第 9 章　ブラケットによる表記法

この章では，ディラックが導入した，量子状態を表す表記法について述べる。この表記法は抽象的なものであるが，これまでに学んできたことが簡潔に表され，また，見通しがよい方法である。この方法により，演算子を行列で表現することができる。

9.1　ヒルベルト空間

9.1.1　波動関数の座標表示と運動量表示

第 5 章で最小波束 (5.69) について述べた。その波動関数は

$$u(x) = \frac{1}{(2\pi(\Delta x)^2)^{1/4}} \exp\left[-\frac{(x-\langle x\rangle)^2}{(2\,\Delta x)^2} + \frac{i\,\langle p\rangle}{\hbar}\,x\right] \tag{9.1}$$

で表される。ここに，$\langle x\rangle$ は座標の期待値，$\langle p\rangle$ は運動量の期待値であり，それぞれ，

$$\langle x\rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \Big(u(x)\Big)^* x u(x)\,\mathrm{d}x, \tag{9.2}$$

$$\langle p\rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \Big(u(x)\Big)^* \frac{\hbar}{i}\,\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x} u(x)\,\mathrm{d}x \tag{9.3}$$

で与えられる。すなわち，波動関数は座標 x の関数であり，このとき，座標に対しては演算子 x，運動量に対しては微分演算子 $-i\hbar(\mathrm{d}/\mathrm{d}x)$ が対応し，期待値は x についての積分で求められる。

波動関数 (9.1) で表される状態は，運動量 p を変数として表すこともできる。位置座標 x を変数とする波動関数 $u(x)$ から，運動量を変数とする波動関数 $v(p)$ はフーリエ変換によって得られる。このとき，座標 x に対応する演算子は運動量の微分演算子で表され，運動量 p に対応する演算子は p をかけるだけである。期待値は次の式で求められる：

$$\langle x\rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \Big(v(p)\Big)^* i\hbar\,\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}p} v(p)\,\mathrm{d}p, \tag{9.4}$$

$$\langle p\rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \Big(v(p)\Big)^* p v(p)\,\mathrm{d}p. \tag{9.5}$$

$u(x)$ と $v(p)$ は同じ状態を別の変数で表したものである。以下では，変数をあらわにすることなく，量子力学の状態をより抽象的なベクトルとして表す方法について述べる。

9.1.2　ヒルベルト空間と状態ベクトル

量子力学の状態は **ヒルベルト空間**（Hilbert space）と呼ばれるベクトル空間（線形空間）内のベクトルである。ここでは，ディラックによって導入された簡潔で見通しがよい表記法を用いる。この表記法では，量子状態はヒルベルト空間内のケットベクトルで表される。

(1) 量子状態は１つの **ケットベクトル**（ket vector）に対応すると仮定する。

ヒルベルト空間は線形空間であるから，量子状態が幾つかの状態の重ね合わせとして表されることがあり，このとき，その量子状態を表すケットベクトルは幾つかの重ね合わされるケットベクトルの線形結合で表される。また，この逆も成り立つ。

ある状態と，それ自身との重ね合わせた状態は，もとの状態と同じである：

$$c_1 |\alpha\rangle + c_2 |\alpha\rangle \;=\; (c_1 + c_2) |\alpha\rangle. \tag{9.6}$$

量子状態はケットベクトルの大きさ（ノルム，下参照）に依らずに，ヒルベルト空間内のベクトルの方向だけで決まる。

ケットベクトルに 0 をかけてできるケットベクトルを **零ケット** という。

(2) ケットベクトルの空間と対をなす別のベクトル空間が存在することを要請する。

この空間のベクトルを **ブラベクトル**（bra vector）と呼ぶ。ケットベクトル $|\alpha\rangle$ に対応するブラベクトルを $\langle\alpha|$ で表す。c を複素数として，ケットベクトル $c\,|\alpha\rangle$ に対応するブラベクトルは $c^*\langle\alpha|$ とする。

数学で学んだベクトルとの類推では，ケットベクトルは列ベクトルに，ブラベクトルは行ベクトルに対応する。

(3) 内積を，ブラベクトルとケットベクトルから作られる複素数として定義する。

内積を $\langle\alpha|\beta\rangle$ で表す。

内積について次の基本的性質を要請する。

(i) 内積に加法定理が成り立つ：

$$\begin{aligned} \langle\beta|\left(c_1 |\alpha_1\rangle + c_2 |\alpha_2\rangle\right) &= c_1 \langle\beta|\alpha_1\rangle + c_2 \langle\beta|\alpha_2\rangle, \\ \left(c_1 \langle\beta_1| + c_2 \langle\beta_2|\right) |\alpha\rangle &= c_1 \langle\beta_1|\alpha\rangle + c_2 \langle\beta_2|\alpha\rangle. \end{aligned} \tag{9.7}$$

(ii) $\langle\beta|$ と $|\alpha\rangle$ の内積は，$\langle\alpha|$ と $|\beta\rangle$ の内積の複素共役である：

$$\langle\beta|\alpha\rangle \;=\; \langle\alpha|\beta\rangle^*. \tag{9.8}$$

たとえば，$|\beta\rangle = c\,|\alpha\rangle$ である場合，$\langle\beta| = c^*\langle\alpha|$，及び，$\langle\alpha|\alpha\rangle$ が実数であることより，

$$\langle\beta|\alpha\rangle^* \;=\; c\,\langle\alpha|\alpha\rangle \;=\; \langle\alpha|\beta\rangle$$

