24. 量子論におけるブラ・ケット表記

量子論におけるブラ・ケット表記

§0 疑問の発生

多くの量子力学のテキストに，波動関数の積の積分[1]

$$\int \psi_m^* \psi_m \mathrm{d}\tau \tag{1}$$

がブラ・ケット表記

$$\langle \psi_m | \psi_m \rangle \tag{2}$$

によりシンプルに表すことができると書かれている。その際，ブラ $\langle \psi_m |$ とケット $| \psi_m \rangle$ はそれぞれ次のように

$$\langle \psi_m | \equiv \psi_m^* \tag{3}$$

$$| \psi_m \rangle \equiv \psi_m \tag{4}$$

波動関数と対応しており[2]，互いに複素共役な波動関数を表していると説明される(ことが多い)。しかし，この解説に対して下記のような疑問(や要望)は生じないだろうか。

Q1. ブラとケットが互いに複素共役な波動関数を表すとして，その積である式(2)がなぜ積分という意味をもつのだろうか？ブラとケットが組み合わさるときだけ積分の意味をもつというルール[3]を設けるのだろうか？

Q2. 波動関数群が正規直交系[4]をなすとき，波動関数自身の内積が1，異なる波動関数間の内積が0であることを，

$$\int \psi_m^* \psi_m \mathrm{d}\tau = \langle \psi_m | \psi_m \rangle = 1 \tag{5}$$

$$\int \psi_m^* \psi_n \mathrm{d}\tau = \langle \psi_m | \psi_n \rangle = 0 \tag{6}$$

と表す。式(5)や式(6)の左辺の積分は数学(代数学)の内積の定義[5]を満たすから，波

---

[1] τ は波動関数を表すための“座標”であり，必ずしも位置とは限らず，後述するように運動量の場合もある。

[2] bracket(ブラケット)は，米語では角括弧[ ]，英語では丸括弧( )の意味であり，山形括弧〈 〉は angle bracket と呼ばれる。量子論では，〈 |がブラ(bra)，| 〉がケット(ket)である。ブラとケットはイギリスの理論物理学者 P. A. M. Dirac による命名である。

[3] 「ブラとケットを組み合わせて書くと積分の意味をもつ」とか，「完全なブラケットを書いたときはいつでも積分することを意味する」と説明している成書もあるが，このルールはかなり御都合主義に感じられる。

[4] 規格直交系とも呼ぶ。

[5] 任意のベクトル $\boldsymbol{a}, \boldsymbol{b}, \boldsymbol{c}$ が，次の(i)～(iv)の条件，(i) $(\boldsymbol{a},\boldsymbol{b}) = (\boldsymbol{b},\boldsymbol{a})^*$, (ii) $(\boldsymbol{a}+\boldsymbol{b},\boldsymbol{c}) = (\boldsymbol{a},\boldsymbol{c})+(\boldsymbol{b},\boldsymbol{c})$, (iii) $(k\boldsymbol{a},\boldsymbol{b}) = (\boldsymbol{a},k^*\boldsymbol{b}) = k(\boldsymbol{a},\boldsymbol{b})$, (iv) $(\boldsymbol{a},\boldsymbol{a})$ は0または正の実数(ただし，「$*$」は複素共役，k は定数の意)，を満たすとき，$(\boldsymbol{x},\boldsymbol{y})$ をベクトル $\boldsymbol{x}$ と $\boldsymbol{y}$ の内積と定義する。内積が定義されるベクトル空間を計量ベクトル空間(あるいは，内積空間，Hilbert 空間(ヒルベルト空間，厳密には前ヒルベルト空間))と呼ぶ。

動関数もベクトルであるといえるが，波動関数がベクトル的に扱えることや“直交”することをもう少し(数ベクトルや幾何ベクトルのように)直感的に理解することはできないだろうか？[1]

本書は，上記2点に関連してブラ・ケット表記の意味と有効性を習得し，波動関数および演算子の本質を理解するために書かれた monograph である。

§1 ブラとケットの意味

まず，Q1から考えるために，波動関数の積の積分の中身を調べてみる。ある系の任意の状態[2]を表す波動関数 ψ_m は，正規直交基底関数群[3] $\{u_i\}$ の線形結合により表せるから，

$$\psi_m = \sum_i c_{im} u_i \tag{7}$$

と書くことができる。別の状態を表す波動関数 ψ_n も同様に基底関数を用いて

$$\psi_n = \sum_j c_{jn} u_j \tag{8}$$

と書ける(式(7)の基底関数の添字と式(8)の基底関数の添字に異なる文字(i と j)を用いたが，基底関数は同じものである)。なお，波動関数 ψ_m と ψ_n がいずれも規格化されているとすれば，展開係数[4]は

$$\sum_i |c_{im}|^2 = 1 \tag{9}$$

$$\sum_j |c_{jn}|^2 = 1 \tag{10}$$

を満たす。ψ_m と ψ_n による式(6)の積分に式(7), (8)を代入すると，

$$\int \psi_m^* \psi_n \mathrm{d}\tau = \int \sum_i \sum_j c_{im}^* c_{jn} u_i^* u_j \mathrm{d}\tau \tag{11-1}$$

$$= \sum_i \sum_j c_{im}^* c_{jn} \int u_i^* u_j \mathrm{d}\tau \tag{11-2}$$

$$= \sum_i \sum_j c_{im}^* c_{jn} \delta_{ij} \tag{11-3}$$

---

[1] 代数学でのベクトルに精通している人にとって，Q2は疑問(要望)とはならないであろう。
[2] 系の固有状態を考える必要はなく，固有状態を重ね合わせた状態(混合状態)でも構わない。
[3] 球面調和関数や規格化された Hermite(エルミート)多項式などである。
[4] 線形結合の係数は展開係数とも呼ばれる。

$$=\sum_i c_{im}^* c_{in} \tag{11-4}$$

となる。式(7)と式(8)を行列表現すると，それぞれ

$$\psi_m=(u_1,u_2,\cdots)\begin{pmatrix}c_{1m}\\c_{2m}\\\vdots\end{pmatrix} \tag{12}$$

$$\psi_n=(u_1,u_2,\cdots)\begin{pmatrix}c_{1n}\\c_{2n}\\\vdots\end{pmatrix} \tag{13}$$

となるから[1]，式(11)-4は式(12)および式(13)の展開係数の行列を用いて

$$\sum_i c_{im}^* c_{in}=(c_{1m}^*,c_{2m}^*,\cdots)\begin{pmatrix}c_{1n}\\c_{2n}\\\vdots\end{pmatrix} \tag{14}$$

と表すことができる。式(11) = 式(14)であるから，積分$\int\psi_m^*\psi_n\mathrm{d}\tau$は，積分される波動関数を基底関数で展開した係数を使って計算できることがわかる。そこで，展開係数の行列表現(列ベクトル表記)をケット記号で表すと，

$$\boxed{\left|\psi_m\right\rangle\equiv\begin{pmatrix}c_{1m}\\c_{2m}\\\vdots\end{pmatrix}} \tag{15}$$

となり，ケットの共役を転置複素共役行列[2]に対応させて，これをブラ記号で表すと

$$\boxed{\left\langle\psi_m\right|\equiv(c_{1m}^*,c_{2m}^*,\cdots)} \tag{16}$$

となるから[3]，式(14)は

[1] 基底関数(基底ベクトル)を行ベクトル，成分を列ベクトルで書くのが数学的に正しい表記である。この点に関しては，拙書「「成分」と「基底」の変換の相違点」漁火書店 (文献9)を参照。(URL は下記)
http://home.hiroshima-u.ac.jp/kyam/pages/results/monograph/Ref02_matrix43W.pdf

[2] 転置して複素共役をとることを Hermite 共役(エルミート共役)と呼ぶ。行列 $\boldsymbol{A}$ の Hermite 共役は $\boldsymbol{A}^\dagger$ で表すことが多く($\boldsymbol{A}^\dagger={}^t\boldsymbol{A}^*$ である。ここで，${}^t\boldsymbol{A}$ は $\boldsymbol{A}$ の転置行列，$\boldsymbol{A}^*$ は $\boldsymbol{A}$ の複素共役行列である)，$\boldsymbol{A}^\dagger$ は随伴行列(adjoint matrix)とも呼ばれる。 行列 $\boldsymbol{A}$ から $\boldsymbol{A}^\dagger$ を作ることを「随伴をとる」と表現することもある。なお，列(行)ベクトルの転置は行(列)ベクトルになる。

[3] 行列の成分 $\{c_{im}\}$ は基底関数に依存するので，1つの状態ベクトルについて一義的に決まるわけではない。

$$\sum_i c_{im}^* c_{in} = (c_{1m}^*, c_{2m}^*, \cdots)\begin{pmatrix} c_{1n} \\ c_{2n} \\ \vdots \end{pmatrix} = \langle \psi_m | \psi_n \rangle \tag{17}$$

と表すことができる。式(11)＝ 式(17)であるから，

$$\int \psi_m^* \psi_n \mathrm{d}\tau = \langle \psi_m | \psi_n \rangle \tag{18}$$

が成り立ち，波動関数の積の積分がブラとケットの積に等しくなる(Q1が解決)。式(18)の等号は関数の積の積分と行列の積の“値が等しい”という意味であり，$\langle ○ | △ \rangle$ 自体に$○^*$と△の積を“積分する”というルールが組み込まれているわけではない。ブラ・ケット表記における重要ポイントは，式(15)と式(16)で定義したように，ケットが基底関数による展開係数の列ベクトルに対応し，ブラがその転置複素共役行列(行ベクトル)に対応していることであり[1]，波動関数の積の積分(式(18)左辺)は2つの数ベクトル(式(15), (16))の内積(式(17))に等しい(Q2が解決)。言い換えると，ブラ・ケット表記は行列力学(代数学)的表現であり，波動関数表記は波動力学(解析学)的表現である。つまり，式(18)の左辺が Schrödinger の波動力学に，右辺が Heisenberg の行列力学に対応しており，両者が同じ結果を与えることを示している。

2つのベクトルの内積が0であればベクトルは“直交”するから，波動関数の積の積分が0であるとき(式(6))，波動関数が直交するといえる。なお，式(17)で $m = n$ のときは，ベクトル自身の内積

$$(c_{1m}^*, c_{2m}^*, \cdots)\begin{pmatrix} c_{1m} \\ c_{2m} \\ \vdots \end{pmatrix} = \sum_i |c_{im}|^2 = 1 = \langle \psi_m | \psi_m \rangle \tag{19}$$

となるので式(5)と同じ意味になる。式(18)だけを眺めると，式(3), (4)に示した，$\langle \psi_m | \equiv \psi_m^*$, $| \psi_m \rangle \equiv \psi_m$ という対応(定義)が妥当に見えるが，式(12)と式(15)より

$$\psi_m = (u_1, u_2, \cdots) | \psi_m \rangle \tag{20}$$

であり，その複素共役は

$$\psi_m^* = \langle \psi_m | \begin{pmatrix} u_1^* \\ u_2^* \\ \vdots \end{pmatrix} \tag{21}$$

であるから，式(3)と式(4)をそれぞれブラとケットの定義と考えるのは正しくない。

(付記)

式(12)にブラ・ケット表記と同様のルール(＝共役な行列は転置複素共役行列)を適用して，

[1] ブラとケットがベクトルを表すことを明示するために，ブラをブラベクトル，ケットをケットベクトルと呼ぶこともある(文献4, 6)。

$$\psi_m^* = (c_{1m}^*, c_{2m}^*, \cdots)\begin{pmatrix} u_1^* \\ u_2^* \\ \vdots \end{pmatrix} \tag{22}$$

