

ベクトル、関数、行列、演算子のブラケット表示

filename=bracket-text060313.tex

ディラック (P.M.A. Dirac) が導入したブラケット表示 [1] を用いてベクトル、関数、行列、演算子の性質を見直してみる。このブラケット表示を用いれば、ベクトル、関数、行列、演算子が共通の形式で美しく定式化できる。[2] ブラケット表示は一見、極めて抽象的に見えるが、いったんこれに習熟すれば、捨てるほどに有用であることがすぐわかる。それだけではなく、ベクトル、関数、行列、演算子の理解を深めることにもなるであろう。

1 ベクトルのブラケット表示

1.1 3次元ベクトル代数

1.1.1 ブラベクトル、ケットベクトルの導入

x, y, z 軸方向の単位ベクトル (i, j, k) –基底ベクトル系と呼ぶ– を考える。ベクトルは矢印をもつ線分のような幾何学的表示としてだけではなく、列ベクトル (column vector) として表わすことができる。種々の一般化を可能にするために、 x, y, z 成分の代わり 1, 2, 3 成分などと表示する。ケットベクトル (ket vector) $| \rangle$ を導入して次のように表現する。

$$i \equiv |e_1\rangle \equiv \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} = [1, 0, 0]^T, \quad (1)$$

$$j \equiv |e_2\rangle \equiv \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{bmatrix} = [0, 1, 0]^T, \quad (2)$$

$$k \equiv |e_3\rangle \equiv \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{bmatrix} = [0, 0, 1]^T. \quad (3)$$

添字 T は転置 (transpose) を意味する。次に、単位ベクトルに対応する行ベクトルをブラベクトル (bra vector) として定義する。

$$\langle e_1| \equiv [1, 0, 0], \quad (4)$$

$$\langle e_2| \equiv [0, 1, 0], \quad (5)$$

$$\langle e_3| \equiv [0, 0, 1]. \quad (6)$$

この表現が妥当であることは、 i, j, k についての内積を計算すれば容易に理解できよう。

$$i \cdot i = 1 \quad \rightarrow \quad \langle e_1|e_1\rangle = [1, 0, 0][1, 0, 0]^T = 1, \quad (7)$$

$$i \cdot j = 0 \quad \rightarrow \quad \langle e_1|e_2\rangle = [1, 0, 0][0, 1, 0]^T = 0. \quad (8)$$

括弧 $\langle \rangle$ (bracket, bra-c-ket) をほぼ二つに分割したのがブラベクトル (bra vector) $\langle |$ とケットベクトル (ket vector) $| \rangle$ である。ほかの組み合わせも同様に計算できる。このように定義されたブラベクトル、ケットケットを用いれば、3次元空間の基底ベクトル系の直交規格性は次のように簡潔に表すことができる。

$$\langle e_i | e_j \rangle = \delta_{ij}, \quad (i, j = 1, 2, 3). \quad (9)$$

ここで δ_{ij} は次式で定義されるクロネッカーのデルタ記号である。

$$\delta_{ij} \equiv \begin{cases} 1 & \text{if } i = j, \\ 0 & \text{if } i \neq j. \end{cases} \quad (10)$$

成分の値が複素数である一般の場合を想定して、ベクトルの内積を一般化する。3次元空間において任意のベクトル $|A\rangle$ を一般には複素数となる成分で表示する、言い換えれば、基底ベクトル系 $\{|e_i\rangle, i = 1, 2, 3\}$ で次のように展開する。

$$|A\rangle = A_1|e_1\rangle + A_2|e_2\rangle + A_3|e_3\rangle = \sum_{j=1}^3 A_j|e_j\rangle. \quad (11)$$

この列ベクトルの共役ベクトルを次のように定義する。

$$\langle A| = A_1^*\langle e_1| + A_2^*\langle e_2| + A_3^*\langle e_3| = \sum_{j=1}^3 A_j^*\langle e_j|. \quad (12)$$

