2.7. 波動関数のブラケット表示

ディラック： 波動関数 $\longleftrightarrow$ 抽象的なベクトル $|\psi\rangle$
「状態ベクトル」

重ね合せの原理 $\longrightarrow$ $|\psi\rangle = \sum_i c_i \underbrace{|\psi_i\rangle}_{\text{「基底ベクトル」}}$

$|\psi\rangle$ をいくつかの単位状態ベクトルに分解

cf. 

$\mathbf{r} = x\mathbf{e}_x + y\mathbf{e}_y + z\mathbf{e}_z$

「ヒルベルト空間」

$|\psi\rangle$ $\longrightarrow$ 転置複素共役 $\langle\psi|$
ケットベクトル　　　　　　　　ブラベクトル

$$|\psi\rangle = \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \\ \vdots \\ \vdots \end{pmatrix}, \quad \langle\psi| = (c_1^* \ \ c_2^* \ \cdots\cdots)$$

2つの状態ベクトルの内積： $\langle\psi|\phi\rangle$

$$\langle\psi|\phi\rangle = \int d\mathbf{r}\ \psi^*(\mathbf{r})\,\phi(\mathbf{r})$$

$$|\phi\rangle = \hat{A}|\psi\rangle \rightarrow \langle\phi| = \langle\psi|\hat{A}^\dagger$$

$\hat{A} = c$ (c数) の時は

$|\phi\rangle = c|\psi\rangle \rightarrow \langle\phi| = c^*\langle\psi|$ となる。

位置演算子 $\hat{\mathbb{r}}$
運動量 〃 $\hat{\mathbb{p}}$
) の固有状態 → $\hat{\mathbb{r}}|\mathbb{r}\rangle = \mathbb{r}|\mathbb{r}\rangle$
$\hat{\mathbb{p}}|\mathbb{p}\rangle = \mathbb{p}|\mathbb{p}\rangle$

(note) $\langle \mathbb{r}|\hat{\mathbb{r}}^\dagger = \langle \mathbb{r}|\hat{\mathbb{r}} = \langle \mathbb{r}|\mathbb{r}$
$\langle \mathbb{p}|\hat{\mathbb{p}}^\dagger = \langle \mathbb{p}|\mathbb{p}$

$\psi(\mathbb{r},t) = \langle \mathbb{r}|\psi(t)\rangle$ と解釈する。

$\rightarrow \psi^*(\mathbb{r},t) = \langle \mathbb{r}|\psi(t)\rangle^* = \langle \psi(t)|\mathbb{r}\rangle$

同様に $\tilde{\psi}(\mathbb{p},t) = \langle \mathbb{p}|\psi(t)\rangle$, $\tilde{\psi}^*(\mathbb{p},t) = \langle \psi(t)|\mathbb{p}\rangle$

抽象的な状態ベクトル $|\psi\rangle$ を $|\mathbb{r}\rangle$ や $|\mathbb{p}\rangle$ と内積をとって具象化：「表示をとる」

$\hat{\mathbb{r}}\,\psi(\mathbb{r},t) = \mathbb{r}\,\psi(\mathbb{r},t)$

$\leftrightarrow \langle \mathbb{r}|\hat{\mathbb{r}}|\psi(t)\rangle = \mathbb{r}\langle \mathbb{r}|\psi(t)\rangle = \mathbb{r}\,\psi(\mathbb{r},t)$

運動量の固有状態

$$\psi_p(\mathbb{r}) = \langle \mathbb{r}|\mathbb{p}\rangle = \frac{1}{\sqrt{(2\pi\hbar)^3}}\, e^{i\mathbb{p}\cdot\mathbb{r}/\hbar}$$

(note) $\frac{\hbar}{i}\nabla\psi_p(\mathbb{r}) = \mathbb{p}\,\psi_p(\mathbb{r})$

$$\int d\mathbb{r}\; \psi_{p'}^*(\mathbb{r})\psi_p(\mathbb{r}) = \underbrace{\delta(\mathbb{p}-\mathbb{p}')}_{\parallel}$$

$$\delta(p_x - p_x')\,\delta(p_y - p_y')\,\delta(p_z - p_z')$$

同様に

$$\psi_r(\mathbb{p}) = \langle \mathbb{p} | \mathbb{r} \rangle = \langle \mathbb{r} | \mathbb{p} \rangle^* = \frac{1}{\sqrt{(2\pi\hbar)^3}} e^{-i\mathbb{p}\cdot\mathbb{r}/\hbar}$$

(note) $\hat{\mathbb{r}}\,\psi_r(\mathbb{p}) = i\hbar\,\nabla_p\,\psi_r(\mathbb{p}) = \mathbb{r}\,\psi_r(\mathbb{p})$

$$\int d\mathbb{p}\,\psi_{r'}^*(\mathbb{p})\,\psi_r(\mathbb{p}) = \delta(\mathbb{r}-\mathbb{r}')$$

(note) $\langle \mathbb{p} | \psi \rangle = \int d\mathbb{r}\,\langle \mathbb{p} | \mathbb{r} \rangle \langle \mathbb{r} | \psi \rangle$

$$= \frac{1}{\sqrt{(2\pi\hbar)^3}} \int d\mathbb{r}\, \underbrace{e^{-i\mathbb{p}\cdot\mathbb{r}/\hbar}}_{\text{フーリエ逆変換}}\, \psi(\mathbb{r})$$

