8 The Hamiltonian Matrix

8–1 Amplitudes and vectors

Before we begin the main topic of this chapter, we would like to describe a number of mathematical ideas that are used a lot in the literature of quantum mechanics. Knowing them will make it easier for you to read other books or papers on the subject. The first idea is the close mathematical resemblance between the equations of quantum mechanics and those of the scalar product of two vectors. You remember that if χ and ϕ are two states, the amplitude to start in ϕ and end up in χ can be written as a sum over a complete set of base states of the amplitude to go from ϕ into one of the base states and then from that base state out again into χ:

$$\langle\chi\,|\,\phi\rangle=\sum_{\text{all } i}\langle\chi\,|\,i\rangle\langle i\,|\,\phi\rangle \quad (8.1)$$

We explained this in terms of a Stern-Gerlach apparatus, but we remind you that there is no need to have the apparatus. Equation (8.1) is a mathematical law that is just as true whether we put the filtering equipment in or not—it is not always necessary to imagine that the apparatus is there. We can think of it simply as a formula for the amplitude ⟨χ|ϕ⟩.

We would like to compare Eq. (8.1) to the formula for the dot product of two vectors ***B*** and ***A***. If ***B*** and ***A*** are ordinary vectors in three dimensions, we can write the dot product this way:

$$\sum_{\text{all } i}\left(\boldsymbol{B}\cdot\boldsymbol{e}_i\right)\left(\boldsymbol{e}_i\cdot\boldsymbol{A}\right) \quad (8.2)$$

8–1 振幅とベクトル

この章の主要なトピックに入る前に、量子力学の文献でよく使われるいくつかの数学的な概念について説明しておきたいと思います。それらを知っておくと、他の書籍や論文を読む際に理解が容易になるでしょう。最初の概念は、量子力学の方程式とベクトルのスカラー積の方程式との間にある密接な数学的類似性です。もし χ と ϕ が二つの状態であれば、状態 ϕ から状態 χ へ移る振幅は、完全な基底状態のセットにわたる合計として書くことができ、その振幅は ϕ から基底状態の一つへ、そしてその基底状態から再び χ へ移るものです。

$$\langle\chi\,|\,\phi\rangle=\sum_{\text{all } i}\langle\chi\,|\,i\rangle\langle i\,|\,\phi\rangle \quad (8.1)$$

これはシュテルン・ゲルラッハ装置の観点から説明しましたが、装置がなくても同じです。式(8.1)は数学的な法則であり、装置を使用しても使用しなくても同じように成立します。装置があるかどうかを想像する必要はありません。これは単に振幅 ⟨χ|ϕ⟩ の公式として考えることができます。

式(8.1)を二つのベクトル *B* と *A* の内積の公式と比較したいと思います。*B* と *A* が三次元の普通のベクトルであれば、内積を以下のように書くことができます：

$$\sum_{\text{all } i}\left(\boldsymbol{B}\cdot\boldsymbol{e}_i\right)\left(\boldsymbol{e}_i\cdot\boldsymbol{A}\right) \quad (8.2)$$

with the understanding that the symbol $\boldsymbol{e}_i$ stands for the three unit vectors in the x, y, and z-directions. Then $\boldsymbol{B}\cdot\boldsymbol{e}_1$ is what we ordinarily call B_x; $\boldsymbol{B}\cdot\boldsymbol{e}_2$ is what we ordinarily call B_y; and so on. So Eq. (8.2) is equivalent to

$$B_xA_x + B_yA_y + B_zA_z,$$

which is the dot product $\boldsymbol{B}\cdot\boldsymbol{A}$.

Comparing Eqs. (8.1) and (8.2), we can see the following analogy: The states χ and ϕ correspond to the two vectors $\boldsymbol{B}$ and $\boldsymbol{A}$. The base states i correspond to the special vectors $\boldsymbol{e}_i$ to which we refer all other vectors. Any vector can be represented as a linear combination of the three "base vectors" $\boldsymbol{e}_i$. Furthermore, if you know the coefficients of each "base vector" in this combination—that is, its three components—you know everything about a vector. In a similar way, any quantum mechanical state can be described completely by the amplitude $\langle i|\phi\rangle$ to go into the base states; and if you know these coefficients, you know everything there is to know about the state. Because of this close analogy, what we have called a "state" is often also called a "state vector."