共役ベクトルの成分を複素共役にするべきことは、列ベクトルが1列しか行列要素をもたない列行列 (column matrix) であり、行ベクトルが1行しか行列要素をもたない行行列 (row matrix) であること、および共役行列 (adjoint matrix) の定義を考えると納得できるであろう。二つのベクトル $A = |A\rangle = [A_1, A_2, A_3]^T = A_1|e_1\rangle + A_2|e_2\rangle + A_3|e_3\rangle$ と $B = |B\rangle = [B_1, B_2, B_3]^T = B_1|e_1\rangle + B_2|e_2\rangle + B_3|e_3\rangle$ の内積は次のように表される。

$$\langle A|B\rangle = [A_1^*, A_2^*, A_3^*][B_1, B_2, B_3]^T = A_1^*B_1 + A_2^*B_2 + A_3^*B_3 \quad (13)$$

のように表される。このように定義された内積の値は一般には複素数であり、この複素共役をとると

$$\begin{aligned} \langle A|B\rangle^* &= A_1B_1^* + A_2B_2^* + A_3B_3^* = B_1^*A_1 + B_2^*A_2 + B_3^*A_3 \\ &= \langle B|A\rangle \end{aligned} \quad (14)$$

であることがわかる。したがって、同じベクトルの内積は

$$\langle A|A\rangle = [A_1^*, A_2^*, A_3^*][A_1, A_2, A_3]^T = |A_1|^2 + |A_2|^2 + |A_3|^2 \quad (15)$$

のように実数となり、通常のベクトルの大きさの2乗の定義を含む。

1.1.2 射影演算子と基底ベクトル系の完全性

式(1)-(6)を用いて "ケット・ブラ" を計算してみる。

$$|e_1\rangle\langle e_1| = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} [1, 0, 0] = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \quad (16)$$

他も同様に計算できる。式(11)の左辺からブラベクトル $\langle e_i|$ との内積をとれば

$$\langle e_i|A\rangle = \sum_{j=1}^3 A_j \langle e_i|e_j\rangle \quad (17)$$

となる。右辺において基底ベクトルの直交規格性(9)を用いれば、

$$\langle e_i|A\rangle = A_i \quad (18)$$

となる。この式(18)は次のように表される。

$$\sum_{i=1}^3 A_i |e_i\rangle = \sum_{i=1}^3 |e_i\rangle \langle e_i|A\rangle \quad (19)$$

ここで

$$|e_i\rangle\langle e_i| \equiv P_i, \quad (i = 1, 2, 3) \quad (20)$$

と定義すると次のような性質をもつ。

$$P_i^2 = P_i, \quad (21)$$

$$P_i|A\rangle = A_i|e_i\rangle. \quad (22)$$

この P_i はベクトル $|A\rangle$ から i 番目の成分とその向きの基底ベクトルだけを取り出す働きがあること(射影演算子 (projection operator)) がわかる。

今考えているベクトルは任意であることを考えると、ケットベクトル、ブラベクトルの積について次の関係式が成立する。

$$\sum_{i=1}^3 |e_i\rangle\langle e_i| = \sum_{i=1}^3 P_i = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \quad (23)$$

となり、結果は次のようにまとめられる：

$$\sum_{i=1}^3 |e_i\rangle\langle e_i| = \hat{1}^{(3)}. \quad (24)$$

この関係式は、その一般の場合への拡張に際して、非常に強力であることが後にわかるであろう。最後の項 $\hat{1}^{(3)}$ は (3×3) 行列の単位行列の意味であるが、dyadic と呼ばれることもあるが、特にことわらない限り、単純に 1 と記されることが多い。この例のように、3次元空間における任意のベクトルが基底ベクトルの組 $\{|e_1\rangle, |e_2\rangle, |e_3\rangle\}$ で展開される場合に、この基底ベクトルの組は完全性(完備性, completeness, closure relation)をもつという。