を$\int\psi_m^*\psi_n\mathrm{d}\tau$に代入すると，

$$\int\psi_m^*\psi_n\mathrm{d}\tau = \int(c_{1m}^*, c_{2m}^*, \cdots)\begin{pmatrix} u_1^* \\ u_2^* \\ \vdots \end{pmatrix}(u_1, u_2, \cdots)\begin{pmatrix} c_{1n} \\ c_{2n} \\ \vdots \end{pmatrix}\mathrm{d}\tau \tag{23)-1}$$

$$= (c_{1m}^*, c_{2m}^*, \cdots)\left[\int\begin{pmatrix} u_1^* \\ u_2^* \\ \vdots \end{pmatrix}(u_1, u_2, \cdots)\mathrm{d}\tau\right]\begin{pmatrix} c_{1n} \\ c_{2n} \\ \vdots \end{pmatrix} \tag{23)-2}$$

$$= (c_{1m}^*, c_{2m}^*, \cdots)\begin{pmatrix} \int u_1^* u_1 \mathrm{d}\tau & \int u_1^* u_2 \mathrm{d}\tau & \cdots \\ \int u_2^* u_1 \mathrm{d}\tau & \int u_2^* u_2 \mathrm{d}\tau & \cdots \\ \cdots & \cdots & \cdots \end{pmatrix}\begin{pmatrix} c_{1n} \\ c_{2n} \\ \vdots \end{pmatrix} \tag{23)-3}$$

$$= (c_{1m}^*, c_{2m}^*, \cdots)\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & \cdots \\ 0 & 1 & 0 & \cdots \\ 0 & 0 & 1 & \cdots \\ \cdots & \cdots & \cdots & \ddots \end{pmatrix}\begin{pmatrix} c_{1n} \\ c_{2n} \\ \vdots \end{pmatrix} \tag{23)-4}$$

$$= (c_{1m}^*, c_{2m}^*, \cdots)\begin{pmatrix} c_{1n} \\ c_{2n} \\ \vdots \end{pmatrix} \tag{23)-5}$$

$$= \sum_i c_{im}^* c_{in} \tag{23)-6}$$

となり，(当然ながら)式(11)と同じ結果が得られる(式(23)-4の中央の行列は単位行列(対角成分がすべて1の行列))。したがって，展開に用いた基底関数をあらわに考えなくても，(基底関数同士の積の部分が単位行列になるので)展開係数だけを行および列ベクトルとして扱っても構わない。このことが，式(15), (16)のように，展開係数行列をブラ・ケットとして表し，波動関数自身のように扱うことができることの根拠である[1]。

§2 基底ベクトルのブラ・ケット表記

[1] 線形代数学の表現を用いると，「n次元計量ベクトル空間は一組の規格直交系を定めておけば，計量空間としてのn次元数ベクトル空間と同一視することができるから，ベクトル$\boldsymbol{x}$に対して，$\boldsymbol{x}$を基底$\{\boldsymbol{a}_i\}$で展開した$\boldsymbol{x} = \Sigma_i x_i \boldsymbol{a}_i$の係数からなる数ベクトル$\begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \end{pmatrix}$を対応させると，内積$(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y})$は数ベクトルの内積と一致する」(文献8参照)となるが，この表現は難解に感じられるのではないだろうか(筆者は，大学初年度に教養科目として線形代数学を学んだ時点で，この表現のありがたみを理解することはできなかった)。

式(7)の両辺に左からu_j^*をかけて積分すると，

$$\int u_j^* \psi_m \mathrm{d}\tau = \int \sum_i c_{im} u_j^* u_i \mathrm{d}\tau \tag{24-1}$$

$$= \sum_i c_{im} \int u_j^* u_i \mathrm{d}\tau \tag{24-2}$$

$$= \sum_i c_{im} \delta_{ji} \tag{24-3}$$

$$= c_{jm} \tag{24-4}$$

となるから，式(7)の展開係数c_{im}は

$$c_{im} = \int u_i^* \psi_m \mathrm{d}\tau \tag{25}$$

と表すことができる。式(25)の右辺はブラ・ケット表記により

$$c_{im} = \langle u_i | \psi_m \rangle \tag{26}$$

と書けるから(直下の付記参照)，式(15)は

$$|\psi_m\rangle \equiv \begin{pmatrix} \langle u_1 | \psi_m \rangle \\ \langle u_2 | \psi_m \rangle \\ \vdots \end{pmatrix} \tag{27}$$

と表すことができる。式(27)からも，式(15)と式(16)について指摘したように，ブラやケットの成分が基底関数に依存することがわかる。

(付記)

式(25)が式(26)により表される根拠を，式(3)や式(4)のように，

$$|\psi_m\rangle \equiv \psi_m \tag{28}$$

$$\langle u_i | \equiv u_i^* \tag{29}$$

という対応で考えるべきではない。式(15)と式(16)で示したように，ブラおよびケットは波動関数を基底関数で展開した係数を成分とする1行あるいは1列の行列であるから，ブラ$\langle u_i|$およびケット$|u_i\rangle$は，それぞれ行ベクトルおよび列ベクトルに対応しなければならない。u_iに対応するブラまたはケットを知るには基底関数による展開を行う必要があるが，u_iは基底関数自身なので，基底関数を基底関数で展開する必要が生じる。(そんなことできるのだろうかと少々戸惑ってしまうが)式(12)や式(13)の表記に忠実に展開すると，たとえば，u_1は

$$u_1 = (u_1, u_2, \cdots, u_i, \cdots) \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ \vdots \end{pmatrix} \tag{30}$$

と表され，u_2 は

$$u_2 = (u_1, u_2, \cdots, u_i, \cdots)\begin{pmatrix}0\\1\\0\\\vdots\end{pmatrix} \tag{31}$$

と表されるから，u_i は

$$u_i = (u_1, u_2, \cdots, u_i, \cdots)\begin{pmatrix}0\\0\\\vdots\\0\\1\\0\\\vdots\end{pmatrix}\begin{array}{l}\leftarrow 第1行\\\leftarrow 第2行\\ \\\leftarrow 第(i-1)行\\\leftarrow 第i行\\\leftarrow 第(i+1)行\\ \end{array} \tag{32}$$

という構造をもっている。式(30) ~ (32)の展開係数行列(列ベクトル)部がケットに対応するから，

$$|u_1\rangle = \begin{pmatrix}1\\0\\0\\\vdots\end{pmatrix}, \qquad |u_2\rangle = \begin{pmatrix}0\\1\\0\\\vdots\end{pmatrix} \tag{33}$$

および,

$$\boxed{|u_i\rangle = \begin{pmatrix}0\\0\\\vdots\\0\\1\\0\\\vdots\end{pmatrix}\begin{array}{l}\leftarrow 第1行\\\leftarrow 第2行\\ \\\leftarrow 第(i-1)行\\\leftarrow 第i行\\\leftarrow 第(i+1)行\\ \end{array}} \tag{34}$$

となる。$\langle u_i|$ は $|u_i\rangle$ の転置複素共役行列であるから,

$$\langle u_i| = (0, 0, \cdots 0, \underset{\substack{\uparrow\\ 第i列}}{1}, 0, \cdots) \tag{35}$$

である(成分がすべて実数であるから転置するだけでよい)。$|\psi_m\rangle$ は式(15)により次式で与えられるから

$$|\psi_m\rangle \equiv \begin{pmatrix}c_{1m}\\c_{2m}\\\vdots\\c_{im}\\\vdots\end{pmatrix} \tag{36}$$

と書ける。式(35)と式(36)から $\langle u_i|\psi_m\rangle$ を作ると,

$$\langle u_i | \psi_m \rangle = (0, 0, \cdots 0, 1, 0, \cdots)\begin{pmatrix} c_{1m} \\ c_{2m} \\ \vdots \\ c_{im} \\ \vdots \end{pmatrix} = c_{im} \tag{37}$$

つまり，式(26)が得られる。以上のことから，(式(18)について述べたのと同様に)式(25)と式(26)の同等性

$$c_{im} = \int u_i^* \psi_m \mathrm{d}\tau = \langle u_i | \psi_m \rangle \tag{38}$$

は$\langle u_i | \equiv u_i^*$と$|\psi_m\rangle \equiv \psi_m$という定義(約束)にもとづくわけではなく，数学的に2つの関数u_i^*とψ_mの積の積分の値が式(35)の行ベクトルで表される$\langle u_i |$と式(36)の列ベクトルで表される$|\psi_m\rangle$という2つのベクトル(行列)の内積の値に等しいことを表しているのである。

§3 単位演算子と射影演算子

式(11) = 式(18)より

$$\langle \psi_m | \psi_n \rangle = \sum_i c_{im}^* c_{in} \tag{39}$$

であり，式(39)の右辺に式(26)を代入すると，

$$\langle \psi_m | \psi_n \rangle = \sum_i \langle \psi_m | u_i \rangle \langle u_i | \psi_n \rangle \tag{40}$$

が得られる。ここで，

$$c_{im}^* = \langle u_i | \psi_m \rangle^* = \langle \psi_m | u_i \rangle \tag{41}$$

を適用した。式(40)から(左からかけられている)$\langle \psi_m |$を除くと，

$$|\psi_n\rangle = \sum_i |u_i\rangle \langle u_i | \psi_n \rangle = \sum_i \langle u_i | \psi_n \rangle |u_i\rangle \tag{42}$$

が得られる。この式の構成要素の意味を考えると，$\langle u_i | \psi_n \rangle$は(式(26)からわかるように)，波動関数$\psi_n$の展開係数の1つ，言い換えると，$\psi_n$の中の基底関数$u_i$の重み，さらに(線形代数的に)言い換えると，状態ベクトル$|\psi_n\rangle$の中の基底ベクトル$|u_i\rangle$方向への射影成分ということになる。そして，基底ベクトルへの射影成分$\langle u_i | \psi_n \rangle$を基底ベクトル全体$\{|u_i\rangle\}$について和をとると，元の状態ベクトル自身$|\psi_n\rangle$が得られることを式(42)は表している。ベクトルを成分に分けてから再び和をとると元のベクトルに戻るというのは当然であり，式(42)は式(26)を用いて式(7)を書き換えただけに見えるかもしれない。しかし，式(42)の中辺からは，(式(7)から得ることができない)次式を得ることができる。

$$\sum_i |u_i\rangle \langle u_i | \tag{43}$$

式(43)は演算子の1つであり，式(42)からわかるように，状態ベクトルに作用しても何ら変化

を与えないので「単位演算子」と呼ばれる[1]。作用しても何も効果がない演算子なので意味がないように感じられるかもしれないが，(後述するように)状態ベクトルや波動関数の記述で威力を発揮する重要なものである。なお，すでに述べたように，式(43)の要素

$$|u_i\rangle\langle u_i| \tag{44}$$

は，これが作用する状態ベクトルの基底ベクトル $|u_i\rangle$ 方向への射影ベクトルを与えるので，「射影演算子」と呼ばれる[2]。

(付記)

射影演算子

$$|u_i\rangle\langle u_i| \tag{45}$$

は，式(34)および式(35)から，

$$|u_i\rangle\langle u_i| = \begin{array}{r} \text{第}1\text{行}\rightarrow \\ \text{第}2\text{行}\rightarrow \\ \\ \text{第}(i-1)\text{行}\rightarrow \\ \text{第}i\text{行}\rightarrow \\ \text{第}(i+1)\text{行}\rightarrow \\ \\ \end{array}\begin{pmatrix}0\\0\\\vdots\\0\\1\\0\\\vdots\end{pmatrix}(0,0,\cdots,0,\underset{\substack{\uparrow\\ \text{第}i\text{列}}}{1},0,\cdots) = \begin{array}{c} \begin{array}{ccccccc} & & & & \text{第}i\text{列} & & \\ & & & & \downarrow & & \end{array} \\ \begin{pmatrix} 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 & 0 & \cdots \\ 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 & 0 & \cdots \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 & 0 & \cdots \\ 0 & 0 & \cdots & 0 & 1 & 0 & \cdots \\ 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 & 0 & \cdots \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \end{pmatrix} \end{array} \begin{array}{l} \\ \\ \\ \\ \\ \\ \leftarrow\text{第}i\text{行} \\ \\ \\ \end{array} \tag{46}$$

で表される i 行 i 列成分のみ1の行列である。射影演算子 $|u_i\rangle\langle u_i|$ を状態ベクトル $|\psi_n\rangle$ に作用させると，

$$|u_i\rangle\langle u_i|\psi_n\rangle = \begin{pmatrix} 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 & 0 & \cdots \\ 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 & 0 & \cdots \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 & 0 & \cdots \\ 0 & 0 & \cdots & 0 & 1 & 0 & \cdots \\ 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 & 0 & \cdots \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \end{pmatrix}\begin{pmatrix} c_{in} \\ c_{2n} \\ \vdots \\ c_{i-1,n} \\ c_{in} \\ c_{i+1,n} \\ \vdots \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \\ c_{in} \\ 0 \\ \vdots \end{pmatrix} = c_{in}\begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \\ 1 \\ 0 \\ \vdots \end{pmatrix} = c_{in}|u_i\rangle \tag{47}$$

となり，その名の通り，射影演算子 $|u_i\rangle\langle u_i|$ が状態ベクトル $|\psi_n\rangle$ から基底ベクトル $|u_i\rangle$ の寄与($|u_i\rangle$ 方向の射影成分)を抜き出している。式(43)は，式(45)つまり式(46)の $i = 1, 2, \cdots$ に関する和であるから，

[1] 単位射影演算子とも呼ばれる。
[2] 素射影子とも呼ばれる。

$$\sum_i |u_i\rangle\langle u_i| = \begin{pmatrix} 1 & 0 & \cdots & 0 & 0 & 0 & \cdots \\ 0 & 1 & \cdots & 0 & 0 & 0 & \cdots \\ \cdots & \cdots & \ddots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ 0 & 0 & \cdots & 1 & 0 & 0 & \cdots \\ 0 & 0 & \cdots & 0 & 1 & 0 & \cdots \\ 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 & 1 & \cdots \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \ddots \end{pmatrix} \tag{48}$$