となる。

$\langle\beta|\alpha\rangle = 0$ のとき２つのベクトルは直交するという。

(iii) ブラベクトル $\langle\alpha|$ とケットベクトル $|\alpha\rangle$ の内積は負でない実数である：

$$\langle\alpha|\alpha\rangle \geq 0. \tag{9.9}$$

等号が成り立つのは，$|\alpha\rangle$ が零ケットのときである。

$\sqrt{\langle\alpha|\alpha\rangle}$ をケットベクトル $|\alpha\rangle$ のノルムという。

ノルムが 1 のケットを規格化されたケットという。

(iv) 上にあげた性質から，**シュワルツの不等式**（Schwarz inequality）が成り立つ：

$$|\langle\beta|\alpha\rangle| \leq \sqrt{\langle\beta|\beta\rangle\langle\alpha|\alpha\rangle}. \tag{9.10}$$

等号が成り立つのは，一方が他方の定数倍になるときであり，その場合だけに限る。

t を実数として，$|\gamma\rangle = |\alpha\rangle + t\langle\beta|\alpha\rangle|\beta\rangle$ の自身との内積は非負の実数である：

$$\langle\gamma|\gamma\rangle \;=\; \langle\alpha|\alpha\rangle + 2\,|\langle\alpha|\beta\rangle|^2 t + |\langle\alpha|\beta\rangle|^2\langle\beta|\beta\rangle\, t^2 \;\geq\; 0.$$

これを t に関する 2 次式と考えると，任意の実数 t について成り立つためには，判別式が負，または 0 でなければならない：

$$(\,|\langle\alpha|\beta\rangle|^2\,)^2 - |\langle\alpha|\beta\rangle|^2\langle\alpha|\alpha\rangle\langle\beta|\beta\rangle \;\leq\; 0.$$

正数である $|\langle\alpha|\beta\rangle|^2$ で割って，

$$|\langle\alpha|\beta\rangle|^2 \;\leq\; \langle\alpha|\alpha\rangle\langle\beta|\beta\rangle$$

を得る。$\langle\alpha|\beta\rangle = 0$ の場合は，明らかに (9.10) が成り立つ。

9.2　演算子

9.2.1　ヒルベルト空間内のベクトルに作用する演算子

ディラックの表記法では，状態はベクトルで表されるが，力学変数（座標，運動量など）はベクトルに作用する演算子として表される。

(1)　力学変数には線形演算子が対応する。（ただし，時間反転の演算子は線形ではない。）

演算子はベクトルに作用して別のベクトルをつくる。演算子を $\mathcal{A}$ で表すと，ケットベクトルには左側から作用し，$\mathcal{A}\,|\alpha\rangle$，これによってつくられるのはケットベクトルである。ブラベクトルには演算子は右側から作用し，$\langle\alpha|\,\mathcal{A}$，これによってつくられるのはブラベクトルである。

演算子は線形であるので，次の関係が成り立つ：

$$
\begin{aligned}
\mathcal{A}\,(c_\alpha\,|\alpha\rangle + c_\beta\,|\beta\rangle) &= c_\alpha\,\mathcal{A}\,|\alpha\rangle + c_\beta\,\mathcal{A}\,|\beta\rangle \\
(c_\alpha\,\langle\alpha| + c_\beta\,\langle\beta|)\,\mathcal{A} &= c_\alpha\,\langle\alpha|\,\mathcal{A} + c_\beta\,\langle\beta|\,\mathcal{A}
\end{aligned}
$$

ここに，c_α と c_β は複素定数である。

(2)　演算子の順序は一般に交換できない。

２つの演算子 $\mathcal{A}$ と $\mathcal{B}$ の順序を入れ替えても，その作用の結果が等しいとき，すなわち，$\mathcal{AB} = \mathcal{BA}$ が成り立つとき，$\mathcal{A}$ と $\mathcal{B}$ は交換する（commute）という。

(3)　ブラベクトル $\langle\alpha|$ と，ケットベクトル $|\beta\rangle$ に演算子 $\mathcal{A}$ を作用させてつくられるケットベクトルとの内積は，$\langle\alpha|$ に $\mathcal{A}$ を作用させてつくられるブラベクトルと，$|\beta\rangle$ との内積に等しい：

$$
\langle\alpha|\,(\,\mathcal{A}\,|\beta\rangle\,) \;=\; (\,\langle\alpha|\,\mathcal{A}\,)\,|\beta\rangle.
$$

従って，$\langle\alpha|\,\mathcal{A}\,|\beta\rangle$ と表すことができる。

(4)　ケットベクトル $|\alpha\rangle$ とブラベクトル $\langle\beta|$ の積 $|\alpha\rangle\langle\beta|$ は演算子である。

ただし，$|\alpha\rangle\langle\beta|$ の，ケットベクトル $|\gamma\rangle$，あるいはブラベクトル $\langle\gamma|$ に対する作用は次のように定義する：

$$
(\,|\alpha\rangle\langle\beta|\,)\,|\gamma\rangle \;=\; |\alpha\rangle\,\langle\beta|\gamma\rangle, \qquad \langle\gamma|\,(\,|\alpha\rangle\langle\beta|\,) \;=\; \langle\gamma|\alpha\rangle\,\langle\beta|.
$$

ここに，$\langle\beta|\gamma\rangle$，$\langle\gamma|\alpha\rangle$ は内積であり，すなわち，第１式は新たなケットベクトルをつくり，第２式は新たなブラベクトルをつくる。