1.1.3 線形演算子とその行列表現

さて、ここで演算子 (operator) \hat{O} を、あるベクトル $|A\rangle$ に作用して、別のベクトル $|B\rangle$ に変換するものとして定義する。

$$\hat{O}|A\rangle = |B\rangle. \quad (25)$$

任意の数 x, y に対して、

$$\hat{O}(x|A\rangle + y|B\rangle) = x(\hat{O}|A\rangle) + y(\hat{O}|B\rangle) \quad (26)$$

が成立する場合には、その演算子は線形 (linear) であるという。線形演算子 (linear operator) は、すべてのベクトルに対して作用した結果のベクトルがわかっているだけで完全に決定される。任意のベクトルは基底 $\{|e_i\rangle, i = 1, 2, 3\}$ の線形結合で表されるので、演算子の基底ベクトルに対する作用を知れば、その演算子は一義的に定められる。ベクトル $\hat{O}|e_i\rangle$ は基底ベクトル $\{|e_j\rangle, j = 1, 2, 3\}$ の線形結合として書ける。その展開係数を O_{ji} とすると

$$\hat{O}|e_i\rangle = \sum_{j=1}^3 |e_j\rangle O_{ji}, \quad (i = 1, 2, 3) \quad (27)$$

と書ける。 $3 \times 3 = 9$ 個の数 $O_{ji}, (i, j = 1, 2, 3)$ は行列 (matrix) と呼ばれる、次のような 2 次元の配列に並べることができる。

$$\begin{bmatrix} O_{11} & O_{12} & O_{13} \\ O_{21} & O_{22} & O_{23} \\ O_{31} & O_{32} & O_{33} \end{bmatrix}. \quad (28)$$

この行列要素は次のようにして導出できる。すなわち、完全性 (24) を用いて

$$\hat{O}|e_i\rangle = \hat{1}^{(3)}\hat{O}|e_i\rangle \quad (29)$$

$$= \sum_{j=1}^3 |e_j\rangle \langle e_j|\hat{O}|e_i\rangle, \quad (O_{ji} \equiv \langle e_j|\hat{O}|e_i\rangle) \quad (30)$$

が得られる。この行列 (28) を基底 $\{|e_i\rangle, i = 1, 2, 3\}$ における演算子 \hat{O} の表現行列 (matrix representation) という。この行列により演算子 \hat{O} は任意のベクトルにどのように作用するかを完全に指定できる。したがって、以下、演算子とその表現行列を同じ記号 \hat{O} で表すことにする。

2 つの演算子 \hat{A}, \hat{B} の積である別の演算子 \hat{C} の表現行列は完全性 (24) を用いて

$$\hat{C}|e_j\rangle = \sum_{i=1}^3 |e_i\rangle \langle e_i|\hat{C}|e_j\rangle = \sum_{i=1}^3 C_{ij}|e_i\rangle. \quad (C_{ij} \equiv \langle e_i|\hat{C}|e_j\rangle) \quad (31)$$

が得られる。一方、完全性 (24) を途中で 2 回用いて

$$\begin{aligned} \hat{A}\hat{B}|e_j\rangle &= \sum_{i,k=1}^3 |e_i\rangle \langle e_i|\hat{A}|e_k\rangle \langle e_k|\hat{B}|e_j\rangle = \sum_{i,k=1}^3 A_{ik}B_{kj}|e_i\rangle \\ &= \sum_{i=1}^3 \left(\sum_{k=1}^3 A_{ik}B_{kj} \right) |e_i\rangle \quad (A_{ij} \equiv \langle e_i|\hat{A}|e_j\rangle, B_{ij} \equiv \langle e_i|\hat{B}|e_j\rangle) \end{aligned} \quad (32)$$

となる。式(31)と式(32)を比較すると

$$C_{ij} = \sum_{k=1}^3 A_{ik} B_{kj} \quad (33)$$

が得られる。これは行列の積の定義である。この結果は、完全性(24)を1回用いて直接に求めることもできる。

$$\begin{aligned} C_{ij} &= \langle e_i | \hat{C} | e_j \rangle = \langle e_i | \hat{A} \hat{B} | e_j \rangle = \langle e_i | \hat{A} \sum_{k=1}^3 | e_k \rangle \langle e_k | \hat{B} | e_j \rangle \\ &= \sum_{k=1}^3 A_{ik} B_{kj}. \end{aligned} \quad (34)$$

