

1 量子力学の基礎とブラ・ケット記法

1.1 波動関数の性質

質量 m の粒子の空間 1 次元の量子力学：波動関数が系の状態を表す。

$$\psi(x, t) \in \mathbb{C} \quad (1)$$

$x \in \mathbb{R}$ ：粒子の位置座標、 $t \in \mathbb{R}$ ：時間

$|\psi(x, t)|^2$ は時刻 t に座標 x に粒子が存在する確率密度

演算子：波動関数に作用して別の波動関数にする。 $\hat{O}$ が演算子のとき、 $\hat{O}\psi(x, t)$ も波動関数。

座標 x と運動量 p の演算子（座標表示）と交換関係（演習問題参照）

$$\hat{x} = x, \quad \hat{p} = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}, \quad [\hat{x}, \hat{p}] = \hat{x}\hat{p} - \hat{p}\hat{x} = i\hbar \quad (2)$$

シュレディンガー方程式：波動関数の時間発展（ある時刻の ψ から微小時間後の ψ が分かる）

$$i\hbar \frac{\partial \psi(x, t)}{\partial t} = \hat{H}\psi(x, t) \quad (3)$$

ハミルトニアン $\hat{H}$ ：エネルギーに対応する演算子

$$\hat{H} = \underbrace{\frac{\hat{p}^2}{2m}}_{\text{運動項}} + \underbrace{V(\hat{x}, t)}_{\text{ポテンシャル項}} \quad (4)$$

運動項はいつも同じ、ポテンシャル項によって問題が設定される（井戸型、調和振動子など）。

重ね合わせの原理： $\psi_a(x, t), \psi_b(x, t)$ が (3) の解なら、線形結合 $\psi(x, t)$ も (3) を満たす（演習問題）。

$$\psi(x, t) = c_a \psi_a(x, t) + c_b \psi_b(x, t), \quad c_a, c_b \in \mathbb{C} \quad (5)$$

内積：2つの波動関数 $\psi_a(x, t), \psi_b(x, t)$ に対して（順番は重要）

$$(\psi_a, \psi_b) = \int dx \psi_a^*(x, t) \psi_b(x, t) \in \mathbb{C} \quad (6)$$

同じ波動関数の内積は非負実数

$$(\psi, \psi) = \int dx \psi^*(x, t) \psi(x, t) = \int dx |\psi(x, t)|^2 = N \geq 0 \quad (7)$$

規格化：内積が 1 になるように定数倍（確率密度の x 積分が 1）

$$\psi_{\text{norm}}(x, t) = \frac{\psi(x, t)}{\sqrt{N}} \Rightarrow (\psi_{\text{norm}}, \psi_{\text{norm}}) = 1 \quad (8)$$

期待値：演算子に対する観測量の平均値（規格化した波動関数で挟む）

$$\langle O \rangle = (\psi_{\text{norm}}, \hat{O}\psi_{\text{norm}}) = \frac{(\psi, \hat{O}\psi)}{(\psi, \psi)} \quad (9)$$

ポテンシャルが時間に依存しない $V(\hat{x}, t) = V(\hat{x})$ とき、式 (8) は変数分離 $\psi(x, t) = \phi(x)T(t)$ を用いて以下のように解ける（演習問題）。

$$\psi(x, t) = \phi(x) \exp\left(-i\frac{Et}{\hbar}\right) \quad (10)$$

$$\hat{H}\phi(x) = E\phi(x) \quad (11)$$

$\phi(x)$ は定常状態の波動関数、 E はエネルギー。内積、規格化は $\psi(x, t)$ と同様に定義。

式 (11) は時間に依存しないシュレディンガー方程式、 $\hat{H}\phi(x)$ が $\phi(x)$ に比例するので演算子 $\hat{H}$ の**固有方程式**と呼ばれる。 $\phi(x)$ が**固有関数**、エネルギー E が**固有値**。

