＝＝＝＝＝＝＝＝＝＝＝＝＝＝＝＝＝＝＝＝＝＝＝＝＝＝＝＝＝＝＝＝

ブラ・ケット算法

2003.12.30 by KENZOU

＝＝＝＝＝＝＝＝＝＝＝＝＝＝＝＝＝＝＝＝＝＝＝＝＝＝＝＝＝＝＝＝

●ブラとケットの内積

χとφの２つの状態があり、φから始まってχに終わる振幅は、φから基本状態の一つに移る振幅（<i|φ>）とその基本状態からχに移る振幅（<χ|i>）の積のその基本状態の完全系上の和として表される。

$$< c \mid f > = \sum_{i=all} < c \mid i > < i \mid f > \tag{1}$$

これはベクトルの内積公式

$$\boldsymbol{B}\cdot\boldsymbol{A}=\sum_{i=all}\left(\boldsymbol{B}\cdot\boldsymbol{e}_i\right)\left(\boldsymbol{e}_i\cdot\boldsymbol{A}\right)=B_1A_1+B_2A_2+B_3A_3 \tag{2}$$

と比較すれば理解しやすい。ベクトルの内積の定義より、|χ>が「長さ」１のベクトル(基底ベクトル)の場合、内積<χ|φ>はベクトル|φ>の|χ>方向の成分に等しいということになる。

基底ベクトルは互いに直交している。

$$< i \mid j >= d_{ij} \qquad \Leftrightarrow \qquad \boldsymbol{e}_i\cdot\boldsymbol{e}_j = d_{ij} \tag{2}$$

状態ベクトルの内積は各項の順番をそのまま保っておく必要があるが、通常のベクトルの場合はその順番はどうでもよいという点が異なっている。

、

$$<c \mid f> = <f \mid c>^* \qquad \leftrightarrow \qquad \boldsymbol{A}\cdot\boldsymbol{B}=\boldsymbol{B}\cdot\boldsymbol{A} \tag{3}$$

内積<χ|φ>はただの数(c－数)である。

●ブラとケットの外積

外積|χ><φ|は演算子(q-数)である。この演算子にケットベクトル|γ>を作用させると

$$(\mid c><f \mid)\mid g>=\mid c><f\mid g> \tag{4}$$

となって、ベクトル|γ>の向きをベクトル|χ>の向きに変える働きをする。

●射影演算子

次ぎの式を考える。((1)から<χ|を外したもの)

$$\mid f>=\sum_i \mid i><i \mid f> \tag{5}$$

これは通常のベクトルの式

$$\boldsymbol{A}=\sum_i \boldsymbol{e}_i\left(\boldsymbol{e}_i\cdot\boldsymbol{A}\right)=A_1e_1+A_2e_2+A_3e_3 \tag{6}$$

から類推できるように、ケットベクトル $|f>$ を基底ベクトル $|i>$ で展開したものである。
(1)から $<c|$ を抜いて(5)を得たが、ついでに(5)から $|f>$ も抜いてしまうと次式を得る。

$$| = \sum_i |i><i| \quad (7)$$

と書くことができる。(7)の有用性は”いくら強調しても強調しすぎることはない”(桜井:現代の量子力学Ｉ)。(5)(7)より $|i><i|$ にはケット $|\phi>$ から $|i>$ に平行な成分を選び出す働きがあることが分かる。このため、$|i><i|$ は基底ケット $|i>$ への射影演算子と呼ばれる。

