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

空間 1 次元の量子力学：**波動関数**が系の状態を表す。

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

$x \in \mathbb{R}$：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

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

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）

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

ハミルトニアン $\hat{H}$：エネルギーに対応する演算子

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

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) を満たすとき、それらの線型結合 $\psi(x,t)$ も (3) を満たす。

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

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）

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

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

$$(\psi_a, \hat{O}\psi_b) = (\hat{O}^\dagger\psi_a, \psi_b) \tag{7}$$

$$\int dx\ \psi_a^*(x,t)\hat{O}\psi_b(x,t) = \int dx[\hat{O}^\dagger\psi_a(x,t)]^*\psi_b(x,t) \tag{8}$$

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。
演算子の積のエルミート共役は $(\hat{A}\hat{B})^\dagger = \hat{B}^\dagger\hat{A}^\dagger$
同じ波動関数の内積は非負実数

$$(\psi,\psi) = \int dx\ \psi^*(x,t)\psi(x,t) = \int dx\ |\psi(x,t)|^2 = N \geq 0 \tag{9}$$

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）

$$\psi_{\text{norm}}(x,t) = \frac{\psi(x,t)}{\sqrt{N}} \quad \Rightarrow \quad (\psi_{\text{norm}}, \psi_{\text{norm}}) = 1 \tag{10}$$

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）

$$\langle O \rangle = (\psi_{\text{norm}}, \hat{O}\psi_{\text{norm}}) = \frac{(\psi, \hat{O}\psi)}{(\psi, \psi)} \tag{11}$$

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 (3) 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。

$$\psi(x,t) = \phi(x) \exp\left(-i\frac{Et}{\hbar}\right) \tag{12}$$

$$\hat{H}\phi(x) = E\phi(x) \tag{13}$$

$\phi(x)$ 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 (13) 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**固有値方程式**と呼ばれる。$\phi(x)$ が**固有関数**、エネルギー E が**固有値**。

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

$$\boldsymbol{a} = \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \end{pmatrix}, \quad a_1, a_2 \in \mathbb{C} \tag{14}$$

このようなベクトル全体 $\{\boldsymbol{a}, \boldsymbol{b}, \cdots\}$ 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：$\boldsymbol{a}, \boldsymbol{b} \in \mathbb{C}^2$ のとき、それらの線型結合（係数 c_a, c_b は複素数）も $\mathbb{C}^2$ に属する。

$$c_a\boldsymbol{a} + c_b\boldsymbol{b} = \begin{pmatrix} c_a a_1 + c_b b_1 \\ c_a a_2 + c_b b_2 \end{pmatrix} \in \mathbb{C}^2 \tag{15}$$

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

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

$(\boldsymbol{a}, \boldsymbol{b}) = 0$ と内積が 0 になる 2 つのベクトル $\boldsymbol{a}$ と $\boldsymbol{b}$ 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

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

演算子のエルミート共役：転置複素共役

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

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

$$\hat{A}\boldsymbol{x} = \lambda \boldsymbol{x} \tag{19}$$

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

$$\boldsymbol{e}_1 = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \boldsymbol{e}_2 = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \tag{20}$$

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

$$\boldsymbol{a} = a_1 \boldsymbol{e}_1 + a_2 \boldsymbol{e}_2 = \sum_{i=1}^{2} a_i \boldsymbol{e}_i \tag{21}$$

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。

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

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。

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

2 つのベクトルの**内積**（ブラとケットの掛け算は数）

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

内積の性質

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

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

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 $|\, x \,\rangle$）

$$\hat{A}|\, x \,\rangle = \lambda |\, x \,\rangle \tag{27}$$

ケットとブラの掛け算は演算子（行列）

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

基底 $\{|\,e_i\,\rangle\} = \{\boldsymbol{e}_1, \boldsymbol{e}_2\}$ の規格直交性（自分自身との内積が 1 で互いに直交）

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

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）

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

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 (21) 参照）

$$|\,a\,\rangle = \hat{1}|\,a\,\rangle = \sum_i |\,e_i\,\rangle \underbrace{\langle\,e_i\,|\,a\,\rangle}_{=a_i} = \sum_i a_i |\,e_i\,\rangle \tag{31}$$

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。

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

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。

$$V = \{|\,\psi_a\,\rangle, |\,\psi_b\,\rangle, |\,\psi_c\,\rangle, \cdots\} \tag{33}$$

2 次元複素ベクトル空間との対応は

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

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）。

$$\langle\,\psi\,| = |\,\psi\,\rangle^\dagger \tag{34}$$

2 つの状態 ψ_a と ψ_b の**内積**：

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

内積の性質

$$\langle \psi_a | \psi_b \rangle^* = \langle \psi_b | \psi_a \rangle \tag{36}$$
$$\langle \psi | \psi \rangle \geq 0 \tag{37}$$

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。

$$\| | \psi \rangle \| = \sqrt{\langle \psi | \psi \rangle} \tag{38}$$

演算子 $\hat{A}$ はケットに左から、ブラに右から作用する

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

演算子のかかったケットのエルミート共役

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

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 (13)）

$$\hat{H}| \phi \rangle = E| \phi \rangle \tag{41}$$

座標演算子 $\hat{x}$ の固有状態 $| x \rangle$ と座標表示の波動関数

$$\hat{x}| x \rangle = x| x \rangle, \quad \langle x | \psi \rangle = \psi(x,t) \tag{42}$$

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）

$$\langle x | x' \rangle = \delta(x - x') \quad (\text{ディラックのデルタ関数}) \tag{43}$$

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

$$\int dx | x \rangle \langle x | = \hat{1} \quad (\text{恒等演算子}) \tag{44}$$

完全な基底による状態ベクトルの展開

$$| \psi \rangle = \hat{1}| \psi \rangle = \int dx | x \rangle \underbrace{\langle x | \psi \rangle}_{=\psi(x,t)} = \int dx \ \psi(x,t) | x \rangle \tag{45}$$

式 (35) の確認

$$\langle \psi_a | \psi_b \rangle = \int dx \langle \psi_a | x \rangle \langle x | \psi_b \rangle = \int dx (\langle x | \psi_a \rangle)^* \langle x | \psi_b \rangle = \int dx \ \psi_a^*(x,t) \psi_b(x,t)$$

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ずに状態を表記する。

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。