演算子 $\hat{O}$ の**エルミート共役** $\hat{O}^\dagger$

$$(\psi_a, \hat{O}\psi_b) = (\hat{O}^\dagger\psi_a, \psi_b) \quad (12)$$

$$\int dx \psi_a^*(x, t) \hat{O}\psi_b(x, t) = \int dx [\hat{O}^\dagger\psi_a(x, t)]^* \psi_b(x, t) \quad (13)$$

エルミート演算子： $(\psi_a, \hat{O}\psi_b) = (\hat{O}\psi_a, \psi_b)$ を満たす $\hat{O}$ 、 $\hat{O}^\dagger = \hat{O}$ と表記。

エルミート演算子の**固有値は実数**：**観測量**はエルミート演算子で表される。

演算子の積のエルミート共役は $(\hat{A}\hat{B})^\dagger = \hat{B}^\dagger\hat{A}^\dagger$ （演習問題）

1.2 2次元複素ベクトル空間

波動関数の性質を議論する準備として、複素数を成分に持つ2成分縦ベクトルを考える

$$\mathbf{a} = \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \end{pmatrix}, \quad a_1, a_2 \in \mathbb{C} \quad (14)$$

このようなベクトル全体 $\{\mathbf{a}, \mathbf{b}, \dots\}$ の集合を $\mathbb{C}^2$ と書き2次元複素**ベクトル空間**と呼ぶ。

重ね合わせの原理： $\mathbf{a}, \mathbf{b} \in \mathbb{C}^2$ のとき、それらの線形結合（係数 c_a, c_b は複素数）も $\mathbb{C}^2$ に属する。

$$c_a\mathbf{a} + c_b\mathbf{b} = \begin{pmatrix} c_a a_1 + c_b b_1 \\ c_a a_2 + c_b b_2 \end{pmatrix} \in \mathbb{C}^2 \quad (15)$$

内積：2つのベクトル $\mathbf{a}, \mathbf{b}$ に対し（複素共役に注意）

$$(\mathbf{a}, \mathbf{b}) = \begin{pmatrix} a_1^* & a_2^* \end{pmatrix} \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \end{pmatrix} = a_1^* b_1 + a_2^* b_2 = \sum_{i=1}^2 a_i^* b_i \in \mathbb{C} \quad (16)$$

$(\mathbf{a}, \mathbf{b}) = 0$ と内積が0になる2つのベクトル $\mathbf{a}$ と $\mathbf{b}$ は**直交する**という。

演算子：成分が複素数の 2×2 行列、縦ベクトルにかけると $\mathbb{C}^2$ に属する縦ベクトルになる

$$\hat{A} = \begin{pmatrix} A_{11} & A_{12} \\ A_{21} & A_{22} \end{pmatrix}, \quad \hat{A}\mathbf{a} = \begin{pmatrix} A_{11} & A_{12} \\ A_{21} & A_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} A_{11}a_1 + A_{12}a_2 \\ A_{21}a_1 + A_{22}a_2 \end{pmatrix} \in \mathbb{C}^2 \quad (17)$$

演算子のエルミート共役：転置複素共役（演習問題）

$$(\mathbf{a}, \hat{A}\mathbf{b}) = (\hat{A}^\dagger \mathbf{a}, \mathbf{b}), \quad \hat{A}^\dagger = \begin{pmatrix} A_{11}^* & A_{21}^* \\ A_{12}^* & A_{22}^* \end{pmatrix} \quad (18)$$

演算子 $\hat{A}$ の固有値 λ と固有ベクトル $\mathbf{x}$ ($\mathbf{x}$ に $\hat{A}$ をかけたら自分自身の定数倍になる)

$$\hat{A}\mathbf{x} = \lambda\mathbf{x} \quad (19)$$

基底：互いに線形独立で、 $\mathbb{C}^2$ のベクトルを線形結合で表現できるベクトルの組、例えば

$$\mathbf{e}_1 = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{e}_2 = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \quad (20)$$