【式(5)について】

任意のケット $|f>$ を $|f> = \sum_i C_i |i>$ と展開すると、展開係数 C_i は規格直交性の条件より $C_i = <i|f>$

となる。これから $|f> = \sum_i |i><i|f>$

●行列表現

例えばある粒子を状態 $|f>$ でスタートさせ、それを装置 A に中に送りこみ、粒子が状態 χ にあるかどうかを測定すると、その結果は振幅

$$<c|A|f> \quad (9)$$

で記述される。ところで(7)式を適用すると、次ぎのように書くことができる。

$$<c|A|f> = \sum_{ij} <c|i><i|A|j><j|f> \quad (10)$$

(10)は任意の χ と ϕ に対して成立するので、両辺から χ と ϕ を落とすと

$$A = \sum_{ij} |i><i|A|j><j| \quad (11)$$

が得られる。ケット空間の次元をＮとすると全部で N^2 個の $<i|A|j>$ の因子がある。これらを行と列の指標が $<i|A|j>$ となるように並べると

$$[A_{ij}] = \begin{pmatrix} <1|A|1> & <1|A|2> & \cdots \\ <2|A|1> & <2|A|2> & \cdots \\ \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix} \quad (12)$$

$A_{ij}^{\dagger} = (A_{ji})^*$ をエルミート共役と呼んでいる。$A_{ij}^{\dagger} = A_{ij}$ をエルミート演算子と呼ぶ。

もう一個の装置 B を A に直列に並べておくと、次ぎのように書ける。

$$<c|BA|f> = \sum_{ijk} <c|i><i|B|j><j|A|k><k|f> \quad (13)$$

同様に(13)から χ と ϕ を落とすと

$$BA=\sum_{ijk}|i><i|B|j><j|A|k><k| \tag{14}$$

これは行列の積についての通常の規則が適用できることを意味している。

$$BA=\begin{pmatrix} <1|B|1> & <1|B|2> & \cdots \\ <2|B|!> & <2|B|2> & \cdots \\ \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix} \begin{pmatrix} <1|A|1> & <1|A|2> & \cdots \\ <2|A|!> & <2|A|2> & \cdots \\ \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix} = \sum_{ijk} B_{ij} A_{jk} \tag{15}$$

●演算子

◆エルミート演算子

一般の演算子を X とするとき、X はケットベクトル $|a>$ に左から作用し、新たなケットベクトル $|a'>$ をつくる。

$$|a'>=X|a> \tag{16}$$

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 $<b|$ をつくる。

$$<b|=<a|X \tag{17}$$

$|a'>=X|a>$ の対になるブラベクトルを $<a|X^{\dagger}$ と表す。これを双対対応(dual correspondence) と呼んでいる。

$$\overset{dc}{|a'>=X|a> \leftrightarrow <a|X^{\dagger}=<a'|} \tag{18}$$

特別な場合として $X=c$ (c-数で複素数) の時は

$$c|a> \leftrightarrow <a|c^* \quad (c^* \text{ は} c \text{ の複素共役})$$

演算子 $X^{\dagger}$ はエルミート共役（q-数に対する、c-数の複素共役に対応する概念）と呼ばれる。

一般の複素数 c に対してその複素共役 c^* はもとの c と等しくないのと同様に、一般には $X^{\dagger}$ と X は別の演算子であり、等しくない。

$$X^{\dagger} \neq X \tag{19}$$

しかし、c が実数のとき $c^*=c$ が成り立つのと同様に、$X^{\dagger}$ が X に等しい演算子も存在する。共役演算子が自分自身に等しい演算子をエルミート演算子と呼ぶ。

$$X^{\dagger}=X \tag{20}$$

その期待値が実数：$<a|X|a>^*=<a|X^{\dagger}|a>=<a|X|a>$ になることから、エルミート演算子は実数の物理量に対応する。また、定義からエルミート共役には