このように、演算子の積の表現行列は演算子の表現行列の積となる。

2つの演算子 \hat{A}, \hat{B} の作用する順序、あるいは2つの演算子の表現行列を乗じる順序は非常に重要であり、一般には、 $\hat{A}\hat{B} \neq \hat{B}\hat{A}$ となる。つまり、2つの演算子またはそれらの表現行列は必ずしも交換可能(可換)ではない。2つの演算子または行列 \hat{A}, \hat{B} の交換子(commutator)を

$$[\hat{A}, \hat{B}] \equiv \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A} \quad (35)$$

で定義する。また、反交換子(anti-commutator)を

$$\{\hat{A}, \hat{B}\} \equiv \hat{A}\hat{B} + \hat{B}\hat{A} \quad (36)$$

と定義する。

1.1.4 行列の基本的性質

1.1.5 行列式とその基本的性質

1.1.6 基底の変換

1.1.7 非直交基底のシュミット直交化法

1.2 n 次元複素ベクトル空間

3次元ベクトル代数の考え方を成分が複素数であるような n 次元複素ベクトル空間へ拡張しよう。(この目的は量子力学における波動関数または状態ベクトルが数学的にはこの抽象的な空間におけるベクトルの性質をもっていて、その理論的内容の理解と計算のために、非常に有用であることが知られているからである。)

3次元空間における基底 $\{|e_i\rangle, i=1, 2, 3\}$ との類推から記号 $\{|i\rangle, i=1, 2, \dots, n\}$ で表される n 次元複素ベクトル空間を考える。この基底は直交規格化されていて、かつ完全性をもっているとする。すなわち、

$$\langle i | j \rangle = \delta_{ij}, \quad (i, j = 1, 2, \dots, n), \quad (37)$$

$$\sum_{i=1}^n |i\rangle \langle i| (= \sum_{i=1}^n \hat{P}_i) = 1, \quad (38)$$

$$\hat{P}_i \equiv |i\rangle \langle i| \quad (39)$$

と表される。これは 3 次元の基底ベクトル系の完全性の一般化になっている。

2 複素関数とその内積のブラケット表示

2.1 ベクトルとしての関数と関数系の直交規格性、完全性

変数 x に対する、ある関数 (function) ψ の値は通常 $\psi(x)$ と表現される。しかし、関数は文字どおり、その「機能 (function)」にこそ基本的特徴があり、特定の変数に対する関数の値に意味があるわけではない。そこで、関数を無限可附番個の成分 (x 成分) をもつ抽象的なベクトル $|\psi\rangle$ としてみなして、 x という変数に対する関数 ψ の値、 $\psi(x)$ をベクトル $|\psi\rangle$ の x 成分として解釈する。換言すれば、関数 ψ の値、 $\psi(x)$ をブラケット $\langle x|$ (後述の式 (53) 参照) とケットベクトル $|\psi\rangle$ の内積とみなすのである。

$$\langle x|\psi\rangle \equiv \psi(x), \quad (40)$$

$$\langle \psi|x\rangle \equiv \psi^*(x). \quad (41)$$

ある関数 $\psi(x)$ と別の関数 $\phi(x)$ の共役複素数の積の積分を、上述のように解釈した抽象的なベクトルの内積とみなしてみよう。

$$\int_{-\infty}^{\infty} \phi^*(x)\psi(x)dx = \int_{-\infty}^{\infty} \langle \phi|x\rangle \langle x|\psi\rangle dx \equiv \langle \phi|\psi\rangle. \quad (42)$$

すると、この内積の複素共役をとるとブラ、ケットベクトルが逆になることがわかる。

$$(\langle \phi|\psi\rangle)^* = \langle \psi|\phi\rangle, \quad (43)$$

$$(\langle \phi|\phi\rangle)^* = \langle \phi|\phi\rangle. \quad (44)$$

式 (40) と (41) を式 (42) に代入すると

$$\int_{-\infty}^{\infty} \langle \phi|x\rangle \langle x|\psi\rangle dx = \langle \phi|\psi\rangle \quad (45)$$

