量子力学の基礎づけ

▷ 行列についての復習

エルミート行列

$$\hat{A} = (a_{ij}) = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} & \cdots \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} & \cdots \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} & \\ \vdots & & & \ddots \end{pmatrix}$$

転置＋複素共役

$$\hat{A}^{\dagger} = (a_{ji}^{*}) = \begin{pmatrix} a_{11}^{*} & a_{21}^{*} & a_{31}^{*} & \cdots \\ a_{12}^{*} & a_{22}^{*} & a_{32}^{*} & \cdots \\ a_{13}^{*} & a_{23}^{*} & a_{33}^{*} & \cdots \\ \vdots & \vdots & & \ddots \end{pmatrix}$$

$\hat{A}^{\dagger}$ を $\hat{A}$ のエルミート共役（Hermite Conjugate）という.

特に、$\hat{A}^{\dagger} = \hat{A}$ を満たす行列をエルミート行列という.

ユニタリ行列

$$\hat{U} \cdot \hat{U}^{\dagger} = \hat{U}^{\dagger}\hat{U} = \hat{1}$$

の関係を満たす行列を

ユニタリー行列という

$$\hat{U}^{-1} = \hat{U}^{\dagger}$$

となっている.

逆行列

（ここで $\hat{1} = \begin{pmatrix} 1 & & & 0 \\ & 1 & & \\ & & 1 & \\ 0 & & & \ddots \end{pmatrix}$ であり

単位行列である）

▷ ブラとケット (Bracket)
(Bra) (ket)

以下、調和振動子を例に、量子力学の一般的構造を考える。

(復習)

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2 u_n(x)}{dx^2} + \frac{1}{2}kx^2 u_n(x) = E_n u_n(x)$$

$$u_n(x) = N_n H_n(\xi) e^{-\frac{\xi^2}{2}}$$

$$(\xi = \alpha x)$$

この $\{u_n(x)\} = \{u_1, u_2, u_3, \cdots\}$ は 規格直交系

$$\int u_m^*(x) u_n(x) dx = \delta_{mn}$$

であり 完全系 をなしている。

"任意の"（かってな） 波動関数 $\varphi(x)$ は、$u_n(x)$ で展開できる
(線形結合でかける)

$$\varphi(x) = \sum_n a_n u_n(x)$$

$$= a_1 u_1 + a_2 u_2 + a_3 u_3 + \cdots\cdots$$

また、 $a_m = \int dx' u_m^*(x')\varphi(x')$ である。

よって、

$$\varphi(x) = \sum_n a_n u_n = \sum_n \int dx' u_m^*(x')\varphi(x') u_n(x)$$

$$= \int dx \boxed{\sum_n u_m^*(x') u_n(x)} \cdot \varphi(x')$$

$\|$

$\delta(x-x')$ とすれば $\varphi(x)$ にもどり、左辺に一致。

$$\delta(x-x') = \sum_n u_m^*(x') u_n(x)$$

以下のことを、次のように記述しよう。

(4) $\{|n\rangle\}$ が完全系をなすことは、"任意の"状態が $|n\rangle$ の線形結合で書けることを意味する.