となるが，これは単位行列であるから式(43)は単位行列 $\boldsymbol{E}$ に等しい。単位演算子は単位行列であるから，行列の積の中に挿入しても何ら影響がないのである[1]。

§4 状態ベクトルと波動関数の関係

4.1 波動関数の本質

式(7)や式(8)では，i によって区別された離散的固有値をもつ基底関数 $\{u_i\}$ で波動関数 ψ_m や ψ_n を表したが，連続量の固有値をもつ基底関数で展開することも可能である。以下では，位置演算子の固有関数による展開を考える。位置(あるいは座標) $\boldsymbol{r}$ 自身は演算子(位置演算子)であり(以降，演算子として書くときは「^」を付けて $\hat{\boldsymbol{r}}$ と記す)，固有値 r と固有関数 $|\boldsymbol{r}\rangle$ をもっており，

$$\hat{\boldsymbol{r}}|\boldsymbol{r}\rangle = r|\boldsymbol{r}\rangle \tag{49}$$

の関係がある。固有関数 $|\boldsymbol{r}\rangle$ は規格直交系をなしているから系の任意の状態を表現するための基底関数となりうる。たとえば，x 軸に関する位置演算子 $\hat{x}$ は固有値 x をもち($\hat{x}|x\rangle = x|x\rangle$)，固有関数 $|x\rangle$ は

$$\langle x|x'\rangle = \delta(x - x') \tag{50}$$

により規格直交系をなしている(固有値 x が連続量であるから，$\delta(x - x')$ は Dirac のデルタ関数である[2])。$|\boldsymbol{r}\rangle$ を基底関数とする単位演算子を作ると，

$$\sum_{\boldsymbol{r}} |\boldsymbol{r}\rangle\langle \boldsymbol{r}| \tag{51}$$

という形になるが，$|\boldsymbol{r}\rangle$ の固有値 r は(離散的ではなく)連続量であるから，和ではなく積分表記して

$$\int \mathrm{d}\boldsymbol{r} |\boldsymbol{r}\rangle\langle \boldsymbol{r}| \tag{52}$$

と書く必要がある[3]。これを系のある状態 $|\psi_n\rangle$ に作用させると

---

[1] ブラやケットあるいは演算子の積のどこにでも挿入することができる。

[2] 離散固有値をもつ固有関数は Kronecker(クロネッカー)のデルタにより，連続固有値をもつ固有関数は Dirac(ディラック)のデルタ関数により規格化される(文献3, 第7章など参照)。

[3] 連続固有値をもつ固有関数のブラやケットは行ベクトルや列ベクトルの形で表すことはできないが，あえてイメージするとすれば，成分が連続的に書かれた(塗りつぶされた)行列ということになる。行ベクトルや列ベクトルとして明示しなくても，離散的な基底ベクトルの(数学的)拡張版として考えればよい。

$$|\psi_n\rangle = \int \mathrm{d}\boldsymbol{r}|\boldsymbol{r}\rangle\langle\boldsymbol{r}|\psi_n\rangle = \int \langle\boldsymbol{r}|\psi_n\rangle|\boldsymbol{r}\rangle\mathrm{d}\boldsymbol{r} \tag{53}$$

となる(離散固有値の場合の式(42)に相当する)。ここで，$\langle\boldsymbol{r}|\psi_n\rangle$ は状態 $|\psi_n\rangle$ の位置 $\boldsymbol{r}$ での値を与えるもの，つまり，波動関数 $\psi_n(\boldsymbol{r})$ そのものであるから，

$$\boxed{\psi_n(\boldsymbol{r}) = \langle\boldsymbol{r}|\psi_n\rangle} \tag{54}$$

となる。式(54)は波動関数の本質を表している式であり(離散固有値の場合の式(37)に相当する)，量子論で頻繁に目にする<u>波動関数$\psi_n(\boldsymbol{r})$は基底関数として位置演算子の固有関数$|\boldsymbol{r}\rangle$を用いて状態$|\psi_n\rangle$を表す場合の展開係数</u>なのである[1]。式(18)について，その左辺が波動力学に，右辺が行列力学に対応することを述べたが，式(54)も波動力学(左辺)と行列力学(右辺)の関係を示している意義深い式である。式(54)により，式(53)を

$$|\psi_n\rangle = \int \psi_n(\boldsymbol{r})|\boldsymbol{r}\rangle\mathrm{d}\boldsymbol{r} \tag{55}$$

と書くこともできる。式(55)からも，これまで繰り返し注意したように，$|\psi_n\rangle = \psi_n(\boldsymbol{r})$ <u>ではない</u>ことがわかるであろう。ここまで，各表記に対する呼び名に深く注意を払ってこなかったが，$|\psi_n\rangle$は，状態 n を表す列ベクトルであり，その状態がどういう変数のどういう関数かには触れていない。したがって，波動“関数”と呼ぶよりも「状態ベクトル」と呼ぶのが適している[2]。$|\boldsymbol{r}\rangle$は演算子 $\hat{\boldsymbol{r}}$ の固有関数であるが，$|\psi_n\rangle$との内積により$|\boldsymbol{r}\rangle$への射影成分を抜き出しているから「基底ベクトル[3]」と呼ぶのが適当である。そして，状態ベクトル$|\psi_n\rangle$と基底ベクトル$|\boldsymbol{r}\rangle$の内積により与えられる$\psi_n(\boldsymbol{r})$が(状態$|\psi_n\rangle$の位置 $\boldsymbol{r}$ での値を与える)「波動関数」である[4]。以上まとめると，

$\lvert\psi_n\rangle$	：状態ベクトル
$\lvert\boldsymbol{r}\rangle$	：基底ベクトル
$\psi_n(\boldsymbol{r})$	：波動関数

となる。式(53)に$\langle\psi_m|$をかけると，

$$\langle\psi_m|\psi_n\rangle = \langle\psi_m|\int \mathrm{d}\boldsymbol{r}|\boldsymbol{r}\rangle\langle\boldsymbol{r}|\psi_n\rangle \tag{56-1}$$

[1] Schrödinger 方程式を解くという作業の中では，どう見ても波動関数が“展開係数”には見えない(であろう)。

[2] 状態ベクトルはベクトルという言葉を含んでいるが，向きと大きさをもった矢印としてのベクトルに結びつける必要はなく，数学的に定義されるベクトル空間を形成する(＝ベクトル空間が定義される演算を満たす)要素である。

[3] 第2版第7刷以前は「固有ベクトル」と記していましたが，1次独立なベクトルの組という意味にもとづいて第2版第8刷以降は「基底ベクトル」と記します。

[4] あえて「状態ベクトル」を空間のある方向を向いたベクトル $\boldsymbol{A}$ にたとえれば，「基底ベクトル」は1つの座標軸 i に沿う単位ベクトル $\boldsymbol{e}_i$ に相当する。そして，「波動関数」はベクトル $\boldsymbol{A}$ の座標軸 i への射影成分 $\boldsymbol{e}_i\cdot\boldsymbol{A}$ に相当する。§0で述べたように，代数学的には波動関数もベクトルであり，それぞれの呼び名は成書によって異なるが，ここでは，混乱を招かないように名称を与えた。

$$= \int \mathrm{d}\boldsymbol{r} \langle \psi_m | \boldsymbol{r} \rangle \langle \boldsymbol{r} | \psi_n \rangle \tag{56-2}$$

$$= \int \psi_m^*(\boldsymbol{r}) \psi_n(\boldsymbol{r}) \mathrm{d}\boldsymbol{r} \tag{56-3}$$

となることからも，波動関数の積の積分が状態ベクトルの内積に等しいことがわかる(これも Q1, Q2への解答となる)。

離散固有値をもつ基底ベクトルによる単位演算子はすでに式(43)で示した形をしており，状態ベクトルの内積$\langle \psi_m | \psi_n \rangle$に単位演算子

$$\sum_i |u_i\rangle\langle u_i| \tag{57}$$

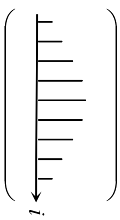
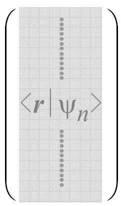
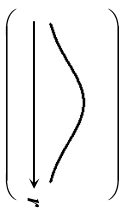
を挿入すると

$$\langle \psi_m | \psi_n \rangle = \sum_i \langle \psi_m | u_i \rangle \langle u_i | \psi_n \rangle \tag{58}$$

が得られ，連続固有値をもつ基底ベクトルの場合の式(56)に対応する形となる。

表1に離散固有値基底系と連続固有値基底系の比較をまとめる。

表1. 離散固有値基底系と連続固有値基底系の比較

	離散固有値系	連続固有値系
規格直交性	$\langle u_i \| u_j \rangle = \delta_{ij}$	$\langle \boldsymbol{r} \| \boldsymbol{r}' \rangle = \delta(\boldsymbol{r} - \boldsymbol{r}')$
射影演算子	$\|u_i\rangle\langle u_i\|$	$\|\boldsymbol{r}\rangle\langle \boldsymbol{r}\|$
単位演算子	$\sum_i \|u_i\rangle\langle u_i\|$	$\int \mathrm{d}\boldsymbol{r}\|\boldsymbol{r}\rangle\langle \boldsymbol{r}\|$
基底ベクトル展開	$\|\psi_n\rangle = \sum_i \|u_i\rangle\langle u_i \| \psi_n\rangle = \sum_i \langle u_i \| \psi_n\rangle \|u_i\rangle$	$\|\psi_n\rangle = \int \mathrm{d}\boldsymbol{r}\|\boldsymbol{r}\rangle\langle \boldsymbol{r} \| \psi_n\rangle = \int \langle \boldsymbol{r} \| \psi_n\rangle \|\boldsymbol{r}\rangle \mathrm{d}\boldsymbol{r}$
展開係数	$c_{in} = \langle u_i \| \psi_n \rangle$	$\psi_n(\boldsymbol{r}) = \langle \boldsymbol{r} \| \psi_n \rangle$ (波動関数)
状態ベクトル	$\|\psi_n\rangle = \begin{pmatrix} \langle u_i \| \psi_n \rangle \\ \langle u_2 \| \psi_n \rangle \\ \vdots \\ \langle u_i \| \psi_n \rangle \\ \vdots \end{pmatrix} =$ 	$\|\psi_n\rangle =$  $=$ 

(注) 連続固有値基底系の状態ベクトル中辺のハッチングは連続的に成分が並んでいることを表しており，文献4, p.137, 脚注2に記されている「∞行1列の行列」を直観的に描いたものである。

4.2 波動関数および演算子の x-表示と p-表示

式(54)の$\langle \boldsymbol{r}|\psi_n\rangle$は状態ベクトル$|\psi_n\rangle$から座標 $\boldsymbol{r}$ を変数とする波動関数$\psi_n(\boldsymbol{r})$を作り出しているから「座標表示」(または x-表示)と呼ばれる[1]。また，$\psi_n(\boldsymbol{r})$は「x-表示での波動関数」である。量子論では1次元運動量演算子が$\hat{p}_x = -\mathrm{i}\hbar(\partial/\partial x)$であることより，$\hat{p}_x$を$|\psi_n\rangle$に作用させることを

$$\hat{p}_x|\Psi_n\rangle = -\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial x}|\Psi_n\rangle \tag{59}$$

と書くことがある。しかし，左辺は正しいが右辺は厳密には正しくない。その理由は，(前述したように)$|\psi_n\rangle$は状態 n を表す列ベクトルであり，その状態がどういう変数のどういう関数かは明らかではないので，いきなり x で微分することができないからである。では，運動量演算子を状態ベクトルに作用させるにはどうすればよいであろうか。以下では，(状態ベクトルの x-表示ではなく)演算子の x-表示について考えてみる。

位置演算子$\hat{x}$と運動量演算子$\hat{p}_x$の間には次の交換関係が成り立つ[2]。

$$[\hat{x},\hat{p}_x] \equiv \hat{x}\hat{p}_x - \hat{p}_x\hat{x} = \mathrm{i}\hbar \tag{60}$$

式(60)の中辺と右辺を$\langle x|$と$|x'\rangle$ではさむと，

$$\langle x|\hat{x}\hat{p}_x - \hat{p}_x\hat{x}|x'\rangle = \mathrm{i}\hbar\langle x|x'\rangle \tag{61}$$

となるが[3]，位置演算子の固有値は連続量であり，式(50)のように Dirac のデルタ関数で規格化されているから，式(61)の右辺は

$$\mathrm{i}\hbar\langle x|x'\rangle = \mathrm{i}\hbar\delta(x-x') \tag{62}$$

と書くことができる。一方，式(61)の左辺は

$$\langle x|\hat{x}\hat{p}_x - \hat{p}_x\hat{x}|x'\rangle = \langle \underline{x|\hat{x}}\hat{p}_x|x'\rangle_{\text{(a)}} - \langle x|\hat{p}_x\underline{\hat{x}|x'}\rangle_{\text{(b)}} \tag{63}$$