は $\mathbb{C}^2$ の直交基底。 $\mathbb{C}^2$ の任意のベクトルはこの基底を用いて展開できる。

$$\mathbf{a} = a_1\mathbf{e}_1 + a_2\mathbf{e}_2 = \sum_{i=1}^2 a_i\mathbf{e}_i \quad (21)$$

ただし基底は一意的ではない。例えば以下の2つも直交基底。

$$\mathbf{e}'_1 = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{e}'_2 = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix} \quad (22)$$

1.3 ブラ・ケット記法

縦ベクトルを**ケット** $|a\rangle$ で、転置複素共役をとった横ベクトルを**ブラ** $\langle a|$ で表す。

$$|a\rangle = \mathbf{a} = \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \end{pmatrix}, \quad \langle a| = |a\rangle^\dagger = \begin{pmatrix} a_1^* & a_2^* \end{pmatrix} \quad (23)$$

2つのベクトルの**内積**（ブラとケットの掛け算は数）

$$\langle a|b\rangle = (\mathbf{a}, \mathbf{b}) = a_1^*b_1 + a_2^*b_2 \in \mathbb{C}, \quad (24)$$

内積の性質

$$\langle b|a\rangle = b_1^*a_1 + b_2^*a_2 = (a_1^*b_1 + a_2^*b_2)^* = \langle a|b\rangle^* \quad (\text{入れ替えると複素共役}) \quad (25)$$

$$\langle a|a\rangle = a_1^*a_1 + a_2^*a_2 = \sum_i |a_i|^2 \geq 0 \quad (\text{同じものの内積は非負実数}) \quad (26)$$

演算子 $\hat{A}$ はケットに左から、ブラに右からかかる（行列とベクトルの掛け算）。

ブラケット記法での固有値方程式（演算子 $\hat{A}$ の固有値 λ と固有ベクトル $|x\rangle$ ）

$$\hat{A}|x\rangle = \lambda|x\rangle \quad (27)$$

ケットとブラの掛け算は演算子（行列）

$$|a\rangle \langle b| = \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} b_1^* & b_2^* \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a_1 b_1^* & a_1 b_2^* \\ a_2 b_1^* & a_2 b_2^* \end{pmatrix} \quad (28)$$

基底 $\{|e_i\rangle\} = \{e_1, e_2\}$ の規格直交性（自分自身との内積が1で互いに直交）

$$\langle e_i | e_j \rangle = \delta_{ij} = \begin{cases} 1 & i = j \\ 0 & i \neq j \end{cases} \quad (\text{クロネッカーのデルタ、}\delta_{i,j} \text{とも書く}) \quad (29)$$

基底の**完全性** ($\mathbb{C}^2$ の任意のベクトルを展開できる条件、演習問題)

$$\sum_i |e_i\rangle \langle e_i| = \hat{1} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \quad (\text{恒等演算子、} 2 \times 2 \text{ 単位行列}) \quad (30)$$

ベクトル空間の次元：完全性を作るのに必要な基底の数（ i の和の上限）

完全な基底によるベクトルの展開（式 (28) 参照）

$$|a\rangle = \hat{1} |a\rangle = \sum_i |e_i\rangle \underbrace{\langle e_i | a \rangle}_{=a_i} = \sum_i a_i |e_i\rangle \quad (31)$$

1.4 波動関数の状態空間

波動関数 $\psi(x, t)$ は2成分ベクトルと同様に、重ね合わせの原理を満たし、内積が定義されている。
 $\psi(x, t)$ を抽象化したものを**状態ベクトル**と呼び**ケット** $|\psi\rangle$ で表す。

$$\psi(x, t) \xrightarrow{\text{抽象化}} |\psi\rangle \quad (32)$$

状態ベクトルの集合を**状態空間**（無限次元のベクトル空間） V と呼ぶ。

$$V = \{|\psi_a\rangle, |\psi_b\rangle, |\psi_c\rangle, \dots\} \quad (33)$$

2次元複素ベクトル空間との対応は

$$\begin{aligned} \text{波動関数の状態空間 } V &\leftrightarrow \text{ベクトル空間 } \mathbb{C}^2 \\ \text{状態ベクトル } |\psi\rangle &\leftrightarrow \text{ベクトル } \mathbf{a} \text{ (あるいは } |a\rangle) \\ \text{演算子 } \hat{A} &\leftrightarrow \text{行列 } \hat{A} \end{aligned}$$