Since the base vectors $\boldsymbol{e}_i$ are all at right angles, we have the relation

$$\boldsymbol{e}_i\cdot \boldsymbol{e}_j = \delta_{ij}. \qquad (8.3)$$

This corresponds to the relations (5.25) among the base states i,

$$\langle i|j\rangle = \delta_{ij}. \qquad (8.4)$$

You see now why one says that the base states i are all "orthogonal."

There is one minor difference between Eq. (8.1) and the dot product. We have that

$$\langle\phi|\chi\rangle=\langle\chi|\phi\rangle^*. \qquad (8.5)$$

But in vector algebra

$$\boldsymbol{A}\cdot\boldsymbol{B} = \boldsymbol{B}\cdot\boldsymbol{A}$$

With the complex numbers of quantum mechanics we have to keep straight the order of the terms, whereas in the dot product, the order doesn't matter.

ここで、記号 $\boldsymbol{e}_i$ は x, y, z 方向の三つの単位ベクトルを指します。したがって、 $\boldsymbol{B}\cdot\boldsymbol{e}_1$ は通常 B_x と呼ばれるものであり、 $\boldsymbol{B}\cdot\boldsymbol{e}_2$ は通常 B_y と呼ばれるものです。式(8.2)は $\boldsymbol{B}\cdot\boldsymbol{A} = B_xA_x + B_yA_y + B_zA_z$ に等しく、これがベクトル $\boldsymbol{B}$ と $\boldsymbol{A}$ の内積です。

式(8.1)と(8.2)を比較すると、次のような類似性が見られます：状態 χ と ϕ は二つのベクトル $\boldsymbol{B}$ と $\boldsymbol{A}$ に対応しています。基底状態 i は、他のすべてのベクトルを参照する特別なベクトル $\boldsymbol{e}_i$ に対応しています。任意のベクトルは、この三つの「基底ベクトル」 $\boldsymbol{e}_i$ の線形結合として表すことができます。さらに、この組み合わせにおける各「基底ベクトル」の係数、つまり三つの成分が分かれば、ベクトルについてすべてを知っていることになります。同様に、任意の量子力学的状態は、基底状態への振幅 $\langle i|\phi\rangle$ で完全に記述できます。そしてこれらの係数が分かれば、その状態についてすべてを知っていることになります。この類似性のために、我々が「状態」と呼んでいるものはしばしば「状態ベクトル」とも呼ばれます。

基底ベクトル $\boldsymbol{e}_i$ はすべて直交しているので、次の関係があります： $\boldsymbol{e}_i\cdot \boldsymbol{e}_j = \delta_{ij}$. (8.3)

これは基底状態 i の間の関係式(5.25)に対応します： $\langle i|j\rangle = \delta_{ij}$ (8.4)

これで、なぜ基底状態 i が「直交している」と言われるかが分かります。式(8.1)と内積の間には一つの小さな違いがあります。次のように成り立ちます： $\langle\phi|\chi\rangle = \langle\chi|\phi\rangle^*$ (8.5)

しかし、ベクトル代数では $\boldsymbol{A}\cdot\boldsymbol{B} = \boldsymbol{B}\cdot\boldsymbol{A}$ です。量子力学の複素数では項の順序を保つ必要がありますが、内積では順序は問題になりません。

Now consider the following vector equation:

$$\boldsymbol{A} = \sum_i \boldsymbol{e}_i(\boldsymbol{e}_i \cdot \boldsymbol{A}). \qquad (8.6).$$

It's a little unusual, but correct. It means the same thing as

$$\boldsymbol{A} = \sum_i A_i \boldsymbol{e}_i = A_x \boldsymbol{e}_x + A_y \boldsymbol{e}_y + A_z \boldsymbol{e}_z. \qquad (8.7)$$