となる。引き続きアンダーライン部(a)と(b)を変形する。まず，(b)は位置演算子の固有値方程式[4]を変形して

$$\hat{x}|x'\rangle = x'|x'\rangle \tag{64}$$

$$\downarrow$$

---

1 3次元の場合，$\boldsymbol{r}$-表示という方がふさわしいが，(3次元でも)x-表示と呼ばれることが多い。

2 3次元でも同様の展開になるが，わかりやすいように1次元(x 成分)で考える。

3 類似の記号を混同しないように注意する必要がある。$\hat{x}$は位置演算子，$|x\rangle$は(位置)基底ベクトル，xは(位置)固有値(実数)である。虚数記号は多くの成書でイタリックの「i」で表されているが，本書では IUPAC の推奨にしたがってローマンの「i」で表す(順番を表す添字 i との混同を防ぐ意味もある)。また，ブラ・ケット表記に組み込まれた演算子は行列であるから，混乱を防ぐために記号を変更するべきであるが，この点については後述する。

4 $\boldsymbol{Ax} = a\boldsymbol{x}$ 型の式を固有方程式と呼ぶ場合もあるが，厳密に区別する場合は，$\boldsymbol{Ax} = a\boldsymbol{x}$ を固有値方程式と呼び，固有値 a を見出すための方程式$|\boldsymbol{A} - a\boldsymbol{E}| = 0$を固有方程式と呼ぶ。

$$\hat{x}|x'\rangle = |x'\rangle x' \tag{65}$$

とできる[1]。次に，アンダーライン部(a)を変形するために，固有値方程式

$$\hat{x}|x\rangle = x|x\rangle \tag{66}$$

の両辺の Hermite 共役をとると

$$\hat{x}|x\rangle = x|x\rangle \xrightarrow{\text{Hermite共役}} \langle x|\hat{x}^{\dagger} = \langle x|x \tag{67}$$

となり，位置演算子が Hermite 演算子であること($\hat{x}^{\dagger} = \hat{x}$)を利用すると，式(67)の右辺はさらに

$$\langle x|\hat{x}^{\dagger} = \langle x|x \tag{68}$$

$$\downarrow$$

$$\langle x|\hat{x} = x\langle x| \tag{69}$$

と変形することができる。式(69)を(63)右辺のアンダーライン部(a)に，式(65)をアンダーライン部(b)に適用すると

$$\langle x\,|\,\hat{x}\hat{p}_x\,|\,x'\rangle - \langle x\,|\,\hat{p}_x\hat{x}\,|\,x'\rangle = x\langle x\,|\,\hat{p}_x\,|\,x'\rangle - \langle x\,|\,\hat{p}_x\,|\,x'\rangle x' \tag{70-1}$$

$$= (x - x')\langle x\,|\,\hat{p}_x\,|\,x'\rangle \tag{70-2}$$

が得られる。これが式(62)に等しいことより

$$(x - x')\langle x\,|\,\hat{p}_x\,|\,x'\rangle = \mathrm{i}\hbar\delta(x - x') \tag{71}$$

したがって，

$$\langle x\,|\,\hat{p}_x\,|\,x'\rangle = \mathrm{i}\hbar\frac{\delta(x - x')}{x - x'} \tag{72}$$

を得る。ここで，δ関数の性質

$$z\frac{\mathrm{d}\delta(z)}{\mathrm{d}z} = -\delta(z) \tag{73}$$

を用いると($z \equiv x - x'$ として)，

$$(x - x')\frac{\partial}{\partial(x - x')}\delta(x - x') = -\delta(x - x') \tag{74}$$

より，

$$-\frac{\partial}{\partial(x - x')}\delta(x - x') = \frac{\delta(x - x')}{x - x'} \tag{75}$$

[1] x は単なる数値であるから演算子や基底ベクトルと順序を自由に入れ替えることができる。

が得られる。式(75)の右辺を式(72)の右辺に代入すると，

$$\langle x \mid \hat{p}_x \mid x' \rangle = -\mathrm{i}\hbar \frac{\partial}{\partial(x-x')} \delta(x-x') \tag{76}$$

となるが，固有値 x' をもつ状態を特定の状態 $|x'\rangle$ に固定する(x' を定数扱いする)と，

$$\langle x \mid \hat{p}_x \mid x' \rangle = -\mathrm{i}\hbar \frac{\partial}{\partial x} \delta(x-x') \tag{77}$$

という形になり，式(62)を用いてδ関数部分を位置基底ベクトルで表示し直すと

$$\langle x \mid \hat{p}_x \mid x' \rangle = -\mathrm{i}\hbar \frac{\partial}{\partial x} \langle x | x' \rangle \tag{78}$$

が得られる。なお，式(77)は運動量演算子 $\hat{p}_x$ の x-表示での演算子行列の成分(行列要素)を表している[1]。式(78)から状態ベクトル $|x'\rangle$ に作用している部分を抜き出して

$$\boxed{\langle x | \hat{p}_x = -\mathrm{i}\hbar \frac{\partial}{\partial x} \langle x |} \tag{79}$$

を得る。この式の左辺は，位置基底ベクトルのブラ $\langle x|$ と運動量演算子 $\hat{p}_x$ の積であるから，運動量演算子の x-表示を与えており，その具体的な形が右辺で表されている。言い換えれば，

左辺：ある状態ベクトルに運動量演算子 $\hat{p}_x$ を作用させた結果の x-表示を得る(ためには)
右辺：ある状態ベクトルに $\langle x|$ を作用させて状態ベクトルを x-表示(x の関数としての波動関数)にしてから $-\mathrm{i}\hbar(\partial/\partial x)$ を作用(させればよい)

となる。多くのテキストが，運動量演算子を

$$\hat{p}_x = -\mathrm{i}\hbar \frac{\partial}{\partial x} \quad \text{あるいは，} \quad \hat{p}_x \to -\mathrm{i}\hbar \frac{\partial}{\partial x} \tag{80}$$

と書いているが，これは，暗黙のうちに，運動量演算子が作用する波動関数が x-表示の(x の関数として表された)波動関数であると考えているからであり，運動量演算子の x-表示を厳密に表現したものは式(79)である。なお，x-表示での位置演算子 $\hat{x}$ は，式(69)からわかるように位置(座標)自身であるから

$$\boxed{\langle x | \hat{x} = x \langle x |} \tag{81}$$

となる。これを，多くのテキストが $\hat{x} = x$ (あるいは， $\hat{x} \to x$)と表記している。なお，式(50)

[1] 演算子行列および行列要素については後述する。

と式(81)から得られる

$$\langle x|\hat{x}|x'\rangle = x\delta(x-x') \tag{82}$$

は位置演算子 $\hat{x}$ の x-表示での演算子行列の成分(行列要素)を表している。

x-表示(座標表示)に対して p-表示(運動量表示)もある。x-表示での位置演算子 $\hat{x}$ が位置(座標)自身であるのと同様に，p-表示の運動量演算子 $\hat{p}_x$ は運動量自身 p_x である。以下では，位置演算子 $\hat{x}$ の p-表示がどのような形になるか考えよう(運動量演算子の x-表示の場合とほぼ同じ展開になることは予想できるが，以下にきちんと示しておく)。式(60)の中辺と右辺を $\langle p_x|$ と $|p'_x\rangle$ ではさむと，

$$\langle p_x|\hat{x}\hat{p}_x - \hat{p}_x\hat{x}|p'_x\rangle = \mathrm{i}\hbar\langle p_x|p'_x\rangle \tag{83}$$

となる[1]。運動量演算子の固有値も連続量であるから，右辺は

$$\mathrm{i}\hbar\langle p_x|p'_x\rangle = \mathrm{i}\hbar\delta(p_x - p'_x) \tag{84}$$

と書くことができる。式(83)の左辺は

$$\langle p_x|\hat{x}\hat{p}_x - \hat{p}_x\hat{x}|p'_x\rangle = \langle p_x|\hat{x}\underbrace{\hat{p}_x|p'_x\rangle}_{\text{(a)}} - \langle\underbrace{p_x|\hat{p}_x}_{\text{(b)}}\hat{x}|p'_x\rangle \tag{85}$$

の形に変形できる。アンダーライン部(a)は，運動量演算子の固有値方程式を変形して，

$$\hat{p}_x|p'_x\rangle = p'_x|p'_x\rangle \tag{86}$$

$$\downarrow$$

$$\hat{p}_x|p'_x\rangle = |p'_x\rangle p'_x \tag{87}$$

となる。アンダーライン部(b)を変形するために，固有値方程式

$$\hat{p}_x|p_x\rangle = p_x|p_x\rangle \tag{88}$$

の両辺の Hermite 共役をとると

$$\hat{p}_x|p_x\rangle = p_x|p_x\rangle \xrightarrow{\text{Hermite共役}} \langle p_x|\hat{p}_x^\dagger = \langle p_x|p_x \tag{89}$$

となり，運動量演算子は Hermite 演算子($\hat{p}_x^\dagger = \hat{p}_x$)であるから(後述)，式(89)の右辺はさらに

$$\langle p_x|\hat{p}_x^\dagger = \langle p_x|p_x \tag{90}$$

$$\downarrow$$

$$\langle p_x|\hat{p}_x = p_x\langle p_x| \tag{91}$$

と変形することができる。式(87)を式(85)右辺のアンダーライン部(a)に，式(91)をアンダーライン部(b)に適用すると

[1] 類似の記号を混同しないように注意する必要がある。 $\hat{p}_x$ は運動量演算子， $|p_x\rangle$ は(運動量)基底ベクトル， p_x は(運動量)固有値(実数)である。 p_x は単なる数値であるから演算子や基底ベクトルと順序を自由に入れ替えることができる。

$$\langle p_x|\hat{x}\hat{p}_x|p'_x\rangle-\langle p_x|\hat{p}_x\hat{x}|p'_x\rangle=\langle p_x|\hat{x}|p'_x\rangle p'_x-p_x\langle p_x|\hat{x}|p'_x\rangle \tag{92-1}$$

$$=(p'_x-p_x)\langle p_x|\hat{x}|p'_x\rangle \tag{92-2}$$

が得られる。これが式(84)に等しいことより

$$(p'_x-p_x)\langle p_x|\hat{x}|p'_x\rangle=\mathrm{i}\hbar\delta(p_x-p'_x) \tag{93}$$

となるから，

$$\langle p_x|\hat{x}|p'_x\rangle=\mathrm{i}\hbar\frac{\delta(p_x-p'_x)}{p'_x-p_x}=-\mathrm{i}\hbar\frac{\delta(p_x-p'_x)}{p_x-p'_x} \tag{94}$$

を得る。ここで，δ関数の性質

$$z\frac{\mathrm{d}\delta(z)}{\mathrm{d}z}=-\delta(z) \tag{95}$$

を用いると($z\equiv p_x-p'_x$として)，

$$(p_x-p'_x)\frac{\partial}{\partial(p_x-p'_x)}\delta(p_x-p'_x)=-\delta(p_x-p'_x) \tag{96}$$

となり，これを変形した

$$\frac{\partial}{\partial(p_x-p'_x)}\delta(p_x-p'_x)=-\frac{\delta(p_x-p'_x)}{p_x-p'_x} \tag{97}$$

の右辺を式(94)の右辺に代入して

$$\langle p_x|\hat{x}|p'_x\rangle=\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial(p_x-p'_x)}\delta(p_x-p'_x) \tag{98}$$

を得る。固有値p'_xをもつ状態を特定の状態$|p'_x\rangle$に固定する(p'_xを定数扱いする)と，

$$\langle p_x|\hat{x}|p'_x\rangle=\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial p_x}\delta(p_x-p'_x) \tag{99}$$

という形になり，式(84)により，δ関数部分を運動量基底ベクトルで表示し直すと

$$\langle p_x|\hat{x}|p'_x\rangle=\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial p_x}\langle p_x|p'_x\rangle \tag{100}$$

が得られる。なお，式(99)は位置演算子$\hat{x}$の p-表示での演算子行列の成分(行列要素)を表している。式(100)から状態ベクトル$|p'_x\rangle$に作用している部分を抜き出して

$$\boxed{\langle p_x|\hat{x} = \mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial p_x}\langle p_x|} \tag{101}$$

を得る(x-表示の $\hat{p}_x$ の式(79)に似ているが，負号がないことに注意)。この式の左辺は，運動量基底ベクトルのブラ $\langle p_x|$ と位置演算子 $\hat{x}$ の積の形になっているから，位置演算子の p-表示を与えており，その具体的な形が右辺で表されている。言い換えると，