$$(aX+bY)^\dagger=a^*X^\dagger+b^*Y^\dagger \tag{21}$$

$$(XY)^\dagger=Y^\dagger X^\dagger \tag{22}$$

$$(X^\dagger)^\dagger=X \tag{23}$$

という性質がある。

◆演算子の結合と交換
和について結合則と交換則が成立する。即ち演算子 X, Y, Z に対して、

$$(X+Y)+Z=X+(Y+Z) \tag{21a}$$
$$X+Y=Y+X \tag{21b}$$

積についても結合則

$$(XY)Z=X(YZ) \tag{22c}$$

が成り立つ。また

$$X(Y|a>)=(XY)|a>=XY|a> \tag{22d}$$

$$(<a|X)Y=<a|(XY)=<a|XY \tag{22e}$$

既に述べた次式は重要である。

$$(XY)^\dagger=Y^\dagger X^\dagger \tag{22f}$$

これは成り立つことは次ぎのことから分かる。 $|b>=Y|a>$ とおくと

$$|b>=Y|a> \leftrightarrow <b|=<a|Y^\dagger$$

$$XY|a>=X|b> \leftrightarrow <b|X^\dagger=<a|Y^\dagger X^\dagger$$

特別な場合として $X=Y$ ならば

$$(X^2)^\dagger=(X^\dagger)^2, \quad \text{一般に } (X^n)^\dagger=(X^\dagger)^n \tag{22g}$$

【ちょっと一服・・・(^^)。。】
ブラケットを使うと確率密度の連続の方程式が代数的演算だけで容易に導かれることを示す。
シュレーディンガー方程式

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}|y>=H|y>$$

$$-i\hbar\frac{\partial}{\partial t}<y|=<y|H$$

確率の保存 $$\frac{\partial}{\partial t}<y|y>=\left(\frac{\partial}{\partial t}<y|\right)|y>+<y|\left(\frac{\partial}{\partial t}|y>\right)$$
$$=\frac{1}{i\hbar}\{-(<y|H)|y>+<y|(H|y>)\}=0$$

◆位置の演算子
簡単のため1次元の場合を考える。位置演算子の固有ケットを $|x'>$ とすると $|x'>$ は

$$x|x'>=x'|x'> \tag{23a}$$

が成立し、規格直交条件は

$$<x''|x'>=d(x''-x') \tag{23b}$$

と表せる。任意の状態ケット $|a>$ は固有ケット $|x'>$ で

$$|a>=\int dx'|x'><x'|a> \tag{23c}$$

と展開できる。展開係数 $<x'|a>$ は状態 $|a>$ において粒子が位置 x' に見出される確率振幅で、

$$|<x'|a>|^2 dx' \tag{23d}$$

が x' の近傍の狭い間隔 dx' に粒子を見出す確率であると解釈される。 $<x'|a>$ は普通、状態|α>の波動関数と呼ばれ、 $y_a(x')$ と表す。

$$y_a(x')=<x'|a> \tag{24d}$$

波動関数 $y_a(x')$ は状態ケット｜α>の「位置表示」(基底として位置ケットをとったときの|α>の x' 成分）である。波動関数の言葉で言い換えると、

$$|y_a(x')|^2 dx' \tag{24e}$$

は、 x' の近傍の狭い間隔 dx' に粒子を見出す確率を表し、 $|y_a(x')|^2$ は確率密度と呼ばれる。

◆運動量の演算子

◇位置基底での運動量演算子
運動量演算子が x - 基底、すなわち基底ケットとして位置の固有ケットを使う表示ではどのように表されるかを調べる。結論から先に言うと、位置の固有ケット基底 $|x'>$ を使って状態 $|a>$ を波動関数 $<x'|a>=y_a(x')$ で表現するとき、運動量演算子 p は微分演算子 $-i\hbar\partial/\partial x'$ で表される、ということになる。

$$<x'|p|a>=-i\hbar\frac{\partial}{\partial x'}<x'|a> \tag{25}$$

いま、 x' 近傍によく局在している状態があるとする。この状態を $x'+dx'$ 近傍に他の自由度（例えばスピン自由度）は不変のまま平行移動する無限小平行演算子 $T(dx')=1-ipdx'/\hbar$ を定義する。すなわち

$$T(dx')|x''>=|x''+dx'> \tag{26}$$

無限小平行移動がケットベクトル$|\alpha>$に与える影響を調べてみよう。次ぎの演算を行うと

$$|\alpha>\to\left(1-\frac{ipdx'}{\hbar}\right)|a>=T(dx')|a>=T(dx')\int dx''|x''><x''|a>$$

$$=\int dx''|x''+dx'><x''|a>$$

となる。x' は単に積分変数なので$x''+dx'\to x''$ と置きかえると

$$=\int dx''|x''><x''-dx'|a> \tag{27}$$

と書き直せる。これは、平行移動した状態 $T(dx')|a>$の波動関数が $<x''|a>$の中の x'' を$x''-dx'$で置き換えて得られることを示している。波動関数を $y_a(x''-dx')$ として、テイラー展開すると

$$<x''-dx'|a>=y_a(x''-dx')=y_a(x'')-dx'\frac{\partial}{\partial x''}y_a(x'')=<x''|a>-dx'\frac{\partial}{\partial x''}<x''|a>$$