9.2.2　演算子のエルミート共役

(1)　演算子 $\mathcal{A}$ のエルミート共役（Hermitian conjugate）$\mathcal{A}^\dagger$ を次の式で定義する：

$$
\langle\beta|\,\mathcal{A}^\dagger\,|\alpha\rangle \;=\; \langle\alpha|\,\mathcal{A}\,|\beta\rangle^*. \tag{9.11}
$$

ケットベクトル $\mathcal{A}\,|\beta\rangle$ に対応するブラベクトルは $\langle\beta|\,\mathcal{A}^\dagger$ であって，$\langle\beta|\,\mathcal{A}$ ではない。実際，$|\gamma\rangle = \mathcal{A}\,|\beta\rangle$ とすると，

$$\langle\beta|\,\mathcal{A}^\dagger\,|\alpha\rangle \;=\; \langle\alpha|\gamma\rangle^* \;=\; \langle\gamma|\alpha\rangle$$

より，$\langle\gamma| = \langle\beta|\,\mathcal{A}^\dagger$ である。

$\mathcal{A}^\dagger = \mathcal{A}$ であるとき，演算子 $\mathcal{A}$ はエルミート（Hermitian）であるという。

(2) 演算子の積のエルミート共役は，それぞれのエルミート共役をつくり，順序を入れ替えたものである：

$$(\mathcal{A}\mathcal{B})^\dagger \;=\; \mathcal{B}^\dagger\mathcal{A}^\dagger. \tag{9.12}$$

エルミート共役の定義より，

$$\langle\alpha|\,\mathcal{A}\mathcal{B}\,|\beta\rangle \;=\; \langle\beta|\,(\mathcal{A}\mathcal{B})^\dagger\,|\alpha\rangle^*,$$

一方，$|\gamma\rangle = \mathcal{B}\,|\beta\rangle$ とすると $\langle\gamma| = \langle\beta|\,\mathcal{B}^\dagger$ であるので，

$$\langle\alpha|\,\mathcal{A}\mathcal{B}\,|\beta\rangle \;=\; \langle\alpha|\,\mathcal{A}\,|\gamma\rangle \;=\; \langle\gamma|\mathcal{A}^\dagger\,|\alpha\rangle^* \;=\; \langle\beta|\,\mathcal{B}^\dagger\mathcal{A}^\dagger\,|\alpha\rangle^*.$$

両式より，(9.12) が得られる。

(3) 演算子のエルミート共役の，エルミート共役はもとの演算子に等しい：

$$(\mathcal{A}^\dagger)^\dagger \;=\; \mathcal{A} \tag{9.13}$$

エルミート共役の定義を 2 度用いて，

$$\langle\beta|\,(\mathcal{A}^\dagger)^\dagger\,|\alpha\rangle \;=\; \langle\alpha|\,\mathcal{A}^\dagger\,|\beta\rangle^* \;=\; \langle\beta|\,\mathcal{A}\,|\alpha\rangle.$$

(4) ケットベクトルとブラベクトルの積のエルミート共役は

$$(\,|\alpha\rangle\langle\beta|\,)^\dagger \;=\; |\beta\rangle\langle\alpha|.$$

ケットベクトルとブラベクトルの積は演算子であるので，$\mathcal{A} = |\alpha\rangle\langle\beta|$ として，

$$\langle\gamma|\,\mathcal{A}^\dagger\,|\delta\rangle \;=\; \langle\delta|\,\mathcal{A}\,|\gamma\rangle^* \;=\; (\,\langle\delta|\alpha\rangle\,\langle\beta|\gamma\rangle\,)^* \;=\; \langle\alpha|\delta\rangle\,\langle\gamma|\beta\rangle \;=\; \langle\gamma|\,(\,|\beta\rangle\langle\alpha|\,)\,|\delta\rangle.$$

9.3　エルミート演算子と固有ベクトル

力学変数 A が物理量である場合，それは一般に座標と運動量の実関数であり，期待値（測定の結果として得られる値）も実数である：

$$\langle\alpha|\,\mathcal{A}\,|\alpha\rangle^* \;=\; \langle\alpha|\,\mathcal{A}\,|\alpha\rangle.$$

$|\alpha\rangle$ は 1 に規格化してある。物理量に対応する演算子 $\mathcal{A}$ はエルミート演算子である，$\mathcal{A}^\dagger \;=\; \mathcal{A}$（正確には以下の議論を参照）。

9.3.1　固有値と固有ベクトル

エルミート演算子 $\mathcal{A}$ について，次の方程式を考える：

$$\mathcal{A}\,|\alpha\rangle \;=\; a\,|\alpha\rangle. \tag{9.14}$$

あるケットベクトル $|\alpha\rangle$ に演算子 $\mathcal{A}$ を作用させてできるケットベクトル $\mathcal{A}\,|\alpha\rangle$ は，一般には $|\alpha\rangle$ の定数倍にはならない。与えられた演算子 $\mathcal{A}$ に対して，特別なケットベクトル $|\alpha\rangle$ だけが上の方程式を満たす。このとき，$|\alpha\rangle$ を固有ケット，a を固有値という。また，固有ケット $|\alpha\rangle$ は固有値 a に属するという。

エルミート演算子の固有値と固有ケットについて，次の 2 つの重要な性質が成り立つ。

(1) エルミート演算子の固有値は実数である。

固有値方程式 (9.14) の両辺と，ブラベクトル $\langle\alpha|$ の内積をとると

$$\langle\alpha|\,\mathcal{A}\,|\alpha\rangle \;=\; a\,\langle\alpha|\alpha\rangle.$$