左辺：ある状態ベクトルに位置演算子 $\hat{x}$ を作用させた結果の p-表示を得る(ためには)
右辺：ある状態ベクトルに $\langle p_x|$ を作用させて状態ベクトルを p-表示(p の関数としての波動関数[1])にしてから $\mathrm{i}\hbar(\partial/\partial p_x)$ を作用(させればよい)

となる。多くのテキストが，p-表示での位置演算子を

$$\hat{x} = \mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial p_x} \quad \text{あるいは，} \quad \hat{x} \to \mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial p_x} \quad (p\text{-表示}) \tag{102}$$

と書いているが，厳密に表現するならば式(101)となる。なお，p-表示での運動量演算子 $\hat{p}_x$ は，式(91)からわかるように運動量自身であるから

$$\boxed{\langle p_x|\hat{p}_x = p_x\langle p_x|} \tag{103}$$

となる。なお，式(103)から得られる

$$\langle p_x\,|\,\hat{p}_x\,|\,p'_x\rangle = p_x\delta(p_x - p'_x) \tag{104}$$

は運動量演算子 $\hat{p}_x$ の p-表示での演算子行列の成分(行列要素)を表している。

4.3 単位演算子の適用例

単位演算子を利用すると，系の任意の状態を表す波動関数が系の基底関数によりどのように表されるかを容易に知ることができる(言い換えると，状態ベクトルから波動関数を作ることができる)。具体例を以下に記す[2]。

例1. 時間依存振動状態ベクトル $|\psi(t)\rangle$ に離散固有値をもつ振動基底ベクトル $|\phi_v\rangle$ からなる単位演算子(Hamiltonian $\hat{H}$ に対して $\hat{H}|\phi_v\rangle = E_v|\phi_v\rangle$ であり，規格直交性は $\langle\phi_v|\phi_{v'}\rangle = \delta_{vv'}$)

$$\sum_v |\phi_v\rangle\langle\phi_v| \tag{105}$$

を作用させると，

$$|\psi(t)\rangle = \sum_v |\phi_v\rangle\langle\phi_v\,|\,\psi(t)\rangle \tag{106}$$

[1] 状態ベクトル $|\psi_n\rangle$ の x-表示は $\psi_n(x) = \langle x\,|\,\psi_n\rangle$ であり，p-表示は $\psi_n(p_x) = \langle p_x\,|\,\psi_n\rangle$ である。
[2] ここに示す例は文献1に詳しく解説されている。

となり，

$$\langle \phi_v | \psi(t) \rangle = c_v \mathrm{e}^{-\mathrm{i}E_v t/\hbar} \tag{107}$$

であるから(c_v は $|\psi(t)\rangle$ を基底ベクトル $\{|\phi_v\rangle\}$ で展開する際の係数),

$$|\psi(t)\rangle = \sum_v c_v \mathrm{e}^{-\mathrm{i}E_v t/\hbar} |\phi_v\rangle \tag{108}$$

が得られる。$\boldsymbol{r}$ と t の関数としての振動波動関数 $\psi(\boldsymbol{r},t)$ を得るには，式(108)に左から $\langle \boldsymbol{r}|$ をかけて

$$\langle \boldsymbol{r} | \psi(t) \rangle = \sum_v c_v \mathrm{e}^{-\mathrm{i}E_v t/\hbar} \langle \boldsymbol{r} | \phi_v \rangle \tag{109}$$

とすると，

$$(\text{左辺}) = \langle \boldsymbol{r} | \psi(t) \rangle = \psi(\boldsymbol{r},t) \tag{110}$$

$$(\text{右辺}) = \sum_v c_v \mathrm{e}^{-\mathrm{i}E_v t/\hbar} \langle \boldsymbol{r} | \phi_v \rangle = \sum_v c_v \mathrm{e}^{-\mathrm{i}E_v t/\hbar} \phi_v(\boldsymbol{r}) \tag{111}$$

より，

$$\psi(\boldsymbol{r},t) = \sum_v c_v \mathrm{e}^{-\mathrm{i}E_v t/\hbar} \phi_v(\boldsymbol{r}) \tag{112}$$

が得られる。

例2. ある原子の時間依存電子状態ベクトル $|\psi(t)\rangle$ に対して，主量子数 n, 角運動量量子数 l, 磁気量子数 m をもち，エネルギーが E_{nlm} の基底ベクトル $|\phi_{nlm}\rangle$ による単位演算子を作用させると

$$|\psi(t)\rangle = \sum_n \sum_l \sum_m |\phi_{nlm}\rangle \langle \phi_{nlm} | \psi(t) \rangle \tag{113-1}$$

$$= \sum_n \sum_l \sum_m c_{nlm} \mathrm{e}^{-\mathrm{i}E_{nlm} t/\hbar} |\phi_{nlm}\rangle \tag{113-2}$$

が得られ，これに，左から $\langle \boldsymbol{r}|$ をかけると，

$$\langle \boldsymbol{r} | \psi(t) \rangle = \sum_n \sum_l \sum_m c_{nlm} \mathrm{e}^{-\mathrm{i}E_{nlm} t/\hbar} \langle \boldsymbol{r} | \phi_{nlm} \rangle \tag{114}$$

となるから，

$$\psi(\boldsymbol{r},t) = \sum_n \sum_l \sum_m c_{nlm} \mathrm{e}^{-\mathrm{i}E_{nlm} t/\hbar} \phi_{nlm}(\boldsymbol{r}) \tag{115}$$

が得られる。

例3. Hamiltonian $\hat{H}$ に関する時間依存 Schrödinger 方程式は状態ベクトル $|\psi(t)\rangle$ を用いて，

$$\hat{H}(t)|\psi(t)\rangle = \mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t}|\psi(t)\rangle \tag{116}$$

と表されるが，位置ベクトルによる単位演算子

$$\int \mathrm{d}\boldsymbol{r}'|\boldsymbol{r}'\rangle\langle\boldsymbol{r}'| \tag{117}$$

を式(116)の左辺に挿入すると，

$$(\text{左辺}) \to \int \mathrm{d}\boldsymbol{r}'\hat{H}(t)|\boldsymbol{r}'\rangle\langle\boldsymbol{r}'|\psi(t)\rangle \tag{118}$$

となる。さらに，左から $\langle\boldsymbol{r}|$ をかけると，

$$\int \mathrm{d}\boldsymbol{r}'\langle\boldsymbol{r}|\hat{H}(t)|\boldsymbol{r}'\rangle\langle\boldsymbol{r}'|\psi(t)\rangle \tag{119-1}$$

$$= \int \mathrm{d}\boldsymbol{r}'\langle\boldsymbol{r}|\hat{H}(t)|\boldsymbol{r}'\rangle\psi(\boldsymbol{r}',t) \tag{119-2}$$

が得られる。式(77), (82)と同様に，

$$\langle\boldsymbol{r}|\hat{H}(t)|\boldsymbol{r}'\rangle = \hat{H}(\boldsymbol{r},t)\delta(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}') \tag{120}$$

とおけるから，これを式(119)-2に代入して，

$$\int \mathrm{d}\boldsymbol{r}'\hat{H}(\boldsymbol{r},t)\psi(\boldsymbol{r}',t)\delta(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}') \tag{121-1}$$

$$= \hat{H}(\boldsymbol{r},t)\psi(\boldsymbol{r},t) \tag{121-2}$$

を得る。一方，式(116)の右辺に左から $\langle\boldsymbol{r}|$ をかけると，

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t}\langle\boldsymbol{r}|\psi(t)\rangle = \mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(\boldsymbol{r},t) \tag{122}$$

となるから，$\boldsymbol{r}$ と t の関数としての波動関数 $\psi(\boldsymbol{r},t)$ に関する Schrödinger 方程式

$$\hat{H}(\boldsymbol{r},t)\psi(\boldsymbol{r},t) = \mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(\boldsymbol{r},t) \tag{123}$$

に帰着する。

§5 演算子とブラ・ケット表記の関係

5.1 演算子行列と行列要素

ここまで，状態ベクトルのブラ・ケット表記について述べてきたが，次に演算子の行列表記について考えてみよう。正規直交関数群 $\{u_j\}$ の中の1つ u_j に演算子 $\hat{A}$ を作用させた結果 ψ_j が得られたとすると，

$$\psi_j = \hat{A}u_j \tag{124}$$

と表すことができる。ψ_jは固有関数群を基底関数として展開表記することができるので，

$$\psi_j = \sum_k A_{kj}u_k \tag{125}$$

と書ける。式(125)の両辺に左からu_i^*をかけて積分すると，

$$\int u_i^* \psi_j \mathrm{d}\tau = \sum_k A_{kj} \int u_i^* u_k \mathrm{d}\tau \tag{126-1}$$

$$= \sum_k A_{kj}\delta_{ik} \tag{126-2}$$

$$= A_{ij} \tag{126-3}$$

となるから，式(125)の展開係数は式(126)-1左辺の積分の形で表すことができる(式(126)は式(24)と同じ内容である)。また，式(126)-1の左辺に式(124)を代入すると，

$$\int u_i^* \psi_j \mathrm{d}\tau = \int u_i^* \hat{A} u_j \mathrm{d}\tau = A_{ij} \tag{127}$$

となるから，関数u_jに演算子$\hat{A}$を作用させて得られるψ_jを基底関数で展開する際の関数u_iの係数は演算子$\hat{A}$をu_i^*とu_jではさんだ積分によって与えられることがわかる。i と j の組み合わせに対するA_{ij}を成分にもつ行列を作ると，

$$\boldsymbol{A} = \begin{pmatrix} A_{11} & A_{12} & \cdots & A_{1j} & \cdots \\ A_{21} & A_{22} & \cdots & A_{2j} & \cdots \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ A_{i1} & A_{i2} & \cdots & A_{ij} & \cdots \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \end{pmatrix} \tag{128}$$

となる。この行列が「演算子行列」であり，各成分は「行列要素」と呼ばれる。演算子行列の第 j 列はu_jに演算子$\hat{A}$を作用させた結果得られるψ_jを固有関数群の線形結合で表すための展開係数で構成されている。式(27)について述べた注意と同様に，各行列要素は演算子に固有の値ではなく，式(127)のu_i^*とu_j，つまり，展開に用いる固有関数群(基底関数)に依存することに注意する必要がある。

(付記)

多くのテキストに，$\int u_i^* \hat{A} u_j \mathrm{d}\tau$をブラ・ケット表記して$\langle u_i | \hat{A} | u_j \rangle$と表すと書かれているが，すでに繰り返し指摘したように，

$$|u_j\rangle \equiv u_j \tag{129}$$

$$\langle u_i| \equiv u_i^* \tag{130}$$

という単純な対応で考えるべきではない。また，$\langle u_i|$および$|u_j\rangle$が

$$\langle u_i | = (0, 0, \cdots 0, \underset{\substack{\uparrow \\ \text{第}i\text{列}}}{1}, 0, \cdots) \tag{131}$$

$$|u_j\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \\ 1 \\ 0 \\ \vdots \end{pmatrix} \begin{array}{l} \\ \\ \\ \\ \leftarrow \text{第}j\text{行} \\ \\ \\ \end{array} \tag{132}$$

であることにもとづいて，

$$(0, 0, \cdots 0, \underset{\substack{\uparrow \\ \text{第}i\text{列}}}{1}, 0, \cdots)\,\hat{A} \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \\ 1 \\ 0 \\ \vdots \end{pmatrix} \begin{array}{l} \\ \\ \\ \\ \leftarrow \text{第}j\text{行} \\ \\ \\ \end{array} \tag{133}$$

を作っても，式(133)は行列要素を与えない。これは，演算子が波動関数に作用するものであり，直接，展開係数に作用しないからである。そこで思い出すべきは，式(12)型の行列表現である。式(32)および式(34)にもとづくと，

$$u_j = (u_1, u_2, \cdots, u_{j-1}, u_j, u_{j+1} \cdots) \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \\ 1 \\ 0 \\ \vdots \end{pmatrix} \begin{array}{l} \\ \\ \\ \\ \leftarrow \text{第}j\text{行} \\ \\ \\ \end{array} \tag{134-1}$$

$$= (u_1, u_2, \cdots, u_{j-1}, u_j, u_{j+1} \cdots) |u_j\rangle \tag{134-2}$$

および

$$u_i^* = (0, 0, \cdots 0, \underset{\substack{\uparrow \\ \text{第}i\text{列}}}{1}, 0, \cdots) \begin{pmatrix} u_1^* \\ u_2^* \\ \vdots \\ u_{i-1}^* \\ u_i^* \\ u_{i+1}^* \\ \vdots \end{pmatrix} \tag{135-1}$$

$$=\left\langle u_i \right| \begin{pmatrix} u_1^* \\ u_2^* \\ \vdots \\ u_{i-1}^* \\ u_i^* \\ u_{i+1}^* \\ \vdots \end{pmatrix} \tag{135)-2$$