関数 $\psi(x)$ と $\phi(x)$ が任意であることを考慮して、式 (45) の等式の両辺を比較すると、結局

$$\int_{-\infty}^{\infty} |x\rangle dx \langle x| = 1 \quad (46)$$

という、一見不思議な関係式が導かれる。

この関係式 (46) の意味を次のような手順で考えてみよう。 n 次元の基底ベクトルの場合、成分のラベルの変化幅が 1 ($\Delta i = 1$) であると考えて、(39) 式を次のように書きなおしてみる。

$$\sum_{i=1}^n |e_i\rangle \Delta i \langle e_i| = 1, \quad (\Delta i = 1) \quad (47)$$

式 (46) における dx を離散的なベクトル系のラベルの変化幅 Δi の拡張とみなせば、式 (46) は無限可附番個の基底ベクトル系 $\{|x\rangle, -\infty < x < \infty\}$ の完全性の表現とみなせる。

ここで、あるベクトルの組 $\{|\phi_n\rangle\}$ の内積 $\langle\phi_n|\phi_{n'}\rangle$ が次の性質を満たすとする。

$$\langle\phi_n|\phi_{n'}\rangle = \delta_{nn'}, \quad (n, n' = 1, 2, \dots) \quad (48)$$

この式は抽象的ではあるが、ベクトルの規格直交性を表すと考えてよいであろう。ここで式 (46) を用いると

$$\int_{-\infty}^{\infty} \phi_n^*(x)\phi_{n'}(x)dx = \delta_{nn'}, \quad (n, n' = 1, 2, \dots) \quad (49)$$

が得られる。一般に、関数系 $\{\phi_n(x), n = 1, 2, \dots\}$ が上の関係式を満たす場合には、この関数系は規格直交化されているという。

ケットベクトル $|x\rangle$ の定義を考えるために演算子の作用の意味を考える。一般には、ひとつの演算子 \hat{A} はある関数 (ベクトル $|\psi\rangle$) に作用して別の関数 (ベクトル $|\phi\rangle$) に変換する。

$$\hat{A}|\psi\rangle = |\phi\rangle. \quad (50)$$

例えば、微分演算子 d/dx は関数 (x^3) に作用して、別の関数 $(3x^2)$ に変換する。

$$\frac{d}{dx}(x^3) = (3x^2). \quad (51)$$

しかし、特別な場合には、演算子の作用により変換された関数が元の関数の大きさだけが変化することがある。このとき、この関数を固有関数と呼ぶ。例えば、次式のように、関数 $\psi(x) = e^{bx}$, (b : 一定値) は演算子 d/dx の固有関数になっている。

$$\frac{d}{dx}\psi(x) = be^{bx} = b\psi(x). \quad (52)$$

このような意味で、ケットベクトル $|x\rangle$ は演算子 \hat{x} が作用したとき、 x という値を与える固有ベクトル (固有関数) であると考えられる。

$$\hat{x}|x\rangle = x|x\rangle. \quad (53)$$

(参考: 量子力学においては、位置演算子 \hat{x} の固有状態 $|x\rangle$ において、位置という物理量の測定を行えば、測定値 x が得られると考える。) もちろん、

$$\hat{x}|x'\rangle = x'|x'\rangle. \quad (54)$$

ベクトル $|x\rangle$ の内積はクロネッカーのデルタ記号を拡張したディラックのデルタ関数となる。すなわち

$$\langle x'|x\rangle = \delta(x - x'). \quad (55)$$

この関係は以下のようにして証明される。一般に、二つの関数 (ベクトル) $|\phi\rangle, |\psi\rangle$ の内積は、完全性 (46) を用いて、次のように書きなおせる。

$$\langle\phi|\psi\rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \langle\phi|x\rangle dx \langle x|\psi\rangle. \quad (56)$$