◀ $$\langle \psi | \phi \rangle = \int d\mathbb{r}\, \underbrace{\langle \psi | \mathbb{r} \rangle}_{\psi^*(\mathbb{r})} \underbrace{\langle \mathbb{r} | \phi \rangle}_{\phi(\mathbb{r})} = \int d\mathbb{p}\, \underbrace{\langle \psi | \mathbb{p} \rangle}_{\tilde{\psi}^*(\mathbb{p})} \underbrace{\langle \mathbb{p} | \phi \rangle}_{\tilde{\phi}(\mathbb{p})}$$

$$\langle \psi | \hat{A} | \phi \rangle \longrightarrow \langle \phi | \hat{A}^\dagger | \psi \rangle^* = \langle \psi | \hat{A} | \phi \rangle$$

$$\langle \psi | \hat{A}\, \underbrace{\hat{B} | \phi \rangle}_{\substack{\parallel \\ |\phi_B\rangle}} = \langle \psi | \hat{A} | \phi_B \rangle$$

$$\rightarrow \langle \phi_B | \hat{A}^\dagger | \psi \rangle = \langle \phi | (AB)^\dagger | \psi \rangle$$

$$\parallel$$

$$\langle \phi | \hat{B}^\dagger \hat{A}^\dagger | \psi \rangle = \langle \phi | (AB)^\dagger | \psi \rangle$$

$$\therefore \boxed{(\hat{A}\hat{B})^\dagger = \hat{B}^\dagger \hat{A}^\dagger}$$

同様に $(\hat{A}+\hat{B})^\dagger = \hat{A}^\dagger + \hat{B}^\dagger$

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

2.8. エルミート演算子の固有状態と完全正規直交性

エルミート演算子 $\hat{A}$: $\hat{A}^{\dagger} = \hat{A}$

$$\hat{A}|\psi_n\rangle = A_n|\psi_n\rangle$$

(1) 固有値 A_n は実数

$$\underbrace{\langle\psi_n|\hat{A}^{\dagger}}_{=\langle\psi_n|\hat{A}} = A_n^{*}\langle\psi_n|$$

$$\downarrow$$

$$\langle\psi_n|\underbrace{\hat{A}|\psi_n\rangle}_{} = A_n^{*}\langle\psi_n|\psi_n\rangle$$

$$\| $$

$$A_n\langle\psi_n|\psi_n\rangle \quad \rightarrow \quad A_n = A_n^{*}$$

(2) 固有状態は正規直交 : $\langle\psi_n|\psi_{n'}\rangle = \delta_{n,n'}$

$$\underbrace{\langle\psi_{n'}|\hat{A}}_{}|\psi_n\rangle = A_n\langle\psi_{n'}|\psi_n\rangle$$

$$\|$$

$$A_{n'}\langle\psi_{n'}|\psi_n\rangle$$

$n \neq n'$ のとき, $A_n \neq A_{n'}$ とすると $\langle\psi_{n'}|\psi_n\rangle = 0$
$n = n'$ のとき, 規格化条件より $\langle\psi_n|\psi_n\rangle = 1$.

(note) $n \neq n'$ で $A_n = A_{n'}$ でもシュミットの直交化を行うことで同様の議論が可.

$$|\mathbf{r}\rangle = \int d\mathbf{r}' \, |\mathbf{r}'\rangle \underbrace{\langle \mathbf{r}' | \mathbf{r}\rangle}_{\delta(\mathbf{r}-\mathbf{r}')} = |\mathbf{r}\rangle$$

(3) 完全性　$\sum_n |\psi_n\rangle\langle\psi_n| = 1$　("完全系をはる")

$\boxed{|\psi\rangle = \sum_n c_n |\psi_n\rangle}$ と書けたとする.

↔ $\hat{A}$ で表される物理量を観測したとき,
確率 $|c_n|^2$ で A_n を観測.

いずれかの値が観測される確率 : $\sum_n |c_n|^2$

→ $\sum_n |c_n|^2 = 1$

「観測されない」値は定義できない.

(note) $\langle\psi_n|\psi\rangle = \sum_{n'} c_{n'} \underbrace{\langle\psi_n|\psi_{n'}\rangle}_{\delta_{n,n'}} = c_n$

⇓

$$1 = \sum_n c_n^* c_n = \sum_n \langle\psi|\psi_n\rangle\langle\psi_n|\psi\rangle$$

⇓

$$\sum_n |\psi_n\rangle\langle\psi_n| = 1$$

→ 任意の波動関数は完全系で展開できる
$|\psi\rangle = \sum_n \langle\psi_n|\psi\rangle\, |\psi_n\rangle$

(note) $\langle\psi|\phi\rangle = \langle\psi| \left(\sum_n |\psi_n\rangle\langle\psi_n|\right) |\phi\rangle$
$= \sum_n \langle\psi|\psi_n\rangle\langle\psi_n|\phi\rangle$

特に $\hat{A}$ として $\hat{\mathbf{r}}$, $\hat{\mathbf{p}}$ をとると

$$1 = \int d\mathbf{r} \, |\mathbf{r}\rangle\langle\mathbf{r}| = \int d\mathbf{p} \, |\mathbf{p}\rangle\langle\mathbf{p}|$$

(note) $\langle\psi|\phi\rangle = \int d\mathbf{r} \, \langle\psi|\mathbf{r}\rangle\langle\mathbf{r}|\phi\rangle = \int d\mathbf{r} \, \psi^*(\mathbf{r})\phi(\mathbf{r})$