Notice, though, that Eq. (8.6) involves a quantity which is *different* from a dot product. A dot product is just a *number*, whereas Eq. (8.6) is a *vector* equation. One of the great tricks of vector analysis was to abstract away from the equations the idea of a *vector* itself. One might be similarly inclined to abstract a thing that is the analog of a "vector" from the quantum mechanical formula Eq. (8.1)—and one can indeed. We remove the $\langle\chi|$ from both sides of Eq. (8.1) and write the following equation (don't get frightened—it's just a notation and in a few minutes you will find out what the symbols mean):

$$|\phi\rangle = \sum_i |i\rangle\langle i|\phi\rangle. \qquad (8.8)$$

One thinks of the bracket $\langle\chi|\phi\rangle$ as being divided into two pieces. The second piece $|\phi\rangle$ is often called a *ket*, and the first piece $\langle\chi|$ is called a *bra* (put together, they make a "bra-ket"—a notation proposed by Dirac); the half-symbols $|\phi\rangle$ and $\langle\chi|$ are also called *state vectors*. In any case, they are *not* numbers, and, in general, we want the results of our calculations to come out as numbers; so such "unfinished" quantities are only part-way steps in our calculations.

It happens that until now we have written all our results in terms of numbers. How have we managed to avoid vectors? It is amusing to note that even in ordinary vector algebra we *could* make all equations involve only numbers. For instance, instead of a vector equation like

$$\boldsymbol{F} = \mathrm{m}\boldsymbol{a},$$

we could always have written

$$\boldsymbol{C} \cdot \boldsymbol{F} = \boldsymbol{C} \cdot (\mathrm{m}\boldsymbol{a}).$$

We have then an equation between dot products

次のベクトル方程式を考えてみましょう：

$$\boldsymbol{A} = \sum_i \boldsymbol{e}_i(\boldsymbol{e}_i \cdot \boldsymbol{A}). \qquad (8.6).$$

これは少し珍しいですが、正しいです。これは次のように表現するのと同じ意味です：

$$\boldsymbol{A} = \sum_i A_i \boldsymbol{e}_i = A_x \boldsymbol{e}_x + A_y \boldsymbol{e}_y + A_z \boldsymbol{e}_z. \qquad (8.7)$$

ただし、式(8.6)は内積とは異なる量を含んでいることに注意してください。内積は単なる数値ですが、式(8.6)はベクトル方程式です。ベクトル解析の偉大なトリックの一つは、方程式からベクトルそのもののアイデアを抽象化することでした。量子力学の式(8.1)から「ベクトル」に相当するものを抽象化しようとすることもでき、実際にそれが可能です。式(8.1)から $\langle\chi|$ を両側から取り除き、次のような方程式を書きます（驚かないでください—これは単なる表記法であり、数分後に記号の意味がわかります）：

$$|\phi\rangle = \sum_i |i\rangle\langle i|\phi\rangle. \qquad (8.8)$$

ブラケット $\langle\chi|\phi\rangle$ を二つの部分に分けると考えます。第二の部分 $|\phi\rangle$ は「ケット」と呼ばれることが多く、第一の部分 $\langle\chi|$ は「ブラ」と呼ばれます（これらを合わせて「ブラケット」と呼び、ディラックによって提案された記法です）。この半記号 $|\phi\rangle$ と $\langle\chi|$ も「状態ベクトル」と呼ばれます。いずれにしても、これらは数値ではなく、一般に計算結果として数値を得たいので、このような「未完成の」量は計算の途中段階に過ぎません。

これまで、すべての結果を数値で書いてきましたが、ベクトルをどうやって避けていたのでしょうか。面白いことに、普通のベクトル代数でもすべての方程式を数値だけで表すことができました。例えば、ベクトル方程式 $\boldsymbol{F} = \mathrm{m}\boldsymbol{a}$ の代わりに次のように書くことができました：

that is true for *any* vector $\boldsymbol{C}$. But if it is true for any $\boldsymbol{C}$, it hardly makes sense at all to keep writing the $\boldsymbol{C}$!

Now look at Eq. (8.1). It is an equation that is true for *any* χ. So to save writing, we should just leave *out* the χ and write Eq. (8.8) instead. It has the same information *provided* we understand that it should always be "finished" by "multiplying on the left by"—which simply means reinserting—some $\langle\chi|$ on both sides. So Eq. (8.8) means exactly the same thing as Eq. (8.1)—no more, no less. When you want numbers, you put in the $\langle\chi|$ you want.

