら，ディラックの本の必要なところを垣間見てみるという読み方もできるよね。ともかく，何回もアタックしていくことが大事だよね。

- キャサリン：そうね。あっ，外はずいぶん暗くなってきたわね。今日は彼と待ち合わせて飲みにいくの。K さんも機会があればお誘いしますから，今日はこれで失礼するわ。どうもありがとう。

- K氏：それはお楽しみ〜，わたしゃこれから芋焼酎とスルメで寛ぐことにするよ。それじゃ気をつけてね〜

（了）