ブラ・ケット・ベクトルと線形代数

固有状態：ブラ・ケット・ベクトル

$$\text{時間に依存しない量子力学的状態：} \quad |\psi\rangle, \quad \langle\psi| \tag{1}$$

は波動関数$\psi(\boldsymbol{r})$とその複素共役$\psi^*(\boldsymbol{r})$に対応する． 波動関数$\psi(\boldsymbol{r})$は座標空間における状態$|\psi\rangle$の「表現」ということもできる．また状態$\langle\psi|$は$|\psi\rangle$と対で現れる双対空間の状態であるといってもよい．ここで$|\psi\rangle$をケット・ベクトル，$\langle\psi|$をブラ・ベクトルと呼ぶ． それらの状態に対する時間に依存しないシュレディンガー方程式は

$$H|\psi\rangle = E|\psi\rangle \tag{2}$$

と書かれる．一般の状態$|\psi\rangle$を固有状態$|\phi_n\rangle$の線形結合で展開しよう．

$$|\psi\rangle = \sum_n |\phi_n\rangle c_n, \quad \langle\psi| = \sum_n c_n^* \langle\phi_n| \tag{3}$$

このとき波動関数あるいはブラ・ケット間の規格直交関係

$$\begin{cases} \displaystyle\int \mathrm{d}^3\boldsymbol{r}\phi_n^*(\boldsymbol{r})\phi_m(\boldsymbol{r}) = \delta_{n,m} \\ \langle\phi_n|\phi_m\rangle = \delta_{n,m} \end{cases} \tag{4}$$

が要求される．したがって$|\psi\rangle$が規格化されていて$\langle\psi|\psi\rangle = 1$であれば

$$\sum_n |c_n|^2 = 1 \tag{5}$$

でなくてはならない． またこれらを用いればc_nは

$$c_n = \int \mathrm{d}^3\boldsymbol{r}\phi_n^*(\boldsymbol{r})\psi(\boldsymbol{r}) = \langle\phi_n|\psi\rangle \tag{6}$$

である．線形演算子$\hat{A}$の状態ψについての期待値

$$\bar{A} = \int \mathrm{d}^3\boldsymbol{r}\psi^*(\boldsymbol{r})\hat{A}\psi(\boldsymbol{r})$$

は展開(3)を用いれば

$$\begin{aligned} \bar{A} &= \sum_{nm} c_n^* c_m A_{nm}, \\ A_{nm} &= \int \mathrm{d}^3\boldsymbol{r}\phi_n^*(\boldsymbol{r})\hat{A}\phi_m(\boldsymbol{r}) \end{aligned} \tag{7}$$

と書かれる. また ブラ・ケットを用いて表わせば

$$A_{nm} = \langle \phi_n | \hat{A} | \phi_m \rangle \tag{7'}$$

である. 線形演算子$\hat{A}$はブラ・ケットを用いて

$$\hat{A} = \sum_{n,m} |\phi_n\rangle A_{nm} \langle \phi_m | \tag{8}$$

と書くこともできる. $|\psi\rangle$, $\langle\psi|$, あるいは線形演算子$\hat{A}$ をそれぞれベクトルおよび行列として

$$|\psi\rangle = \begin{pmatrix} c_0 \\ c_1 \\ c_2 \\ \vdots \end{pmatrix} \tag{9a}$$

$$\langle\psi| = (c_0^* c_1^* c_2^* \cdots) \tag{9b}$$

および

$$\hat{A} = \begin{pmatrix} A_{00} A_{01} A_{02} \cdots \\ A_{10} A_{11} A_{12} \cdots \\ \cdots\cdots \end{pmatrix} \tag{9c}$$

と表わすこともできる. 演算子ブラ・ケットベクトルに対する演算規則は

$$\hat{A}|\psi\rangle = \begin{pmatrix} A_{00} A_{01} A_{02} \cdots \\ A_{10} A_{11} A_{12} \cdots \\ \cdots\cdots \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_0 \\ c_1 \\ \vdots \end{pmatrix} \tag{10a}$$

$$\langle\psi|\hat{A} = (c_0^* c_1^* c_2^* \cdots) \begin{pmatrix} A_{00} A_{01} A_{02} \cdots \\ A_{10} A_{11} A_{12} \cdots \\ \cdots\cdots \end{pmatrix} \tag{10b}$$

である. $|\phi\rangle = \sum_n d_n |\phi_n\rangle$ とすると, ブラケットの内積は

$$\begin{aligned} \langle\psi|\phi\rangle &= \int \mathrm{d}^3\boldsymbol{r} \psi^*(\boldsymbol{r})\phi(\boldsymbol{r}) \\ &= (c_0^* c_1^* c_2^* \cdots) \begin{pmatrix} d_0 \\ d_1 \\ d_2 \\ \vdots \end{pmatrix} = \sum_m c_m^* d_m \end{aligned} \tag{10c}$$