よって(27)は

$$\left(1-\frac{ipdx'}{\hbar}\right)|a>=\int dx''|x''>\left(<x''|a>-\ dx'\frac{\partial}{\partial x''}<x''|a>\right)$$

$$=|a>-dx'\int dx''|x''>\frac{\partial}{\partial x''}<x''|a> \tag{28}$$

となる。両辺を比較して

$$p|a>=\int dx'|x'>\left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial x'}<x'|a>\right) \tag{29}$$

を得る。この式は形式的には両辺の $|a>$を外して次ぎのように書くことができる。

$$p=-i\hbar\int dx'|x'>\frac{\partial}{\partial x'}<x'| \tag{29a}$$

ここで積分変数をx'' からx' に変えた。直交性の条件 $<x'|x''>=d(x''-x')$ を用いると

$$<x'|p|a>=-i\hbar\frac{\partial}{\partial x'}<x'|a> \tag{30}$$

が得られる。特に$|\alpha>=x''$ とすると

$$<x'|p|x''>=-i\hbar\frac{\partial}{\partial x'}d(x'-x'') \tag{31}$$

が得られる。これは運動量演算子p のx' 行x'' 列の行列要素と見なせることから、x-表示でのp の行列要素と呼ばれる。

【注】(31)の右辺はδ関数の右にくる関数にδ関数を作用させてから微分するという意味でδ関数も演算子となっていることに注意すること。

(39)の左から $<b\,|$ をかけると重要な恒等式が得られる。

$$<b\,|\,p\,|\,a>=\int dx'<b\,|x'>\left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial x'}<x'\,|\,a>\right)$$

$$=\int dx' y_b^*(x')\left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial x'}\right)y_a(x') \qquad (32)$$

これは、状態を波動関数で表したとき運動量 p は

$$p\rightarrow\ -i\hbar\frac{\partial}{\partial x'} \qquad (33)$$

で置きかえられることを明確に示している。(29a)より

$$p^2=(-i\hbar)^2\int dx'\int dx''\,|x'>\frac{\partial}{\partial x'}<x'\,|x''>\frac{\partial}{\partial x''}<x''\,|$$

$$=(-i\hbar)^2\int dx'\int dx''\,|x'>\frac{\partial}{\partial x'}d(x'-x'')\frac{\partial}{\partial x''}<x''\,|$$

$$=(-i\hbar)^2\int dx'\,|x'>\frac{\partial^2}{\partial x'^2}<x'\,| \qquad (34)$$

これを繰り返すと

$$p^n=(-i\hbar)^2\int dx'\,|x'>\frac{\partial^n}{\partial x'^n}<x'\,| \qquad (35)$$

を得る。これから以下の公式が得られる。

$$<x'\,|\,p^n\,|\,a>=(-i\hbar)^n\int dx'\frac{\partial^n}{\partial x'^n}<x'\,|\,a> \qquad (36)$$

$$<b\,|\,p^n\,|\,a>=(-i\hbar)^n\int dx' y_b^*(x')\frac{\partial^n}{\partial x'^n}y_a(x') \qquad (37)$$