この両辺の複素共役をとると，

$$a^*\,\langle\alpha|\alpha\rangle \;=\; \langle\alpha|\,\mathcal{A}\,|\alpha\rangle^* \;=\; \langle\alpha|\,\mathcal{A}^\dagger\,|\alpha\rangle \;=\; \langle\alpha|\,\mathcal{A}\,|\alpha\rangle \;=\; a\,\langle\alpha|\alpha\rangle.$$

固有ベクトルの内積 $\langle\alpha|\alpha\rangle$ が実数であるので，$a^* = a$，すなわち，固有値 a は実数である。

(2) エルミート演算子の異なる固有値に属する固有ベクトルは直交する：

$$\langle\alpha'|\alpha\rangle \;=\; \delta_{\alpha'\alpha} \tag{9.15}$$

ここに，固有ベクトルは 1 に規格化してある。

エルミート演算子 $\mathcal{A}$ の 2 つの固有値を a，a' とし（ともに実数），それぞれに属するケットを $|\alpha\rangle$，$|\alpha'\rangle$ とする：

$$\mathcal{A}\,|\alpha\rangle \;=\; a\,|\alpha\rangle, \qquad \mathcal{A}\,|\alpha'\rangle \;=\; a'\,|\alpha'\rangle.$$

第１式の両辺とブラベクトル $\langle\alpha'|$ の内積をとり，また，第２式から得られる式 $\langle\alpha'|\mathcal{A} = a'\langle\alpha'|$ の両辺とケットベクトル $|\alpha\rangle$ との内積をとると，

$$\langle\alpha'|\mathcal{A}|\alpha\rangle \;=\; a\,\langle\alpha'|\alpha\rangle, \qquad \langle\alpha'|\mathcal{A}|\alpha\rangle \;=\; a'\,\langle\alpha'|\alpha\rangle.$$

２つの式の差をとって

$$(a-a')\,\langle\alpha'|\alpha\rangle \;=\; 0$$

が得られ。よって，固有値が異なれば（$a \neq a'$），固有ベクトルは直交する。

オブザーバブル　上に述べてきた抽象的（数学的）な表記を，実験で観測される物理量と結びつけるため，次のような仮定を行う。

(1) 力学変数 A を観測すると，量子系の状態は対応する演算子 $\mathcal{A}$ の，ある１つの固有状態 $|\alpha\rangle$ に跳び移り，その固有状態の固有値 a が A の観測値になる。

観測によってどの固有状態になるかは予言できないが，観測前の状態が $|\beta\rangle$ であるとき，固有値 a が観測される確率は

$$|\,\langle\alpha|\beta\rangle\,|^2 \tag{9.16}$$

で与えられる（どちらのベクトルも 1 に規格化されているとする）。

(2) 力学変数 A に対応する演算子 $\mathcal{A}$ はエルミート演算子であるとする。

観測される値は実数であるあら，固有値は実数である。この条件は対応する演算子がエルミートであれば満たされる。

(3) 力学変数 A の固有ケットの組 $\{\,|\alpha\rangle\,\}$ は **完全系**（complete system）をなす。
すなわち，任意のケット $|\beta\rangle$ は固有ケットで展開できるとする：

$$|\beta\rangle \;=\; \sum_{\alpha} c_{\alpha}\,|\alpha\rangle. \tag{9.17}$$

(1) において，観測前の状態が $|\beta\rangle$ で，観測によって力学変数の値が a である確率は，(9.15) を用いて

$$\langle\alpha|\beta\rangle \;=\; \sum_{\alpha'} c_{\alpha'}\,\langle\alpha|\alpha'\rangle \;=\; \sum_{\alpha'} c_{\alpha'}\delta_{\alpha,\alpha'} \;=\; c_{\alpha} \tag{9.18}$$

より，$|c_{\alpha}|^2$ である。観測によって任意の状態へ跳び移れることを保証するには，展開 (9.17) は全ての固有ケットを含まなければならない。よって，固有ケットの組 $\{\,|\alpha\rangle\,\}$ は完全系でなければならない。

これらの条件を満たす力学変数を **オブザーバブル**（observable），あるいは，**観測量** と呼ぶ。

固有ベクトルの完備性　エルミート演算子の固有ケットの組 $\{\,|\alpha\rangle\,\}$ は完全系をなし，これからつくられるエルミート演算子 $\sum_{\alpha}|\alpha\rangle\langle\alpha|$ は恒等演算子である：

$$\sum_{\alpha}|\alpha\rangle\,\langle\alpha| \;=\; 1. \tag{9.19}$$

実際，(9.18) を完全系による展開式 (9.17) に代入すると，

$$|\beta\rangle \;=\; \sum_\alpha |\alpha\rangle\,\langle\alpha|\beta\rangle \;=\; \left(\sum_\alpha |\alpha\rangle\,\langle\alpha|\right)|\beta\rangle$$

となり，演算子 $\sum_\alpha |\alpha\rangle\,\langle\alpha|$ が恒等演算子であることが示せる。
(9.19) を固有ベクトルの **完備性**（completeness）と言い，固有ケットの組が完全系であることを表している。