と表記できるから，式(134)-2, (135)-2を$\int u_i^* \hat{A} u_j \mathrm{d}\tau$に代入すると，

$$\int u_i^* \hat{A} u_j \mathrm{d}\tau = \int \left\langle u_i \right| \begin{pmatrix} u_1^* \\ u_2^* \\ \vdots \\ u_{i-1}^* \\ u_i^* \\ u_{i+1}^* \\ \vdots \end{pmatrix} \hat{A}(u_1, u_2, \cdots, u_{j-1}, u_j, u_{j+1}, \cdots) \left| u_j \right\rangle \mathrm{d}\tau \tag{136)-1$$

$$= \left\langle u_i \right| \left[\int \begin{pmatrix} u_1^* \\ u_2^* \\ \vdots \\ u_{i-1}^* \\ u_i^* \\ u_{i+1}^* \\ \vdots \end{pmatrix} \hat{A}(u_1, u_2, \cdots, u_{j-1}, u_j, u_{j+1}, \cdots) \mathrm{d}\tau \right] \left| u_j \right\rangle \tag{136)-2$$

$$= \left\langle u_i \right| \begin{pmatrix} \int u_1^* \hat{A} u_1 \mathrm{d}\tau & \int u_1^* \hat{A} u_2 \mathrm{d}\tau & \cdots & \int u_1^* \hat{A} u_j \mathrm{d}\tau & \cdots \\ \int u_2^* \hat{A} u_1 \mathrm{d}\tau & \int u_2^* \hat{A} u_2 \mathrm{d}\tau & \cdots & \int u_2^* \hat{A} u_j \mathrm{d}\tau & \cdots \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ \int u_i^* \hat{A} u_1 \mathrm{d}\tau & \int u_i^* \hat{A} u_2 \mathrm{d}\tau & & \int u_i^* \hat{A} u_j \mathrm{d}\tau & \cdots \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \end{pmatrix} \left| u_j \right\rangle \tag{136)-3$$

$$= \left\langle u_i \right| \begin{pmatrix} A_{11} & A_{12} & \cdots & A_{1j} & \cdots \\ A_{21} & A_{22} & \cdots & A_{2j} & \cdots \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ A_{i1} & A_{i2} & \cdots & A_{ij} & \cdots \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \end{pmatrix} \left| u_j \right\rangle \tag{136)-4$$

$$= \langle u_i \,|\, \hat{\boldsymbol{A}} \,|\, u_j \rangle \tag{136)-5$$

$$= A_{ij} \tag{136)-6$$

が得られることより，式(136)-5の$\left\langle u_i \right|$と$\left| u_j \right\rangle$ではさまれた部分は演算子$\hat{A}$そのもの[1]ではなく，

[1] この「演算子そのもの」は「演算子を表す($-\mathrm{i}\hbar(\partial/\partial x)$ のような)数式自体」という意味である。

演算子行列 $\hat{\boldsymbol{A}}$ であることがわかる[1]。本書では，類似記号による混乱をできる限り防ぐために，演算子を $\hat{A}$，演算子行列を $\hat{\boldsymbol{A}}$，行列要素を A_{ij} または $(\hat{\boldsymbol{A}})_{ij}$ と表す[2]。式(18)について述べたことと同様に，式(136)-5は $\langle u_i \,|\, \hat{\boldsymbol{A}} \,|\, u_j \rangle$ の値が積分 $\int u_i^* \hat{A} u_j \mathrm{d}\tau$ の値と等しいということを表しているが，積分計算を行うことを意味しているわけではない(すでに積分計算を行った結果(数値)が行列 $\hat{\boldsymbol{A}}$ の成分となっている)。$\langle u_i \,|\, \hat{\boldsymbol{A}} \,|\, u_j \rangle$ は，行列要素を成分としてもつ演算子行列 $\hat{\boldsymbol{A}}$ に第 i 列目だけが1である行ベクトル $\langle u_i |$ と第 j 行目だけが1である列ベクトル $| u_j \rangle$ をそれぞれ左と右からかけることにより，行列 $\hat{\boldsymbol{A}}$ の i 行 j 列成分を抜き出す(＝指定する)という構造になっている。その様子(式(136)-4の計算)をあらわに示すと，

$$\langle u_i | \begin{pmatrix} A_{11} & A_{12} & \cdots & A_{1j} & \cdots \\ A_{21} & A_{22} & \cdots & A_{2j} & \cdots \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ A_{i1} & A_{i2} & \cdots & A_{ij} & \cdots \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \end{pmatrix} | u_j \rangle \tag{137-1}$$

$$= \langle u_i | \begin{pmatrix} A_{11} & A_{12} & \cdots & A_{1j} & \cdots \\ A_{21} & A_{22} & \cdots & A_{2j} & \cdots \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ A_{i1} & A_{i2} & \cdots & A_{ij} & \cdots \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ \vdots \\ 1 \\ \vdots \end{pmatrix} \begin{array}{l} \\ \\ \\ \leftarrow 第j行 \\ \\ \end{array} \tag{137-2}$$

$$= \langle u_i | \begin{pmatrix} A_{1j} \\ A_{2j} \\ \vdots \\ A_{ij} \\ \vdots \end{pmatrix} \tag{137-3}$$

$$= (0, 0, \cdots, 0, \underset{\substack{\uparrow \\ 第i列}}{1}, 0, \cdots) \begin{pmatrix} A_{1j} \\ A_{2j} \\ \vdots \\ A_{ij} \\ \vdots \end{pmatrix} = A_{ij} \tag{137-4}$$

あるいは

$$\langle u_i | \begin{pmatrix} A_{11} & A_{12} & \cdots & A_{1j} & \cdots \\ A_{21} & A_{22} & \cdots & A_{2j} & \cdots \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ A_{i1} & A_{i2} & \cdots & A_{ij} & \cdots \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \end{pmatrix} | u_j \rangle \tag{138-1}$$

[1] このことからも，ブラ・ケット表記が行列力学的取り扱いであることがわかるであろう。
[2] ブラ・ケット表記での演算子を演算子自身を表す文字と同じ文字で記している成書は多いが，ブラ・ケット表記での演算子は行列であるということを忘れてはならない。

$$= (0, 0, \cdots, 0, \underset{\substack{\uparrow \\ \text{第}i\text{列}}}{1}, 0, \cdots) \begin{pmatrix} A_{11} & A_{12} & \cdots & A_{1j} & \cdots \\ A_{21} & A_{22} & \cdots & A_{2j} & \cdots \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ A_{i1} & A_{i2} & \cdots & A_{ij} & \cdots \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \end{pmatrix} \left| u_j \right\rangle \tag{138-2}$$

$$= (A_{i1}, A_{i2}, \cdots, A_{ij}, \cdots) \left| u_j \right\rangle \tag{138-3}$$

$$= (A_{i1}, A_{i2}, \cdots, A_{ij}, \cdots) \begin{array}{l} \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \\ 1 \\ 0 \\ \vdots \end{pmatrix} \end{array} = A_{ij} \quad \begin{array}{l} \\ \\ \\ \\ \leftarrow \text{第}j\text{行} \\ \\ \\ \end{array} \tag{138-4}$$

となる(つまり，式(136)-4を素直に計算すれば式(136)-6が得られる)。

$\langle u_i | \hat{\boldsymbol{A}} | u_j \rangle$ の複素共役[1]は，

$$\boxed{\langle u_i | \hat{\boldsymbol{A}} | u_j \rangle^* = \langle u_j | \hat{\boldsymbol{A}}^\dagger | u_i \rangle} \tag{139}$$

であり，

$$\langle u_i | \hat{\boldsymbol{A}} | u_j \rangle^* = \langle u_j | \hat{\boldsymbol{A}}^* | u_i \rangle \tag{140}$$

<u>ではない</u>。演算子が Hermite 演算子であれば $\hat{\boldsymbol{A}}^\dagger = \hat{\boldsymbol{A}}$ が成立するから，式(139)より

$$\langle u_i | \hat{\boldsymbol{A}} | u_j \rangle^* = \langle u_j | \hat{\boldsymbol{A}} | u_i \rangle \quad \text{(Hermite 演算子)} \tag{141}$$

となるが，誤って，式(140)のように考えてしまうと，Hermite 演算子の定義が $\hat{\boldsymbol{A}}^* = \hat{\boldsymbol{A}}$ であるという誤解を招くことになる。また，$\hat{\boldsymbol{A}}$ を演算子自身 $\hat{A}$ と考えてしまうと，$\hat{A}^\dagger$ という操作の意味がわからなってしまう。たとえば，運動量演算子

$$\hat{p}_x = -\mathrm{i}\hbar \frac{\partial}{\partial x} \tag{142}$$

は Hermite 演算子であり，$\hat{p}_x$ の Hermite 共役 $\hat{p}_x^\dagger$ は $\hat{p}_x$ 自身であるから，

$$\hat{p}_x^\dagger = \hat{p}_x \tag{143}$$

が成り立つが，$\hat{p}_x$ の複素共役 $\hat{p}_x^* (= \mathrm{i}\hbar(\partial/\partial x))$ は作ることができても，“転置”することができないから[2]，$\hat{p}_x$ の式だけを見て[3] $\hat{p}_x$ が Hermite 演算子であるかどうかを判定することはできない。しかし，$\hat{p}_x$ の演算子行列 $\hat{\boldsymbol{p}}_x$ の i 行 j 列成分 $(\hat{\boldsymbol{p}}_x)_{ij}$ の複素共役 $(\hat{\boldsymbol{p}}_x)_{ij}^*$ の式を変形すると，

[1] より正確に表現すると「Hermite 共役」であるが，$\langle u_i | \hat{\boldsymbol{A}} | u_j \rangle$ は A_{ij} という数(= 1行1列の行列)であるから，Hermite 共役をとることと複素共役をとることは同じ意味になる。したがって，$\langle u_i | \hat{\boldsymbol{A}} | u_j \rangle^* = \langle u_i | \hat{\boldsymbol{A}} | u_j \rangle^\dagger$ である。

[2] 複素共役 $\hat{p}_x^*$ を文字通り転置して とするのは無茶(というより冗談)である。

[3] 「見るだけではなく，変形しても」である。

$$(\hat{\boldsymbol{p}}_x)_{ij}^* = \left(\int u_i^*(x)\left(-\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial x}\right)u_j(x)\mathrm{d}x\right)^* \tag{144-1}$$

$$= \int u_i(x)\left(\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial x}\right)u_j^*(x)\mathrm{d}x \tag{144-2}$$

$$= \Big[u_i(x)u_j^*(x)\Big]_{-\infty}^{+\infty} - \int u_j^*(x)\left(\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial x}\right)u_i(x)\mathrm{d}x \tag{144-3}$$

$$= 0 - \int u_j^*(x)\left(\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial x}\right)u_i(x)\mathrm{d}x \tag{144-4}$$

$$= \int u_j^*(x)\left(-\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial x}\right)u_i(x)\mathrm{d}x = (\hat{\boldsymbol{p}}_x)_{ji} \tag{144-5}$$

つまり，$(\hat{\boldsymbol{p}}_x)_{ij}^* = (\hat{\boldsymbol{p}}_x)_{ji}$ の関係が成り立ち，演算子 $\hat{p}_x$ が Hermite 演算子であり，演算子行列について

$$\hat{\boldsymbol{p}}_x^\dagger = \hat{\boldsymbol{p}}_x \tag{145}$$

となることがわかる。なお，式(144)-2から式(144)-3への変形では部分積分を行った。また，式(144)-3の第1項が0となるためには，波動関数が無限遠で0に収束する必要がある。言い換えると，演算子行列が Hermite 行列となるためには，波動関数が無限遠で0に収束することも条件に含まれている[1]。

上述の議論では，演算子 $\hat{A}$(つまり，$\hat{p}_x$)自身を変形するのではなく，行列要素 A_{ij} (つまり，$(\hat{\boldsymbol{p}}_x)_{ij}$)を変形して演算子が Hermite 演算子であるかどうかを判定した。しかし，この方法では，「$A_{ij}^* = A_{ji}$ ゆえに Hermite 演算子」あるいは「$A_{ij}^* \neq A_{ji}$ ゆえに Hermite 演算子ではない」というように，Hermite 演算子であるかどうかの“是非”の判断しかできない[2]。演算子の Hermite 性は，本来，演算子 $\hat{A}$ の Hermite 共役 $\hat{A}^\dagger$ が元の演算子 $\hat{A}$ と同じかどうかで判定すべきである。ならば，$\hat{A}$ から $\hat{A}^\dagger$ を知るにはどうすればよいであろうか。式(144)の変形で見たように，A_{ij}^* と A_{ji} の比較により演算子が Hermite 演算子であるかどうかを判定する際，

$$\left(\int u_i^*(x)\hat{A}u_j(x)\mathrm{d}x\right)^* = \int u_j^*(x)\,\square\,u_i(x)\mathrm{d}x \tag{146}$$