つまり状態を波動関数で表したとき p^n は

$$p^n\ \rightarrow(-i\hbar)^n\frac{\partial^n}{\partial x'^n} \qquad (38)$$

で置きかえられる。

◇運動量空間の波動関数

今度は基底を x - 基底から運動量 p - 基底すなわち運動量表示で考えみよう。今度も簡単のために１次元空間を用いる。p - 基底での基底となる固有ケットは、固有方程式

$$p\,|p'\rangle = p'\,|p'\rangle \tag{39}$$

および規格直交性

$$\langle p'|p''\rangle = d(p'-p'') \tag{40}$$

を満足する。運動量ケット $|p'\rangle$ は位置固有ケット $|x'\rangle$ と同様にケット空間を張るので、任意の固有ケット $|a\rangle$ は

$$|a\rangle = \int dp'\,|p'\rangle\langle p'|a\rangle \tag{41}$$

と展開できる。展開係数 $\langle p'|a\rangle$ は状態 $|a\rangle$ において粒子が運動量 p' を持つ確率振幅である。つまり $|\langle p'|a\rangle|^2 dp'$ は状態 $|a\rangle$ に対して運動量 p を測定したとき、$(p',\, p'+dp')$ 間の値を得る確率を与える。$y_a(p') = \langle p'|a\rangle$ を運動量空間の波動関数と呼ぶ。

状態 $|a\rangle$ の p - 表示から x - 表示への変換は、(41)の左から $\langle x'|$ をかけると

$$\langle x'|a\rangle = \int dp'\langle x'|p'\rangle\langle p'|a\rangle \quad \text{すなわち} \quad y_a(x') = \int dp'\langle x'|p'\rangle f_a(p') \tag{42}$$

で関係づけられる。ここで確率振幅 $\langle x'|p'\rangle$ は x' と p' の関数で、x - 表示から p - 表示への変換関数と呼ばれる。次ぎに、x - 表示から p - 表示への逆変換は

$$\langle p'|a\rangle = \int dx'\langle p'|x'\rangle\langle x'|a\rangle \quad \text{すなわち} \quad f_a(x') = \int dx'\langle p'|x'\rangle y_a(p') \tag{43}$$

変換関数 $\langle x'|p'\rangle$ の具体的な形を求めてみよう。(30)式において $|a\rangle = |p'\rangle$ とおくと

$$\langle x'|p|p'\rangle = -i\hbar\frac{\partial}{\partial x'}\langle x'|p'\rangle$$

$p\,|p'\rangle = p'\,|p'\rangle$ であることに注意すると

$$p'\langle x'|p'\rangle = -i\hbar\frac{\partial}{\partial x'}\langle x'|p'\rangle \tag{44}$$

が得られる。これは $\langle x'|p'\rangle$ に関する微分方程式であるから、その解は

$$\langle x'|p'\rangle = N\exp\left(\frac{ip'x'}{\hbar}\right) \tag{45}$$

ここで N は積分定数である。この N を求めるのに次式を考える。

$$<x'|x''>=\int dp'<x'|p'><p'|x''> \tag{46}$$

左辺はδ$(x'-x'')$に等しい、右辺は(45)を代入すると

$$d(x'-x'')=|N|^2\int dp' exp\left[\frac{ip'(x'-x'')}{\hbar}\right]=2p\hbar|N|^2 d(x'-x'') \tag{47}$$

Nを正の実数に選ぶと結局

$$<x'|p'>=\frac{1}{\sqrt{2p\hbar}}exp\left(\frac{ip'x'}{\hbar}\right) \tag{48}$$

が得られる。
位置空間の波動関数が運動量空間の波動関数とどのように関連しているか調べると

$$<x'|a>=y_a(x')=\frac{1}{\sqrt{2p\hbar}}\int dp' exp\left(\frac{ip'x'}{\hbar}\right)f_a(p') \tag{49}$$

$$<p'|a>=f_a(p')=\frac{1}{\sqrt{2p\hbar}}\int dx' exp\left(-\frac{ip'x'}{\hbar}\right)y_a(x') \tag{50}$$

となる。これは $y_a(x')$ と $f_a(p')$は互いにフーリエ変換とその逆変換で結びついている！フーリエ変換をまったく意識しなかったにもかかわらず、我々はフーリエ変換とその逆変換の公式を導いたことになる。ブラケット数学はフーリエ変換の理論を内包している。