完備性 (9.19) により，観測によって見出される確率 (9.16) の和は 1 になる：

$$\sum_\alpha |\,\langle\alpha|\beta\rangle\,|^2 \;=\; \sum_\alpha \langle\beta|\alpha\rangle\,\langle\alpha|\beta\rangle \;=\; \langle\beta|\left(\sum_\alpha |\alpha\rangle\,\langle\alpha|\right)|\beta\rangle \;=\; \langle\beta|\beta\rangle \;=\; 1.$$

同様に，状態 $|\beta\rangle$ における，オブザーバブル A の期待値（平均値）は，固有値 a に確率 $|\,\langle\alpha|\beta\rangle\,|^2$ をかけて足し合わせたもの

$$\langle A\rangle_\beta \;=\; \sum_\alpha a_\alpha\,|\,\langle\alpha|\beta\rangle\,|^2$$

であるから，

$$\langle A\rangle_\beta \;=\; \sum_\alpha a_\alpha\,\langle\beta|\alpha\rangle\langle\alpha|\beta\rangle \;=\; \sum_\alpha \langle\beta|\mathcal{A}|\alpha\rangle\,\langle\alpha|\beta\rangle \;=\; \langle\beta|\mathcal{A}|\beta\rangle \tag{9.20}$$

で与えられる。

なお，ケットベクトル $|\beta\rangle$ が 1 に規格化されていないとき，期待値は

$$\langle A\rangle_\beta \;=\; \frac{\langle\beta|\mathcal{A}|\beta\rangle}{\langle\beta|\beta\rangle} \tag{9.21}$$

で求められる。

9.3.2　演算子の行列表現

オブザーバブルの固有状態を表す固有ケットの組は完全系であり完備である。ここでは，簡単のため，固有ケットを番号で $|i\rangle$ （$i = 1, 2, \cdots$）と表す。

任意のケット $|\alpha\rangle$ は，固有ブラとの内積の組

$$\alpha_i \;=\; \langle i|\alpha\rangle \quad (\, i = 1, 2, \cdots)$$

で表すことができる。また，任意の 2 つの状態 $|\alpha\rangle$，$|\beta\rangle$ に対して，演算子 $\mathcal{A}$ をケットベクトル $|\beta\rangle$ に作用し，それとブラベクトル $\langle\alpha|$ との内積をつくると

$$\langle\alpha|\mathcal{A}|\beta\rangle \;=\; \sum_{ij} \langle\alpha|i\rangle\,\langle i|\mathcal{A}|j\rangle\,\langle j|\beta\rangle \tag{9.22}$$

と表せる。ここで，

$$\alpha_i \;=\; \langle i|\alpha\rangle, \quad \beta_j \;=\; \langle j|\beta\rangle, \quad A_{ij} \;=\; \langle i|\mathcal{A}|j\rangle$$

を用いると，(9.22) は次のように表せる：

$$\langle\alpha|\mathcal{A}|\beta\rangle \;=\; \sum_{ij}\alpha_i^* X_{ij}\beta_j.$$

列ベクトル，行ベクトル，行列による表現

ケットベクトル $|\alpha\rangle$ と固有ベクトルとの内積 $\alpha_i = \langle i|\alpha\rangle$ の組を列ベクトルで，複素共役を行ベクトルで表す：

$$\boldsymbol{\alpha} \;=\; \begin{pmatrix}\alpha_1\\ \alpha_2\\ \vdots\end{pmatrix}, \qquad \boldsymbol{\alpha}^\dagger \;=\; (\,\alpha_1^*, \alpha_2^*, \cdots). \tag{9.23}$$

また，演算子 $\mathcal{A}$ を作用させた内積は $A_{ij} = \langle i|\mathcal{A}|j\rangle$ を要素とする行列で表す：

$$\boldsymbol{A} \;=\; \begin{pmatrix} A_{11} & A_{12} & \cdots \\ A_{21} & A_{22} & \cdots \\ \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix}. \tag{9.24}$$

このように，量子力学の様々な式を行列の形式で表現することができる。たとえば，(9.22) は次のように表せる：

$$\langle\alpha|\mathcal{A}|\beta\rangle \;=\; \sum_{ij}\alpha_i^* X_{ij}\beta_j \;=\; \boldsymbol{\alpha}^\dagger\boldsymbol{A}\boldsymbol{\beta}.$$

また，ケットベクトル $|\alpha\rangle$ に演算子 $\mathcal{A}$ を作用させて作られるケットベクトルを $|\gamma\rangle = \mathcal{A}\,|\alpha\rangle$ とすると，

$$\langle i|\gamma\rangle \;=\; \langle i|\mathcal{A}|\alpha\rangle \;=\; \sum_j \langle i|\mathcal{A}|j\rangle\,\langle j|\gamma\rangle$$

より，

$$\gamma_i \;=\; \sum_j A_{ij}\alpha_j \;=\; (\boldsymbol{A}\boldsymbol{\alpha})_i \qquad \text{よって} \qquad \boldsymbol{\gamma} \;=\; \boldsymbol{A}\boldsymbol{\alpha}$$

である。

このような行列表現を用いるとき，固有ケット $|i\rangle$ は次のような列ベクトルに対応する：

$$|1\rangle \;\Rightarrow\; \begin{pmatrix}1\\0\\0\\ \vdots\end{pmatrix}, \qquad |2\rangle \;\Rightarrow\; \begin{pmatrix}0\\1\\0\\ \vdots\end{pmatrix}, \qquad \cdots.$$