ここで、 $\phi\rangle$ が $|x'\rangle$ であるとする、

$$\begin{aligned}\langle x'|\psi\rangle &= \int_{-\infty}^{+\infty} \langle x'|x\rangle dx \langle x|\psi\rangle \\ \rightarrow \psi(x') &= \int_{-\infty}^{+\infty} \langle x'|x\rangle \psi(x) dx\end{aligned}\quad (57)$$

が得られる。ここで、関数(ベクトル) $|\psi\rangle$ は任意であるから、式(55)が成立しなければならない。

デルタ関数の定義の仕方はいくつかあるが、ここでは階段関数 $\theta(x)$ と実際的な計算で有用な指数関数型の両方を与えておく。

$$\theta(x) \equiv \begin{cases} 1 & \text{if } 0 \leq x, \\ 0 & \text{if } 0 > x. \end{cases}\quad (58)$$

を用いる。この階段関数の微分によってデルタ関数は

$$\delta(x) \equiv \frac{d\theta(x)}{dx}.\quad (59)$$

と定義される。デルタ関数は指数関数によって、次のようにも表される。

$$\delta(x-x') \equiv \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \exp[i(x-x')k] dk (= \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} e^{i(x-x')k} dk).\quad (60)$$

デルタ関数は次のような性質をもつ。

$$\delta(x) = \delta(-x),\quad (61)$$

$$\delta(x) = 0 \quad (x \neq 0),\quad (62)$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} \delta(x) dx = 1,\quad (63)$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} \delta(x-x_0) f(x) dx = f(x_0).\quad (64)$$

ここで $f(x)$ は任意の関数である。

2.2 関数系の完全性

通常の基底ベクトルの組と同様の意味で、任意の関数 $|\psi\rangle$ を規格直交関数系 $\{|\phi_n\rangle, n = 1, 2, \dots\}$ によって展開できる場合(展開係数を $c_n, n = 1, 2, \dots$)には、この関数系は完全性をもつという。この場合には

$$|\psi\rangle = \sum_{n'} c_{n'} |\phi_{n'}\rangle \quad (\psi(x) = \sum_{n'} c_{n'} \phi_{n'}(x)),\quad (65)$$

$$\rightarrow \langle \phi_n | \psi \rangle = \sum_{n'} c_{n'} \langle \phi_n | \phi_{n'} \rangle = c_n,\quad (66)$$

$$\rightarrow |\psi\rangle = \sum_n |\phi_n\rangle \langle \phi_n | \psi \rangle.\quad (67)$$

となる。ここで関数 $|\psi\rangle$ が任意であるから、規格直交関数系の完全性は

$$\sum_n |\phi_n\rangle\langle\phi_n| = 1 \quad (68)$$

と表される。これは基底ベクトル系の完全性の式と対応している。式 (68) の両辺について、 $|x\rangle, |x'\rangle$ の内積をとって、式 (55) を用いると、規格直交関数系に対する完全性についての通常の状態式が得られる。

$$\sum_n \phi_n^*(x)\phi_n(x') = \delta(x - x'). \quad (69)$$

3 演算子のブラケット表示

ここで、完全系をなす直交規格化された関数系を $\{|\varphi_n\rangle, n = 1, 2, \dots\}$ とすると

$$\sum_n |\varphi_n\rangle\langle\varphi_n| = 1 \quad (70)$$

となる。この関数系を用いて、演算子 \hat{A} をブラケット、ケットベクトルで表現することを考える。式 (70) を \hat{A} の左右からかけると

$$\hat{A} = \sum_{nn'} |\varphi_n\rangle\langle\varphi_n|\hat{A}|\varphi_{n'}\rangle\langle\varphi_{n'}| \quad (71)$$

$$= \sum_{nn'} \langle\varphi_n|\hat{A}|\varphi_{n'}\rangle|\varphi_n\rangle\langle\varphi_{n'}|. \quad (72)$$