◇３次元への一般化
１．位置の固有ケット（位置基底）：$|\mathbf{x}'>$

$$\mathbf{x}|\mathbf{x}'>=\mathbf{x}'|\mathbf{x}'> \tag{51a}$$

２．運動量の固有ケット（運動量基底）：$|\mathbf{p}'>$

$$\mathbf{p}|\mathbf{p}'>=\mathbf{p}'|\mathbf{p}'> \tag{51b}$$

３．規格化

$$<\mathbf{x}'|\mathbf{x}''>=d(\mathbf{x}'-\mathbf{x}''),\quad <\mathbf{p}'|\mathbf{p}''>=d(\mathbf{p}'-\mathbf{p}'') \tag{51c}$$

４．完備関係式

$$\int d\mathbf{x}'|\mathbf{x}'><\mathbf{x}'|=1,\quad \int d\mathbf{p}'|\mathbf{p}'><\mathbf{p}'|=1 \tag{51d}$$

５．任意の状態ケットの展開

$$|a>=\int d\mathbf{x}'|\mathbf{x}'><\mathbf{x}'|a>=\int d\mathbf{p}'|\mathbf{p}'><\mathbf{p}'|a> \tag{51e}$$

6．波動関数

$$y_a(\mathbf{x}')=<\mathbf{x}'|a>,\quad f_a(\mathbf{p}')=<\mathbf{p}'|a> \tag{51f}$$

7．位置ブラ、位置ケットを用いた運動量演算子の表言

$$\mathbf{p}=-i\hbar\int d\mathbf{x}'|\mathbf{x}'>\nabla'<\mathbf{x}'| \tag{51g}$$

$$\mathbf{p}^n=(-i\hbar)^n\int d\mathbf{x}'|\mathbf{x}'>(\nabla')^n<\mathbf{x}'| \tag{51h}$$

8． $\mathbf{p}$ の行列要素

$$<b|\mathbf{p}|a>=-i\hbar\int d\mathbf{x}'<b|\mathbf{x}'>\nabla'<x'|a>=-i\hbar\int dx'y_b^*(\mathbf{x}')\nabla' y_a(\mathbf{x}') \tag{51j}$$

$$<b|\mathbf{p}^n|a>=(-i\hbar)^n\int d\mathbf{x}'<b|\mathbf{x}'>(\nabla')^n<x'|a>=(-i\hbar)^n\int dx'y_b^*(\mathbf{x}')(\nabla')^n y_a(\mathbf{x}')$$

$\mathbf{x}$ - 表示では

$$<\mathbf{x}'|\mathbf{p}|a>=-i\hbar\nabla'<\mathbf{x}'|a> \tag{51k}$$

$$<\mathbf{x}'|\mathbf{p}^n|a>=(-i\hbar)^n(\nabla')^n<\mathbf{x}'|a>$$

9．変換関数

$$<\mathbf{x}'|\mathbf{p}'>=\frac{1}{(2p\hbar)^{3/2}}exp\left(\frac{i\mathbf{p}'\cdot\mathbf{x}'}{\hbar}\right) \tag{51l}$$

10．位置および運動量空間での波動関数の相互変換

$$<\mathbf{x}'|a>=y_a(\mathbf{x}')=\frac{1}{(2p\hbar)^{3/2}}\int d\mathbf{p}'exp\left(\frac{i\mathbf{p}'\cdot\mathbf{x}'}{\hbar}\right)f_a(\mathbf{p}') \tag{51m}$$

$$<\mathbf{p}'|a>=f_a(\mathbf{p}')=\frac{1}{(2p\hbar)^{3/2}}\int d\mathbf{x}'exp\left(-\frac{i\mathbf{p}'\cdot\mathbf{x}'}{\hbar}\right)y_a(\mathbf{x}') \tag{51n}$$

＜エピローグ＞---

もっとコンパクトにまとめるつもりだったが結果として長くなってしまった（^^）;疲れた。分からないときは参考文献に戻って納得いくまで追求してください。

【参考文献】

●J.J.Sakurai　現代の量子力学(上)第9刷 99.3.10　吉岡書店

●砂川重信訳　　ファインマン物理学Ⅴ量子力学　第19刷　92.2.20　岩波書店