$$|\varphi\rangle = \sum_n a_n |n\rangle \qquad a_m = \langle m|\varphi\rangle$$

移動

$$= \sum_n \langle n|\varphi\rangle |n\rangle$$

ただの数

$$= \boxed{\sum_n |n\rangle\langle n|}\,|\varphi\rangle$$

$\hat{\mathbb{1}}$

$$\therefore \quad \underline{\sum_n |n\rangle\langle n| = \hat{\mathbb{1}}}$$

(5) 演算子の表現

$$\hat{A} : |\varphi\rangle \longmapsto \hat{A}|\varphi\rangle$$

完全系 $\{|n\rangle\}$ を用いた表現

$$|\varphi\rangle = \sum_n a_n |n\rangle$$

$$\hat{A}|\varphi\rangle = \sum_n b_n |n\rangle$$

$\{a_n\} \longrightarrow \{b_n\}$ を与える規則がわかれば、$\hat{A}$ の表現を与えたことになる。

$$\begin{aligned}
b_n &= \langle n|\hat{A}|\varphi\rangle \\
&= \langle n|\hat{A}\cdot\hat{\mathbb{1}}|\varphi\rangle \\
&= \sum_m \langle n|\hat{A}|m\rangle\langle m|\varphi\rangle \\
&= \sum_m \langle n|\hat{A}|m\rangle a_m
\end{aligned}$$

従って、

$$\begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \\ \vdots \\ \vdots \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \langle 1|A|1\rangle & \langle 1|A|2\rangle & \langle 1|A|3\rangle & \cdots \\ \langle 2|A|1\rangle & \langle 2|A|2\rangle & & \\ \vdots & & \ddots & \\ \vdots & & & \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ \vdots \\ \vdots \end{pmatrix}$$

$$= \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots \\ a_{21} & a_{22} & \\ a_{31} & & \ddots \\ \vdots & & \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ a_3 \\ \vdots \end{pmatrix}$$

$\hat{A}$ は、$a_{mn} = \langle m|\hat{A}|n\rangle$ を行列要素とする行列で表わされる。

特に、物理量は、エルミート行列で表わされる、エルミート演算子である。
今、$\boxed{\hat{A}|\varphi\rangle}$ は、1つの状態ケットであるが、それに対応した
状態ブラを $\boxed{\langle\varphi|\hat{A}^\dagger}$ で定義する。

$\hat{A}$ がエルミート演算子であると、

$$\left(\langle n|\hat{A}|m\rangle\right)^* = \langle m|A^\dagger|n\rangle$$

$$\| $$

$$\langle m|\hat{A}|n\rangle$$

m, n は、任意であるから、

$$\therefore\ \hat{A} = \hat{A}^\dagger$$

▷ 座標表示と運動量表示

座標表示

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

規格直交性

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

完全性

$$\int |x\rangle\langle x|\,dx = \hat{1}$$

座標表示の波動関数

$$|\varphi\rangle = \int dx\,|x\rangle\underbrace{\langle x|\varphi\rangle}_{\text{"通常の" 波動関数}}$$

座標の演算子の座標表示

$$\langle x'|\hat{x}|x\rangle = \langle x'|x|x\rangle$$

固有値（ただの数）

$$= x\langle x'|x\rangle$$

$$= x\,\delta(x-x')$$

運動量表示

$$\hat{p}\,|k\rangle = \hbar k\,|k\rangle$$

規格直交関係　　$\langle k'|k\rangle = \delta(k-k')$

完全性　　$\displaystyle\int |k\rangle\langle k|\,dk = \hat{1}$

運動量表示での波動関数

$$|\varphi\rangle = \int dk\,|k\rangle\langle k|\varphi\rangle$$

$$= \int dk\,\langle k|\varphi\rangle\,|k\rangle$$

運動量表示での波動関数

運動量演算子の座標表示

$$\langle x|\hat{p}|\varphi\rangle = \int dk\,\langle x|\hat{p}|k\rangle\langle k|\varphi\rangle$$

$$= \int dk\,\hbar k\,\langle x|k\rangle\langle k|\varphi\rangle$$

$$\langle x|k\rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}e^{ikx}$$

$$= \int dk\,(-i\hbar)\frac{d}{dx}\langle x|k\rangle\langle k|\varphi\rangle$$

$$= -i\hbar\frac{d}{dx}\langle x|\varphi\rangle.$$

一方、これは、

$$\langle x|\hat{p}|\varphi\rangle = \int dx'\,\langle x|\hat{p}|x'\rangle\langle x'|\varphi\rangle$$ なので

$$\langle x|\hat{p}|x'\rangle = -i\hbar\frac{d}{dx}\,\delta(x-x')$$