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（演習問題参照）

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

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、線形結合 $\psi(x,t)$ も (3) を満たす（演習問題）。

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

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）

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

同じ波動関数の内積は非負実数

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

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）

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

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）

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

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 (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。

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

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

$\phi(x)$ 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**。
演算子 $\hat{O}$ の**エルミート共役** $\hat{O}^\dagger$

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

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

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

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

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、それらの線形結合（係数 c_a,c_b は複素数）も $\mathbb{C}^2$ に属する。

$$c_a\boldsymbol{a}+c_b\boldsymbol{b}=\begin{pmatrix}c_aa_1+c_bb_1\\c_aa_2+c_bb_2\end{pmatrix}\in\mathbb{C}^2 \tag{15}$$

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（演習問題）

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

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

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

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

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

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）

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

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、演習問題）

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

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 (11)）

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

座標演算子 $\hat{x}$ の固有状態 $|x\rangle$

$$\hat{x}\,|x\rangle = x\,|x\rangle \tag{42}$$

座標表示の波動関数 $\psi(x,t)$ と演算子 $\hat{O}_x$（HP の補足参照）

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

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）

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

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

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

完全な基底による状態ベクトルの展開

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

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。