すなわち，固有ベクトルは単位ベクトルに対応する。

9.3.3　オブザーバブルと演算子の可換性

２つのオブザーバブル A と B があり，それに対応する演算子 $\mathcal{A}$ と $\mathcal{B}$ が交換する場合（$\mathcal{AB}-\mathcal{BA}=0$）を考える。このとき，$\mathcal{A}$ の固有ベクトルに対して

$$0 \;=\; \langle\alpha'|\,(\,\mathcal{AB}-\mathcal{BA}\,)\,|\alpha\rangle \;=\; (a_{\alpha'}-a_\alpha)\,\langle\alpha'|\mathcal{B}|\alpha\rangle$$

より，

$$\langle\alpha'|\mathcal{B}|\alpha\rangle \;=\; \delta_{\alpha'\alpha}\,\langle\alpha|\mathcal{B}|\alpha\rangle$$

が得られる。ここで，両辺に $|\alpha'\rangle$ をかけて，α' について和をとり，

$$\sum_{\alpha'}|\alpha'\rangle\,\langle\alpha'|\mathcal{B}|\alpha\rangle \;=\; \sum_{\alpha'}|\alpha'\rangle\,\delta_{\alpha'\alpha}\,\langle\alpha|\mathcal{B}|\alpha\rangle \;=\; |\alpha\rangle\,\langle\alpha|\mathcal{B}|\alpha\rangle$$

左辺の和に対して固有ベクトルの完備性 (9.19) を用いると，

$$\mathcal{B}\,|\alpha\rangle \;=\; |\alpha\rangle\,\langle\alpha|\mathcal{B}|\alpha\rangle$$

となる。すなわち，$|\alpha\rangle$ は演算子 $\mathcal{A}$ の固有ベクトルであると同時に，演算子 $\mathcal{B}$ の固有ベクトルであり，その固有値は $b=\langle\alpha|\mathcal{B}|\alpha\rangle$ である。つまり，２つのオブザーバブルに対応する演算子の同時固有ベクトルである。そこで，そのことを明瞭に示すために，同時固有ベクトルを $|a,b\rangle$ と書くことにする。すなわち，

$$\mathcal{A}\,|a,b\rangle \;=\; a\,|a,b\rangle, \qquad \mathcal{B}\,|a,b\rangle \;=\; b\,|a,b\rangle$$

が成り立つ。

演算子 $\mathcal{A}$ の固有値 a に属する固有ベクトルが１つしか存在しない場合，固有ケットベクトルを $|a\rangle$ と書けば，その固有状態は一意的に指定でき，演算子 $\mathcal{B}$ の固有値を書く必要はない。しかし，固有値 a に属する固有ベクトルが２つ以上存在する場合（これを **縮退**（degeracy）という），演算子 $\mathcal{B}$ の固有値 b を明示することで，演算子 $\mathcal{A}$ について縮退した状態を区別することができる。
固有値 a と b を指定して固有状態 $|a,b\rangle$ が一意的に定まるとき，これらの状態の規格直交性は

$$\langle a,b|a',b'\rangle \;=\; \delta_{aa'}\,\delta_{bb'},$$

完備性は

$$\sum_{ab}|a,b\rangle\langle a,b| \;=\; 1$$

と表せる。

9.4 連続的スペクトルをもつ固有値

9.4.1 一般論

ここまでは，オブザーバブルが離散的な固有値をもつとして話を進めてきた。ここでは，固有値が連続的な場合に，今までの議論を拡張していく。連続的な固有値をもつオブザーバブルの例は，位置や運動量である。連続的な固有値をもつオブザーバブルを Q，それに対応する演算子を $\mathcal{Q}$，固有値を q とする：

$$\mathcal{Q}\,|q\rangle \;=\; q\,|q\rangle. \tag{9.25}$$

固有値 q に属する固有ケットを $|q\rangle$ で表すことにする。固有ケットはディラックのデルタ関数で規格化され，内積 $\langle q|q'\rangle$ は

$$\langle q|q'\rangle \;=\; \delta(q-q') \tag{9.26}$$

である。

連続的固有値をもつケット $|q\rangle$ を重ね合わせて 2 つのケット $|\alpha\rangle$，$|\beta\rangle$ を作る：

$$|\alpha\rangle \;=\; \int \mathrm{d}q\, f(q)\,|q\rangle, \qquad |\beta\rangle \;=\; \int \mathrm{d}q\, g(q)\,|q\rangle. \tag{9.27}$$

ここに，$f(q)$ と $g(q)$ は変数 q の連続関数である。このとき，2 つのベクトルの内積は，(9.26) を用いて，

$$\langle\alpha|\beta\rangle \;=\; \int \mathrm{d}q\,(f(q))^*\int \mathrm{d}q'\,g(q')\,\langle q|q'\rangle \;=\; \int \mathrm{d}q\,(f(q))^*g(q)$$

となる。

演算子 $\mathcal{Q}$ の固有ケットが完全系である場合，任意のケットは，(9.27) のように，固有ケットで展開できる：

$$\begin{aligned}|\alpha\rangle \;&=\; \int \mathrm{d}q\,|q\rangle\,\langle q|\alpha\rangle,\\ \langle q|\alpha\rangle \;&=\; \int \mathrm{d}q'\,f(q')\,\langle q|q'\rangle \;=\; \int \mathrm{d}q'\,f(q')\,\delta(q-q') \;=\; f(q).\end{aligned}$$