と書かれる. (10c) はベクトルの内積と全く同じ性質:

$$\langle c\psi|\phi\rangle = c^* \langle\psi|\phi\rangle, \qquad \langle\psi|c\phi\rangle = c\langle\psi|\phi\rangle, \tag{11a}$$

$$\langle\psi|\phi\rangle = \langle\phi|\psi\rangle^*, \tag{11b}$$

$$\langle\psi|\psi\rangle \geq 0, \tag{11c}$$

$$\langle\psi|\psi\rangle = 0 \longleftrightarrow |\psi\rangle = 0 \tag{11d}$$

と満足している. したがって $\langle\psi|\phi\rangle$ を「内積」と呼ぶことができる, また「完全性」(又は「完備性」) の条件を

$$\sum_m |\phi_m\rangle\langle\phi_m| = 1 \tag{12}$$

と書くこともある. このような表現を用いると射影演算子を

$$P_n = |\phi_n\rangle\langle\phi_n|, \quad P_n|\psi\rangle = |\phi_n\rangle c_n$$

と書くことができる.

基底の変換

古い基底 $|\phi_n\rangle$ から新しい基底 $|\chi_n\rangle$ への変換は

$$|\chi_m\rangle = \sum_n |\phi_n\rangle U_{nm}, \qquad U_{nm} = \langle\phi_n|\chi_m\rangle \tag{13}$$

と書かれる. ここで変換行列

$$U = (U_{nm}) \tag{14}$$

が定義される. 新しい基底の内積は

$$\langle\chi_{m'}|\chi_m\rangle = \sum_{nn'} U^*_{n'm'} U_{nm} \langle\phi_{n'}|\phi_n\rangle$$

となる. ここで $\{|\chi_m\rangle\}$ と $\{\phi_m\rangle\}$ がともに正規直交基底であることを用いれば

$$\sum_n U^*_{nm'} U_{nm} = \delta_{mm'}, \tag{15}$$

でなくてはならない. したがって U は ユニタリー行列, ユニタリー変換であることが分かる.

(13) を逆に解いて

$$|\phi_n\rangle = \sum_m |\chi_m\rangle (U^{-1})_{mn} = \sum_m |\chi_m\rangle U^*{}_{nm} \tag{13'}$$

と書ける. これから

$$|\psi\rangle = \sum_m |\chi_m\rangle (\sum_n U^*{}_{nm} c_n)$$

となる. これを

$$|\psi\rangle = \sum_m |\chi_m\rangle d_m \tag{16}$$

とあらわせば

$$\begin{aligned} d_m &= \sum_n {U^*}_{nm} c_n \\ c_n &= \sum_m U_{nm} d_m \end{aligned} \tag{17}$$

あるいは

$$(d) = U^\dagger (c), \qquad (c) = U(d)$$

となる. 別の書き方では

$$\begin{aligned} d_i &= \langle \chi_i | \psi \rangle, \\ c_n &= \langle \phi_n | \psi \rangle, \\ U_{ni} &= \langle \phi_n | \chi_i \rangle. \end{aligned} \tag{17$'$}$$

$$\langle \chi_i | \psi \rangle = \sum_n {U^*}_{ni} \langle \phi_n | \psi \rangle \tag{17$''$}$$

である.

演算子$\hat{A}$の行列表現を考えよう.

$$\begin{aligned} \langle \chi_m | \hat{A} | \chi_{m'} \rangle &= \sum_{nn'} {U^*}_{nm} U_{n'm'} \langle \phi_n | \hat{A} | \phi_{n'} \rangle \\ &= \sum_{nn'} (U^\dagger)_{mn} \langle \phi_n | \hat{A} | \phi_{n'} \rangle U_{n'm'} \end{aligned} \tag{18}$$

$$\langle \chi_m | \hat{A} | \chi_n \rangle = A^\chi_{mn} \tag{19}$$

と表し, 行列$\hat{A}^\chi$を

$$\hat{A}^\chi = \begin{pmatrix} A^\chi_{00} & A^\chi_{01} & A^\chi_{02} & \cdots \\ A^\chi_{10} & A^\chi_{11} & A^\chi_{12} & \cdots \\ A^\chi_{20} & A^\chi_{21} & A^\chi_{22} & \cdots \\ & & & \cdots \end{pmatrix} \tag{20}$$

と定義すれば,

$$\hat{A}^\chi = U^\dagger \hat{A}^\phi U \tag{21}$$

と書ける. これが基底の変換に伴う, 行列表現の変換であり, 線形代数でよく見なれたものであろう. また基底ベクトルの変換に伴う物理量の変換規則であると言ってもよい. (シュレディンガー表示からハイゼンベルグ表示への変換も同じように表現の変換として書くこともできる.)