という変形を行った結果，$\square = \hat{A}$ であれば $\hat{A}$ が Hermite 演算子であると判断できるから，□部分が $\hat{A}$ の Hermite 共役 $\hat{A}^\dagger$ であることになる。したがって，

$$\boxed{\left(\int u_i^*(x)\hat{A}u_j(x)\mathrm{d}x\right)^* = \int u_j^*(x)\hat{A}^\dagger u_i(x)\mathrm{d}x} \tag{147}$$

が成り立ち，式(147)を利用すれば，演算子 $\hat{A}$ 自身の Hermite 共役 $\hat{A}^\dagger$ を得ることができる(式(147)は式(139)と同じものである)。式(147)と式(139)は，$u_i(x) \equiv \left|u_i\right\rangle$，$u_j(x) \equiv \left|u_j\right\rangle$，$\hat{A} \equiv \hat{\boldsymbol{A}}$ という定義

[1] より厳密に表現すると，「波動関数が定義されている領域の境界で0，または周期境界条件を満たしているという条件」が必要となる。なお，周期境界条件(周期 L)の場合は，積分領域は $x \sim x+L$ となる。

[2] 演算子 $\hat{A}$ が Hermite 演算子であることを「演算子 $\hat{A}$ は Hermite である」と表現することが多いが，「Hermite 共役であること」と「Hermite であること」は意味が異なることに注意する必要がある(前者は $\hat{A}$ と $\hat{A}^\dagger$ の関係を述べた表現であり，後者は $\hat{A}^\dagger = \hat{A}$ が成り立つことを意味している)。

により書き換えただけに見えるが，これまでにも繰り返し述べたように，$u_i(x)$，$u_j(x)$ は固有関数，$\hat{A}$ は演算子であるのに対して，$|u_i\rangle$，$|u_j\rangle$ は列ベクトル(状態ベクトル)，$\hat{\boldsymbol{A}}$ は演算子行列であるから，式(147)と式(139)の関係は単なる文字の書き換えではない。以下では式(147)を利用して，具体的に演算子の Hermite 共役を作る作業を行ってみよう。

$\hat{p}_x = -\mathrm{i}\hbar(\partial/\partial x)$ に形は似ているが，虚数ではなく実数の演算子

$$\hat{A} = -\hbar\frac{\partial}{\partial x} \tag{148}$$

の Hermite 共役を考えてみよう。式(147)の左辺に代入して，

$$(\hat{\boldsymbol{A}})_{ij}^* \equiv A_{ij}^* = \left(\int u_i^*(x)\left(-\hbar\frac{\partial}{\partial x}\right)u_j(x)\mathrm{d}x\right)^* \tag{149-1}$$

$$= \int u_i(x)\left(-\hbar\frac{\partial}{\partial x}\right)u_j^*(x)\mathrm{d}x \tag{149-2}$$

$$= \Big[u_i(x)u_j^*(x)\Big]_{-\infty}^{+\infty} - \int u_j^*(x)\left(-\hbar\frac{\partial}{\partial x}\right)u_i(x)\mathrm{d}x \tag{149-3}$$

$$= 0 + \int u_j^*(x)\left(\hbar\frac{\partial}{\partial x}\right)u_i(x)\mathrm{d}x \tag{149-4}$$

$$= \int u_j^*(x)\left(\hbar\frac{\partial}{\partial x}\right)u_i(x)\mathrm{d}x \tag{149-5}$$

が得られる。したがって，式(148)の演算子 $\hat{A}$ の Hermite 共役 $\hat{A}^\dagger$ は

$$\hat{A}^\dagger = \hbar\frac{\partial}{\partial x} \tag{150}$$

である。

$$\hat{A}^\dagger = \hbar\frac{\partial}{\partial x} \neq -\hbar\frac{\partial}{\partial x} = \hat{A} \tag{151}$$

であるから，演算子 $\hat{A} = -\hbar(\partial/\partial x)$ は Hermite 演算子ではないことがわかる(演算子 $\partial/\partial x$ の Hermite 共役は $-\partial/\partial x$ である)。

本付記の最後に，ブラ・ケット表記による演算子表記の性質をまとめておく。$\hat{\boldsymbol{A}}|\psi\rangle$ と $|\hat{\boldsymbol{A}}\psi\rangle$ は同じものであるから，次式が成り立つ。

$$\boxed{\hat{\boldsymbol{A}}|\psi\rangle = |\hat{\boldsymbol{A}}\psi\rangle} \tag{152}$$

しかし，$\langle\hat{\boldsymbol{A}}\psi| = \langle\hat{\boldsymbol{A}}|\psi|$ ではない。

$$\langle\hat{\boldsymbol{A}}\psi| = (\hat{\boldsymbol{A}}\psi\rangle)^\dagger = (\hat{\boldsymbol{A}}|\psi\rangle)^\dagger = \langle\psi|\hat{\boldsymbol{A}}^\dagger \tag{153}$$

であるから，

$$\boxed{\langle \hat{A}\psi | = \langle \psi | \hat{A}^\dagger} \tag{154}$$

であり，式(154)は turnover rule と呼ばれる。式(152)と式(154)を用いると

$$\langle \phi | \hat{A} | \psi \rangle^* \equiv \langle \phi | \hat{A} | \psi \rangle^\dagger = \langle \phi | \hat{A}\psi \rangle^\dagger = \langle \hat{A}\psi | \phi \rangle \tag{155-1}$$

$$= \langle \psi | \hat{A}^\dagger | \phi \rangle = \langle \psi | \hat{A}^\dagger \phi \rangle \tag{155-2}$$

などが成り立つ。

系の任意の波動関数を ψ_m として，これに演算子 $\hat{A}$ を作用させた結果が φ_m であるとき，

$$\varphi_m = \hat{A}\psi_m \tag{156}$$

となるが，φ_m は基底関数によりどのように表されるであろうか。まず，ψ_m が基底関数の線形結合

$$\psi_m = \sum_j c_{jm} u_j \tag{157}$$

により表されるから，これを式(156)に代入すると，

$$\varphi_m = \hat{A} \sum_j c_{jm} u_j \tag{158-1}$$

$$= \sum_j c_{jm} \hat{A} u_j \tag{158-2}$$

となる。式(124)と式(125)でやったように，$\hat{A}u_j$ は基底関数を使って

$$\hat{A}u_j = \sum_i A_{ij} u_i \tag{159}$$

と表すことができるので，式(159)を式(158)-2に代入すると，

$$\varphi_m = \sum_i \sum_j A_{ij} c_{jm} u_i \tag{160}$$

が得られる。したがって，波動関数 ψ_m の基底関数による展開係数 c_{jm} と行列要素 A_{ij} を用いて，ψ_m に演算子を作用させた結果である φ_m を表すことができる。φ_m を固有関数(基底関数)で展開した形が

$$\varphi_m = \sum_i d_{im} u_i \tag{161}$$

であるとすると，展開係数 d_{im} は(式(161)と式(160)の比較から)

$$d_{im} = \sum_j A_{ij} c_{jm} \tag{162}$$

で与えられ，これを行列表記すると，

$$\begin{pmatrix} d_{1m} \\ d_{2m} \\ \vdots \\ d_{im} \\ \vdots \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} A_{11} & A_{12} & \cdots & A_{1i} & \cdots \\ A_{21} & A_{22} & \cdots & A_{2i} & \cdots \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ A_{i1} & A_{i2} & \cdots & A_{ii} & \cdots \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_{1m} \\ c_{2m} \\ \vdots \\ c_{im} \\ \vdots \end{pmatrix} \tag{163}$$

となる。状態ベクトルの基底関数による展開係数の列ベクトル表記は状態ベクトルのケットに対応するから(式(15))，演算子行列を $\hat{\boldsymbol{A}}$ と書くと，式(163)は

$$|\varphi_m\rangle = \hat{\boldsymbol{A}}|\psi_m\rangle \tag{164}$$

と表すことができる。式(164)を式(156)と比較すると，$\varphi_m = |\varphi_m\rangle$，$\psi_m = |\psi_m\rangle$ と考えたくなるが，$\hat{A}$ が演算子であるのに対して $\hat{\boldsymbol{A}}$ は演算子行列であるから，(これまでも繰り返し述べてきたように) $\varphi_m = |\varphi_m\rangle$，$\psi_m = |\psi_m\rangle$ と考えるのは不適切である。

波動関数 ψ_m の演算子 $\hat{A}$ に関する期待値は

$$\int \psi_m^* \hat{A} \psi_m \mathrm{d}\tau \tag{165}$$

であるが，この積分の値は

$$\langle \psi_m | \hat{\boldsymbol{A}} | \psi_m \rangle \tag{166}$$

に等しいから，展開係数および演算子行列を用いると(式(16)参照)，

$$\langle \psi_m | \hat{\boldsymbol{A}} | \psi_m \rangle = (c_{1m}^*, c_{2m}^*, \cdots, c_{im}^*, \cdots) \begin{pmatrix} A_{11} & A_{12} & \cdots & A_{1i} & \cdots \\ A_{21} & A_{22} & \cdots & A_{2i} & \cdots \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ A_{i1} & A_{i2} & \cdots & A_{ii} & \cdots \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_{1m} \\ c_{2m} \\ \vdots \\ c_{im} \\ \vdots \end{pmatrix} \tag{167}$$

と表すことができる。ここで，別の状態の波動関数 ψ_n についても併記すると

$$\begin{pmatrix} c_{1m}^*, c_{2m}^*, \cdots, c_{im}^*, \cdots \\ c_{1n}^*, c_{2n}^*, \cdots, c_{in}^*, \cdots \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A_{11} & A_{12} & \cdots & A_{1i} & \cdots \\ A_{21} & A_{22} & \cdots & A_{2i} & \cdots \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ A_{i1} & A_{i2} & \cdots & A_{ii} & \cdots \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_{1m} & c_{1n} \\ c_{2m} & c_{1n} \\ \vdots & \vdots \\ c_{im} & c_{1n} \\ \vdots & \vdots \end{pmatrix} \tag{168}$$

となり，計算の結果得られる 2×2 行列[1]の対角成分に状態ごとの期待値(固有値)が並ぶ。

[1] (行数×列数)と表記すると，3つの行列の積は $(2 \times k) \otimes (k \times k) \otimes (k \times 2) = (2 \times 2)$ であるから，結果は2行2列になる。

$$\begin{pmatrix} \langle \psi_m | \hat{\boldsymbol{A}} | \psi_m \rangle & 0 \\ 0 & \langle \psi_n | \hat{\boldsymbol{A}} | \psi_n \rangle \end{pmatrix} \tag{169}$$

波動関数をさらに増やして，式(167)で $m = 1, 2, 3, \cdots$ とすると，

$$\begin{pmatrix} c_{11}^* & c_{21}^* & \cdots & c_{i1}^* & \cdots \\ c_{12}^* & c_{22}^* & \cdots & c_{i2}^* & \cdots \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ c_{1i}^* & c_{2i}^* & \cdots & c_{ii}^* & \cdots \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A_{11} & A_{12} & \cdots & A_{1i} & \cdots \\ A_{21} & A_{22} & \cdots & A_{2i} & \cdots \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ A_{i1} & A_{i2} & \cdots & A_{ii} & \cdots \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_{11} & c_{12} & \cdots & c_{1i} & \cdots \\ c_{21} & c_{22} & \cdots & c_{2i} & \cdots \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ c_{i1} & c_{i2} & \cdots & c_{ii} & \cdots \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \end{pmatrix} \tag{170}$$

となる。式(170)は

$$\boldsymbol{c}^{\dagger} \hat{\boldsymbol{A}} \boldsymbol{c} \tag{171}$$

という形をしているが，この3つの行列の積の結果が

$$\begin{pmatrix} \langle \psi_1 | \hat{\boldsymbol{A}} | \psi_1 \rangle & 0 & 0 & 0 & \cdots \\ 0 & \langle \psi_2 | \hat{\boldsymbol{A}} | \psi_2 \rangle & 0 & 0 & \cdots \\ 0 & 0 & \ddots & 0 & \cdots \\ 0 & 0 & 0 & \langle \psi_i | \hat{\boldsymbol{A}} | \psi_i \rangle & \cdots \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \ddots \end{pmatrix} \tag{172}$$