従って，固有ベクトルの完備性は

$$\int \mathrm{d}q\,|q\rangle\langle q| \;=\; 1 \tag{9.28}$$

と表される。

状態 $|\alpha\rangle$ にある系に，オブザーバブル Q の観測を行い，固有値が q と $q+\mathrm{d}q$ の微小区間に見出される確率は（離散的固有値の場合の拡張として）

$$|\,\langle q|\alpha\rangle\,|^2\mathrm{d}q$$

で与えられるとする。このとき，完備性から，全確率は 1 になる：

$$\int \mathrm{d}q\,|\,\langle q|\alpha\rangle\,|^2 \;=\; \int \mathrm{d}q\,\langle\alpha|q\rangle\,\langle q|\alpha\rangle \;=\; \langle\alpha|\left(\int \mathrm{d}q\,|q\rangle\langle q|\right)|\alpha\rangle \;=\; \langle\alpha|\alpha\rangle \;=\; 1.$$

同様にして，状態 $|\alpha\rangle$ における，オブザーバブル Q の期待値は

$$\langle Q\rangle_\alpha \;=\; \int \mathrm{d}q\, q\,|\,\langle q|\alpha\rangle\,|^2 \;=\; \langle\alpha|\,\mathcal{Q}\,|\alpha\rangle$$

で与えられる。

9.4.2　位置と運動量

位置 x に対応する演算子を，演算子であることを明瞭に表すため，$\widehat{x}$ とハットをつけて表す。位置演算子の固有値方程式は

$$\widehat{x}\,|x\rangle \;=\; x\,|x\rangle \tag{9.29}$$

で，固有値 x に属する固有ケットを $|x\rangle$ で表す。$\widehat{x}$ は演算子であり，x は固有値で単なる数である。固有ケット $|x\rangle$ はデルタ関数で規格化され

$$\langle x|x'\rangle \;=\; \delta(x-x'),$$

完全系をなすと仮定する。

運動量演算子を，位置演算子と同様にハットをつけて $\widehat{p}$ と表す。位置演算子と運動量演算子の交換関係は

$$\begin{aligned}
[\,\widehat{x},\,\widehat{p}\,] &= i\hbar, \\
[\,\widehat{x},\,\widehat{p}^2\,] &= \widehat{p}\,[\,\widehat{x},\,\widehat{p}\,] + [\,\widehat{x},\,\widehat{p}\,]\,\widehat{p} \;=\; 2i\hbar\widehat{p}, \\
[\,\widehat{x},\,\widehat{p}^3\,] &= \widehat{p}\,[\,\widehat{x},\,\widehat{p}^2\,] + [\,\widehat{x},\,\widehat{p}\,]\,\widehat{p}^2 \;=\; 3i\hbar\widehat{p}
\end{aligned}$$

より，一般に，$G(\widehat{p})$ を運動量演算子の関数として，

$$[\,\widehat{x},\,G(\widehat{p})\,] \;=\; i\hbar\,G'(\widehat{p}) \tag{9.30}$$

が成り立つ。ここに，$G'(y)$ は $G(y)$ の 1 階導関数である。

特に，運動量演算子 $\widehat{p}$ の関数を

$$S(\widehat{p}) \;=\; \exp\left(-i\,\frac{a\widehat{p}}{\hbar}\right) \tag{9.31}$$

とすると（指数関数のべき級数で定義する），

$$S(\widehat{p})\,|x\rangle \;=\; |x+a\rangle \tag{9.32}$$

が成り立つ。実際，(9.30) より，交換関係は

$$[\,\widehat{x},\,S(\widehat{p})\,] \;=\; i\hbar\,S'(\widehat{p}) \;=\; a\,S(\widehat{p})$$

であるので，これを $\widehat{x}$ の固有ケットに作用させて，(9.29) を用いると，

$$[\,\widehat{x},\,S(\widehat{p})\,]\,|x\rangle \;=\; \widehat{x}S(\widehat{p})\,|x\rangle - x\,S(\widehat{p})\,|x\rangle \;=\; a\,S(\widehat{p})\,|x\rangle$$

より，

$$\widehat{x}S(\widehat{p})\,|x\rangle \;=\; (x+a)\,S(\widehat{p})\,|x\rangle$$

となる。すなわち，$S(\widehat{p})\,|x\rangle$ は位置演算子 $\widehat{x}$ の固有ケットで，固有値は $x+a$ であるから，(9.32) が得られる。

運動量演算子の関数 (9.31) において，級数展開して a の１次の項までとり

$$S(\widehat{p}) \;=\; 1 - i\,\frac{a\widehat{p}}{\hbar},$$

$a \to 0$ の極限で，

$$\widehat{p}\,|x\rangle \;=\; i\hbar \lim_{a\to 0}\frac{|x+a\rangle - |x\rangle}{a} \;=\; i\hbar\,\frac{\partial}{\partial x}\,|x\rangle \tag{9.33}$$

が得られる。すなわち，位置演算子の固有ケット $|x\rangle$ に対して，運動量演算子は微分演算子 $\widehat{p} = i\hbar\,\partial/\partial x$ で表される。

固有ケットに対する運動量演算子の作用 (9.33) より，

$$\langle x|\,\widehat{p}\,|x'\rangle \;=\; \langle x|\,i\hbar\,\frac{\partial}{\partial x'}\,|x'\rangle \;=\; i\hbar\,\frac{\partial}{\partial x'}\,\langle x|x'\rangle \;=\; i\hbar\,\frac{\partial}{\partial x'}\,\delta(x-x') \;=\; -i\hbar\,\frac{\partial}{\partial x}\,\delta(x-x')$$