Maybe you have already wondered about the ϕ in Eq. (8.8). Since the equation is true for *any* ϕ, why do we keep *it*? Indeed, Dirac suggests that the ϕ also can just as well be abstracted away, so that we have only

$$| = \sum_i |i\rangle\langle i|. \qquad (8.9)$$

And this is the great law of quantum mechanics! (There is no analog in vector analysis.) It says that if you put *in* any two states χ and ϕ on the left and right of both sides, you *get back* Eq. (8.1). It is not really very useful, but it's a nice reminder that the equation is true for any two states.

$$\boldsymbol{C}\cdot\boldsymbol{F} = \boldsymbol{C}\cdot(m\boldsymbol{a}).$$

ここで、$\boldsymbol{C}$ は任意のベクトルです。これが任意の $\boldsymbol{C}$ に対して成り立つなら、$\boldsymbol{C}$ を書き続けることはほとんど意味がありません。

式(8.1)を見てください。これは任意の χ に対して成り立つ方程式です。したがって、書き込みを節約するために、χ を省略して式(8.8)を書くべきです。式(8.8)は同じ情報を提供しますが、それは常に「左から掛けることで完成させる」必要があることを理解している限りです。つまり、両側に $\langle\chi|$ を再挿入することを意味します。したがって、式(8.8)は式(8.1)と全く同じ意味を持ちます―それ以上でもそれ以下でもありません。数値が必要な場合は、必要な $\langle\chi|$ を入れます。

もしかすると、式(8.8)の ϕ についてすでに疑問に思っているかもしれません。この方程式が任意の ϕ に対して成り立つので、なぜ ϕ を保持するのか、ということです。実際、ディラックは ϕ も抽象化できると提案しています。つまり以下のようにすることによってのみ可能になります。

$$| = \sum_i |i\rangle\langle i|. \qquad (8.9)$$

これが量子力学の偉大な法則です！（ベクトル解析にはアナログはありません。）これは、任意の二つの状態 χ と ϕ を両側に置けば、式(8.1)を得ることを示しています。実際にはあまり役立ちませんが、この方程式が任意の二つの状態に対して成り立つことを思い出させてくれる素敵な法則です。

8-2 Resolving state vectors

Let's look at Eq. (8.8) again; we can think of it in the following way. Any state vector $|\phi\rangle$ can be represented as a linear combination with suitable coefficients of a set of base "vectors"—or, if you prefer, as a superposition of "unit vectors" in suitable proportions. To emphasize that the coefficients $\langle i|\phi\rangle$ are just ordinary (complex) numbers, suppose we write

$$\langle i|\phi\rangle = C_i.$$

Then Eq. (8.8) is the same as

$$|\phi\rangle = \sum_i |i\rangle C_i. \quad (8.10)$$

We can write a similar equation for any other state vector, say $|\chi\rangle$, with, of course, different coefficients—say D_i. Then we have

$$|\chi\rangle = \sum_i |i\rangle D_i. \quad (8.11)$$

The D_i are just the amplitudes $\langle i|\chi\rangle$.

Suppose we had started by abstracting the ϕ from Eq. (8.1). We would have had

$$\langle\chi| = \sum_i \langle\chi|i\rangle\langle i|. \quad (8.12)$$

Remembering that $\langle\chi|i\rangle = \langle i|\chi\rangle^*$, we can write this as

$$\langle\chi| = \sum_i D_i^*\langle i|. \quad (8.13)$$

Now the interesting thing is that we can just *multiply* Eq. (8.13) and Eq. (8.10) to get back $\langle\chi|\phi\rangle$. When we do that, we have to be careful of the summation indices, because they are quite distinct in the two equations. Let's first rewrite Eq. (8.13) as

$$\langle\chi| = \sum_j D^*_j\langle j|,$$

which changes nothing. Then putting it together with Eq. (8.10), we have

$$\langle\chi|\phi\rangle = \sum_{ij} D^*_j \langle j|i\rangle C_i. \quad (8.14)$$

Remember, though, that $\langle j|i\rangle = \delta_{ij}$, so that in the sum we have left only the terms with $j=i$. We get

$$\langle\chi|\phi\rangle = \sum_i D^*_i C_i, \quad (8.15)$$

where, of course, $D^*_i = \langle i|\chi\rangle^* = \langle\chi|i\rangle$, and $C_i = \langle i|\phi\rangle$. Again we see the close analogy with the dot product