ケットベクトルが列ベクトル、ブラケットが行ベクトルであることを考えれば、演算子 (の作用する内容の全体) が行列で表現されることがわかるであろう。ここで、演算子を含む関数 (ベクトル) の内積は

$$\begin{aligned} \langle\varphi_n|\hat{A}|\varphi_{n'}\rangle &= \langle\varphi_n|\int|x\rangle dx \langle x|\hat{A}\int|x'\rangle dx' \langle x'|\varphi_{n'}\rangle \\ &= \int\int\langle\varphi_n|x\rangle\langle x|\hat{A}|x'\rangle\langle x'|\varphi_{n'}\rangle dx dx' \end{aligned} \quad (73)$$

と表される。

演算子 \hat{A} が局所的な演算子の場合、ひとつの位置演算子 \hat{x} の級数展開だけで表されるとき、テーラー展開を行って

$$\hat{A} \equiv A(\hat{x}) = a_0 + a_1\hat{x} + a_2\hat{x}^2 + \dots + a_n\hat{x}^n + \dots \quad (74)$$

と書き直す。ここで、 $\{a_n, n = 0, 1, 2, \dots\}$ は展開係数である。さらに、関係式 (55) を用いると

$$\begin{aligned} \langle x|\hat{A}|x'\rangle &= \langle x|A(\hat{x})|x'\rangle = \langle x|A(x')|x'\rangle \\ &= A(x')\langle x|x'\rangle = A(x')\delta(x - x') \\ &= A(x)\delta(x - x') \end{aligned} \quad (75)$$

となる。結局、

$$\langle \varphi_n | \hat{A} | \varphi_{n'} \rangle = \int \varphi_n^*(x) A(x) \varphi_{n'}(x) dx. \quad (76)$$

先述したように、一般に、ひとつの演算子 \hat{A} はある関数 (ベクトル $|\psi\rangle$) に作用して別の関数 (ベクトル $|\phi\rangle$) に変換する。しかし、一つの演算子 \hat{A} に対して、ある特別な関数 $\{|\phi_n\rangle, n = 1, 2, \dots\}$ の場合には、次のように、演算子の作用により変換された関数が元の関数の大きさだけ変化することがある。

$$\hat{A}|\phi_n\rangle = a_n|\phi_n\rangle \quad (n = 1, 2, \dots) \quad (77)$$

このとき、 a_n を固有値、 $|\phi_n\rangle$ を固有関数 (固有ベクトル) とよぶ。

この演算子 \hat{A} の固有値 a_n と直交規格化された固有関数 $|\phi_n\rangle$ の組が完全系をなすとする。

$$\langle \phi_n | \phi_{n'} \rangle = \delta_{nn'}, \quad (78)$$

$$\sum_n |\phi_n\rangle \langle \phi_n| = 1. \quad (79)$$

すると、演算子 \hat{A} は固有値と固有関数を用いて、次のように表される。

$$\hat{A} = \sum_n a_n |\phi_n\rangle \langle \phi_n| \quad (n = 1, 2, \dots) \quad (80)$$

例えば、ハミルトニアン \hat{H} がエネルギー固有値 E_n と直交規格化された固有状態 $|\psi_n\rangle$, ($n = 1, 2, \dots$) を持つときは

$$\hat{H}|\psi_n\rangle = E_n|\psi_n\rangle \quad (81)$$

$$\rightarrow \hat{H} = \sum_n E_n |\psi_n\rangle \langle \psi_n| \quad (n = 1, 2, \dots) \quad (82)$$

と表される。

参考文献

- [1] P.A.M. Dirac, Quantum Mechanics, Clarendon, 1959
ディラック著, 「量子力学」、朝永振一郎 ほか 共譯、岩波書店, 1968
(イギリスの理論物理学者ディラック (Paul Adrien Maurice Dirac)。量子力学の変換論的定式化、陽電子の存在の仮説を提唱。ノーベル物理学賞受賞。)
- [2] A. ザボ, N. S. オストランド 著, 「新しい量子化学：電子構造の理論入門」大野公男, 阪井健男, 望月祐志訳、東京大学出版会, 1987.7-1988.3 (特に、第一章)