である。ここで，右から $\langle x'|$ をかけ x' について積分すると，$\widehat{x}$ の固有ベクトルの完備性により，

$$\langle x|\,\widehat{p} \;=\; -i\hbar\,\frac{\partial}{\partial x}\,\langle x| \tag{9.34}$$

が得られる。すなわち，運動量演算子がブラベクトルに作用するとき，運動量演算子は微分演算子 $\widehat{p} = -i\hbar\,\partial/\partial x$ で表される。一般に，運動量演算子の関数 $G(\widehat{p})$ がブラベクトルに作用するとき，

$$\langle x|\,G(\widehat{p}) \;=\; G(-i\hbar\,\partial/\partial x)\,\langle x| \tag{9.35}$$

が成り立つ。従って，任意のケット $|\alpha\rangle$ に対して，

$$\langle x|\,G(\widehat{p})\,|\alpha\rangle \;=\; G(-i\hbar\,\partial/\partial x)\,\langle x|\alpha\rangle \tag{9.36}$$

である。

位置演算子 $\widehat{x}$ の場合も同様である。位置演算子の関数 $F(\widehat{x})$ に対して，

$$F(\widehat{x})\,|x\rangle \;=\; F(x)\,|x\rangle, \qquad \langle x|\,F(\widehat{x}) \;=\; F(x)\,\langle x| \tag{9.37}$$

また，

$$\langle x|\,F(\widehat{x})\,|x'\rangle \;=\; F(x)\,\langle x|x'\rangle \;=\; F(x)\,\delta(x-x'), \tag{9.38}$$

$$\langle x|\,F(\widehat{x})\,|\alpha\rangle \;=\; F(x)\,\langle x|\alpha\rangle \tag{9.39}$$

が成り立つ。ここで，$F(x)$ は単なる数である。

9.5　波動関数

ブラケットによる表記法では，状態 $|\alpha\rangle$ の波動関数 $\psi_\alpha(x)$ は，$|\alpha\rangle$ を位置演算子の固有ベクトルで展開したときの展開係数である：

$$\psi_\alpha(x) \;=\; \langle x|\alpha\rangle. \tag{9.40}$$

すなわち，

$$|\alpha\rangle \;=\; \int \mathrm{d}x\,|x\rangle\,\langle x|\alpha\rangle \;=\; \int \mathrm{d}x\,|x\rangle\,\psi_\alpha(x)$$

であり，位置 x と $x+\mathrm{d}x$ のあいだに見出される確率，及び波動関数の規格化は

$$|\,\langle x|\alpha\rangle\,|^2\,\mathrm{d}x \;=\; |\,\psi_\alpha(x)\,|^2\,\mathrm{d}x,$$
$$\langle\alpha|\alpha\rangle \;=\; \int \mathrm{d}x\,\langle\alpha|x\rangle\,\langle x|\alpha\rangle \;=\; \int \mathrm{d}x\,|\,\psi_\alpha(x)\,|^2 \;=\; 1$$

である。

$\langle\beta|\,\mathcal{A}\,|\alpha\rangle$ は波動関数を用いて

$$\langle\beta|\,\mathcal{A}\,|\alpha\rangle \;=\; \int \mathrm{d}x \int \mathrm{d}x'\,\langle\beta|x\rangle\,\langle x|\,\mathcal{A}\,|x'\rangle\,\langle x'|\alpha\rangle \;=\; \int \mathrm{d}x \int \mathrm{d}x'\,(\psi_\beta(x))^*\,\langle x|\,\mathcal{A}\,|x'\rangle\,\psi_\alpha(x)$$

で求められる。特に，位置演算子と運動量演算子の場合は

$$\begin{aligned}
\langle\beta|\,F(\widehat{x})\,|\alpha\rangle \;&=\; \int \mathrm{d}x\,\langle\beta|x\rangle\,\langle x|\,F(\widehat{x})\,|\alpha\rangle \;=\; \int \mathrm{d}x\,(\psi_\beta(x))^*\,F(x)\,\psi_\alpha(x)\\
\langle\beta|\,G(\widehat{p})\,|\alpha\rangle \;&=\; \int \mathrm{d}x\,\langle\beta|x\rangle\,\langle x|\,G(\widehat{p})\,|\alpha\rangle \;=\; \int \mathrm{d}x\,(\psi_\beta(x))^*\,G(-i\hbar\,\partial/\partial x)\,\psi_\alpha(x)
\end{aligned}$$

となる。

運動量演算子 $\widehat{p}$ の固有ケット $|p\rangle$ の波動関数 $u_p(x)=\langle x|p\rangle$ は

$$\widehat{p}\,|p\rangle \;=\; p\,|p\rangle$$

であるので，

$$\langle x|\,\widehat{p}\,|p\rangle \;=\; -i\hbar\,\frac{\partial}{\partial x}\,\langle x|p\rangle \qquad \text{より} \qquad -\,i\hbar\,\frac{\partial}{\partial x}\,u_p(x) \;=\; p\,u_p(x)$$

を解いて求められる。規格化を $\langle p|p'\rangle=\delta(p-p')$ として

$$u_p(x) \;=\; \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\,e^{ipx/\hbar} \tag{9.41}$$

となる。運動量演算子の固有ケットを運動量 p を変数とする波動関数で表すこともできる。この波動関数と，位置 x を変数とする波動関数は互いにフーリエ変換によって結ばれている。