状態ベクトルのエルミート共役を**ブラ**で表す（より厳密には内積を用いて定義する）。

$$\langle \psi | = |\psi\rangle^\dagger \quad (34)$$

2つの状態 ψ_a と ψ_b の**内積**：

$$\langle \psi_a | \psi_b \rangle = (\psi_a, \psi_b) = \int dx \psi_a^*(x, t) \psi_b(x, t) \in \mathbb{C} \quad (35)$$

内積の性質

$$\langle \psi_a | \psi_b \rangle^* = \langle \psi_b | \psi_a \rangle \quad (36)$$

$$\langle \psi | \psi \rangle \geq 0 \quad (37)$$

ノルム：状態ベクトルの“大きさ”。式 (37) より内積が非負なのでルートをとっても正の実数。

$$\| |\psi\rangle \| = \sqrt{\langle \psi | \psi \rangle} \quad (38)$$

演算子 $\hat{A}$ はケットに左から、ブラに右から作用する

$$\hat{A} |\psi\rangle = (\text{ケット}), \quad \langle \psi | \hat{A} = (\text{ブラ}) \quad (39)$$

演算子のかかったケットのエルミート共役

$$(\hat{A} |\psi\rangle)^\dagger = \langle \psi | \hat{A}^\dagger \quad (40)$$

演算子 $\hat{H}$ の固有値 E と固有ベクトル $|\phi\rangle$ (時間に依存しないシュレディンガー方程式 (10))

$$\hat{H} |\phi\rangle = E |\phi\rangle \quad (41)$$

座標演算子 $\hat{x}$ の固有状態 $|x\rangle$

$$\hat{x} |x\rangle = x |x\rangle \quad (42)$$

座標表示の波動関数 $\psi(x, t)$ と演算子 $\hat{O}_x$ (補足 A-1, A-2 参照)

$$\langle x | \psi \rangle = \psi(x, t), \quad \langle x | \hat{O} = \hat{O}_x \langle x | \quad (43)$$

座標の固有状態の集合 $\{|x\rangle\}$ は状態空間の**基底**になる。

$\{|x\rangle\}$ の規格直交性 (自分自身との内積が1で互いに直交)

$$\langle x | x' \rangle = \delta(x - x') \quad (\text{ディラックのデルタ関数}) \quad (44)$$

$\{|x\rangle\}$ の完全性 (V の任意のベクトルを展開できる条件)

$$\int dx |x\rangle \langle x| = \hat{1} \quad (\text{恒等演算子}) \quad (45)$$

完全な基底による状態ベクトルの展開

$$|\psi\rangle = \hat{1} |\psi\rangle = \int dx |x\rangle \underbrace{\langle x | \psi \rangle}_{=\psi(x, t)} = \int dx \psi(x, t) |x\rangle \quad (46)$$

運動量の固有状態 $\hat{p} |p\rangle = p |p\rangle$ を用いると運動量表示の波動関数 $\psi(p, t) = \langle p | \psi \rangle$ が得られる。

$\Rightarrow |\psi\rangle$ は特定の基底による表現を用いない状態の記述。

今日のポイント

- ブラ・ケット記法で (抽象化され基底に依存しない) 波動関数を $|\psi\rangle$ と表記する。
- シュレディンガー方程式を満たす $|\psi\rangle$ 全体は状態空間 (ベクトル空間) を作る。