のように対角行列となるとき，式(172)の各対角要素が演算子 $\hat{A}$ の固有値を与え，各固有値に対応する固有ベクトル $|\psi_m\rangle$ の基底ベクトル $\{|u_i\rangle\}$ による展開係数が行列 $\boldsymbol{c}$ の第 m 列によって与えられる($|\psi_m\rangle$； $m = 1, 2, 3, \cdots$ が行列 $\boldsymbol{c}$ の第1列，第2列，第3列，…に対応)。行列 $\boldsymbol{c}$ は unitary 行列(ユニタリー行列)であり[1]，

$$\boldsymbol{c}^{\dagger} \boldsymbol{c} = \boldsymbol{E} \tag{173}$$

つまり，

$$\boldsymbol{c}^{\dagger} = \boldsymbol{c}^{-1} \tag{174}$$

という性質をもっている。なお，$\boldsymbol{E}$ は単位行列，$\boldsymbol{c}^{-1}$ は行列 $\boldsymbol{c}$ の逆行列を表している。

5.2 演算子の本質

前節で，式(156)の波動関数 φ_m と ψ_m の基底関数による展開係数間の関係が式(163)の行列で表されることを示した。本節では，式(156)から式(163)までの展開をすべてブラ・ケット表記で表し，演算子の本質を探ることにする。まず，式(164)型の記述

$$|\varphi_m\rangle = \hat{\boldsymbol{A}} |\psi_m\rangle \tag{175}$$

[1] 行列 $\hat{\boldsymbol{A}}$ が Hemite 行列($A_{ij}^* = A_{ji}$)である場合， $\hat{\boldsymbol{A}}$ を対角化する unitary 行列 $\boldsymbol{c}$ が必ず存在する。また，Hermite 行列の固有値はすべて実数であるから，観測しうる物理量に対応する(演算子の)演算子行列は必ず Hermite 行列である。

から議論を始める。式(175)の両辺に基底ベクトルの1つのブラ$\langle u_i|$を左からかけると，

$$\langle u_i|\varphi_m\rangle = \langle u_i|\hat{\boldsymbol{A}}|\psi_m\rangle \tag{176}$$

となり，左辺は式(161)より，

$$\text{左辺：}\langle u_i|\varphi_m\rangle = d_{im} \tag{177}$$

となる。式(176)の右辺については，$\hat{\boldsymbol{A}}$と$|\psi_m\rangle$の間に単位演算子

$$\sum_j |u_j\rangle\langle u_j| \tag{178}$$

を挿入すると，

$$\text{右辺：}\sum_j \langle u_i|\hat{\boldsymbol{A}}|u_j\rangle\langle u_j|\psi_m\rangle \tag{179-1}$$

$$= \sum_j \langle u_i|\hat{\boldsymbol{A}}|u_j\rangle c_{jm} \tag{179-2}$$

$$= \sum_j A_{ij} c_{jm} \tag{179-3}$$

と変形することができる。したがって，(当然ながら)式(162)と同じ

$$d_{im} = \sum_j A_{ij} c_{jm} \tag{180}$$

が得られる。式(180)は離散固有値をもつ基底ベクトルの場合の表現であるが，次に，連続固有値をもつ基底ベクトルの場合について考える。

連続量の基底ベクトルとして位置固有ベクトル$|\boldsymbol{r}\rangle$を用いることとし，式(175)の両辺に基底ベクトルのブラ$\langle \boldsymbol{r}|$を左からかけると，

$$\langle \boldsymbol{r}|\varphi_m\rangle = \langle \boldsymbol{r}|\hat{\boldsymbol{A}}|\psi_m\rangle \tag{181}$$

となる。左辺は式(54)より，

$$\text{左辺：}\langle \boldsymbol{r}|\varphi_m\rangle = \varphi_m(\boldsymbol{r}) \tag{182}$$

となる。式(181)の$\hat{\boldsymbol{A}}$と$|\psi_m\rangle$の間に連続的基底ベクトルの単位演算子(式(52))

$$\int \mathrm{d}\boldsymbol{r}' |\boldsymbol{r}'\rangle\langle \boldsymbol{r}'| \tag{183}$$

を挿入して変形すると，

$$\text{右辺：}\int \mathrm{d}\boldsymbol{r}' \langle \boldsymbol{r}|\hat{\boldsymbol{A}}|\boldsymbol{r}'\rangle\langle \boldsymbol{r}'|\psi_m\rangle \tag{184-1}$$

$$= \int \mathrm{d}\boldsymbol{r}' \langle \boldsymbol{r}|\hat{\boldsymbol{A}}|\boldsymbol{r}'\rangle \psi_m(\boldsymbol{r}') \tag{184-2}$$

$$= \int \mathrm{d}\boldsymbol{r}' \hat{A}(\boldsymbol{r}) \psi_m(\boldsymbol{r}') \delta(\boldsymbol{r} - \boldsymbol{r}') \tag{184-3}$$

$$= \hat{A}(\boldsymbol{r}) \psi_m(\boldsymbol{r}) \tag{184-4}$$

となるから，

$$\varphi_m(\boldsymbol{r}) = \hat{A}(\boldsymbol{r}) \psi_m(\boldsymbol{r}) \tag{185}$$

が得られる。離散的基底ベクトルの場合に得られた式(180)は状態ベクトルの展開係数と演算子行列の成分間の関係を表しており，演算子を作用させることは行列の積をとるという意味であることが明白である。一方，連続的基底ベクトルの場合には(式(185))，$\boldsymbol{r}$ の関数(数式)である状態関数 $\psi_m(\boldsymbol{r})$ に数学的(解析学的)な操作 $\hat{A}(\boldsymbol{r})$ を施すことが演算子の役割のように見えて，行列計算とは認識しがたい。しかし，離散的基底ベクトルの場合の式(176) ~ (179)-3と連続的基底ベクトルの場合の式(181) ~ (184)-3を比較すると以下のような関係があることがわかる。

離散的基底ベクトル $\longleftrightarrow$ 連続的基底ベクトル

$$u_i \longleftrightarrow \boldsymbol{r} \tag{186}$$

$$u_j \longleftrightarrow \boldsymbol{r}' \tag{187}$$

$$d_{im} \longleftrightarrow \varphi_m(\boldsymbol{r}) \tag{188}$$

$$c_{jm} \longleftrightarrow \psi_m(\boldsymbol{r}') \tag{189}$$

$$A_{ij} \longleftrightarrow \hat{A}(\boldsymbol{r}) \delta(\boldsymbol{r} - \boldsymbol{r}') \tag{190}$$

したがって，最終的な形(式(180)と式(185))の見かけはかなり異なるが，本質的には同じことを行っており，特に，重要な共通点は式(179)-1と式(184)-1である。いずれの場合も

1. $\langle u_j | \psi_m \rangle$ あるいは $\langle \boldsymbol{r}' | \psi_m \rangle$ により，状態ベクトル $|\psi_m\rangle$ の基底ベクトル $|u_j\rangle$ あるいは $|\boldsymbol{r}'\rangle$ 方向の成分値(展開係数)を抜き出し，
2. 演算子行列の成分(行列要素)である $\langle u_i | \hat{\boldsymbol{A}} | u_j \rangle$ あるいは $\langle \boldsymbol{r} | \hat{\boldsymbol{A}} | \boldsymbol{r}' \rangle$ を上記1.で引き出した値にかけ算し，
3. あらゆる j に関する和あるいは $\boldsymbol{r}'$ の全域に関する積分により集積した結果が，演算子 $\hat{A}$ を状態 ψ_m に作用させた結果得られる状態 φ_m の基底ベクトル $|u_i\rangle$ 方向の成分値 d_{im} あるいは $|\boldsymbol{r}\rangle$ 方向の成分値 $\varphi_m(\boldsymbol{r})$ を与える。

という構造(手順)となっている。最終結果に大きな見かけ上の相違を生じさせているのは，式(190)の対応，つまり，連続的基底ベクトルの場合，積分中に Dirac のデルタ関数が現れることにより(式(184)-3)，被積分関数がそのままの形で出てしまうため(式(184)-4)，

$\langle \boldsymbol{r}|\hat{\boldsymbol{A}}|\boldsymbol{r}'\rangle\langle \boldsymbol{r}'|\psi_m\rangle$ を $\boldsymbol{r}'$ で積分していることに気付かないままになりがちであるが，計算の中身は(連続無限次元の)行列の積なのである。したがって，端的には，離散的基底ベクトルおよび連続的基底ベクトルいずれの場合でも「演算子は行列だ！[1]」と結論することができる。

最後に，演算子行列自身のブラ・ケット表記について考えよう。式(164)

$$|\varphi_m\rangle = \hat{\boldsymbol{A}}|\psi_m\rangle \tag{191}$$

の右辺に2つの単位演算子

$$\boldsymbol{E} = \sum_i |u_i\rangle\langle u_i| = \sum_j |u_j\rangle\langle u_j| \tag{192}$$

を挿入すると，

$$\hat{\boldsymbol{A}}|\psi_m\rangle = \boldsymbol{E}\hat{\boldsymbol{A}}\boldsymbol{E}|\psi_m\rangle = \sum_i |u_i\rangle\langle u_i|\hat{\boldsymbol{A}}|\sum_j |u_j\rangle\langle u_j|\psi_m\rangle \tag{193-1}$$

$$= \sum_i\sum_j |u_i\rangle\langle u_i|\hat{\boldsymbol{A}}|u_j\rangle\langle u_j|\psi_m\rangle \tag{193-2}$$

となるが，式(193)-2は式(191)に等しいから，両式の比較から演算子行列が次式

$$\boxed{\hat{\boldsymbol{A}} = \sum_i\sum_j |u_i\rangle\langle u_i|\hat{\boldsymbol{A}}|u_j\rangle\langle u_j|} \tag{194}$$

で表されることがわかる。実は，状態 ψ_m の演算子 $\hat{A}$ に関する期待値を与える式(167)は，式(194)の演算子行列の表記を使うと容易に得ることができる。式(194)の左からは $\langle\psi_m|$ を，右からは $|\psi_m\rangle$ をかけると，

$$\langle\psi_m|\hat{\boldsymbol{A}}|\psi_m\rangle = \sum_i\sum_j \langle\psi_m|u_i\rangle\langle u_i|\hat{\boldsymbol{A}}|u_j\rangle\langle u_j|\psi_m\rangle \tag{195-1}$$

$$= \sum_i\sum_j c_{im}^* A_{ij} c_{jm} \tag{195-2}$$

となり，式(167)が(一瞬で)得られる。

[1] 芸術家 岡本太郎 氏の「芸術は爆発だ！」はあまりにも有名である。

文献

1. 霜田光一，岩澤 宏，神谷武志 訳「レーザ物理」丸善 (1978年), 第6章 (原著：M. Sargent III, M. O. Scully, W. E. Lamb, Jr., *Laser Physics*, Addison Wesley, Reading (MA), 1974)
2. 小出昭一郎，田村二郎 訳「メシア 量子力学」東京図書 (1971年), 第7章 (原著：A. Messiah, *Mécanique Quantique*, Dunod, Paris, 1959)
3. 菅野卓雄，多田邦雄，神谷武志 訳「基礎量子力学」丸善 (1973年)，第6，7章 (原著：R. L. White, *Basic Quantum Mechanics*, McGraw-Hill, New York, 1966)
4. 小出昭一郎「量子力学(I)」裳華房 (1969年)，第6章
5. (a) 伊藤伸泰，早野龍五 監訳「グライナー 量子力学」シュプリンガー・フェアラーク東京，1991年(初版) (英語版原著：W. Greiner, *Quantum Mechanics*, Springer-Verlag, Berlin, 1989.)

   (b) 伊藤伸泰，早野龍五 監訳「量子力学 概論」シュプリンガー・ジャパン，2011年(新装版) および 伊藤伸泰，早野龍五 監訳「量子力学 概論」 丸善出版，2012年(新装版) (英語版原著：W. Greiner, *Quantum Mechanics: An Introduction*, 3rd ed., Springer-Verlag, Berlin Heidelberg, 1994.)

   (c) 英語版：W. Greiner, *Quantum Mechanics: An Introduction*, 4th ed., Springer-Verlag, Berlin Heidelberg, 2000.
6. 桜井捷海「コンピュータで学ぶ 量子力学[基礎編]」裳華房 (1992年), 第1章第7節
7. R. Shankar, *Principles of Quantum Mechanics*, 2nd ed., Springer Science+Business Media, New York, 1994, Chap. 1
8. 佐藤正次，永井 治「基礎課程 線形代数学」学術図書出版 (1976年)，第3章
9. 「「成分」と「基底」の変換の相違点」漁火書店 (URL は下記)
   http://home.hiroshima-u.ac.jp/kyam/pages/results/monograph/Ref02_matrix43W.pdf

量子論におけるブラ・ケット表記

2013年 1月22日 初版第1刷
2013年 6月23日 第2版第7刷
2020年 5月24日 第3版第5刷

著者 山﨑 勝義
発行 漁火書店

検印 山﨑

印刷 ブルーコピー
製本 ホッチキス