8-2 状態ベクトルの解決

式(8.8)を再度見てみましょう。次のように考えることができます。任意の状態ベクトル$|\phi\rangle$は、基底「ベクトル」のセットを用いた線形結合として表すことができます。あるいは、適切な比率の「単位ベクトル」の重ね合わせとして表すこともできます。係数$\langle i|\phi\rangle$が普通の(複素数の)数字に過ぎないことを強調するために、次のように書くことにしましょう:

$$\langle i|\phi\rangle = C_i.$$

このようにすると、式(8.8)は次のように表されます:

$$|\phi\rangle = \sum_i |i\rangle C_i. \quad (8.10)$$

また、他の任意の状態ベクトル$|\chi\rangle$に対しても、もちろん異なる係数で類似の式を書けます。例えばD_iを使って次のように書くと:

$$|\chi\rangle = \sum_i |i\rangle D_i. \quad (8.11)$$

ここで、D_iは$\langle i|\chi\rangle$に対応する振幅です。もし私たちが最初に式(8.1)からϕを抽出していたとしたら、次のようになります:

$$\langle\chi| = \sum_i \langle\chi|i\rangle\langle i|. \quad (8.12)$$

$\langle\chi|i\rangle = \langle i|\chi\rangle^*$を思い出しながら、次のように書き換えます:

$$\langle\chi| = \sum_i D_i^*\langle i|. \quad (8.13)$$

式(8.10)と掛け合わせると、次のように書けます:

$$\langle\chi|\phi\rangle = \sum_{ij} D^*_j \langle j|i\rangle C_i. \quad (8.14)$$

ここで$\langle j|i\rangle = \delta_{ij}$であるため、式は$j=i$の項だけが残り次のように簡略化されます:

$$\langle\chi|\phi\rangle = \sum_i D^*_i C_i, \quad (8.15)$$

$$\boldsymbol{B}\cdot\boldsymbol{A} = \sum_i B_i A_i.$$

The only difference is the complex conjugate on D_i. So Eq. (8.15) says that if the state vectors $\langle\chi|$ and $|\phi\rangle$ are expanded in terms of the base vectors $\langle i|$ or $|i\rangle$, the amplitude to go from ϕ to χ is given by the kind of dot product in Eq. (8.15). This equation is, of course, just Eq. (8.1) written with different symbols. So we have just gone in a circle to get used to the new symbols.

We should perhaps emphasize again that while space vectors in three dimensions are described in terms of *three* orthogonal unit vectors, the base vectors $|i\rangle$ of the quantum mechanical states must range over the complete set applicable to any particular problem. Depending on the situation, two, or three, or five, or an infinite number of base states may be involved.

We have also talked about what happens when particles go through an apparatus. If we start the particles out in a certain state ϕ, then send them through an apparatus, and afterward make a measurement to see if they are in state χ, the result is described by the amplitude

$$\langle\chi|A|\phi\rangle. \qquad (8.16)$$

Such a symbol doesn't have a close analog in vector algebra. (It is closer to tensor algebra, but the analogy is not particularly useful.) We saw in Chapter 5, Eq. (5.32), that we could write (8.16) as

$$\langle\chi|A|\phi\rangle=\sum_{ij}\langle\chi|i\rangle\langle i|A|j\rangle\langle j|\phi\rangle. \qquad (8.17)$$

This is just an example of the fundamental rule Eq. (8.9), used twice.

We also found that if another apparatus B was added in series with A, then we could write

$$\langle\chi|BA|\phi\rangle=\sum_{ijk}\langle\chi|i\rangle\langle i|B|j\rangle\langle j|A|k\rangle\langle k|\phi\rangle. \ (8.18)$$

ここで，$D^*_i= \langle i|\chi\rangle^*= \langle\chi|i\rangle$, $C_i=\langle i|\phi\rangle$となります．このように、式(8.15)はベクトルの内積に類似しています。ただし、D_iには複素共役が付いています。式(8.15)は、状態ベクトル$\langle\chi|$ と $|\phi\rangle$が基底ベクトル$\langle i|$ または $|i\rangle$で展開されているときに、ϕ から χ への遷移振幅がどのように与えられるかを示しています。この式は、実際には式(8.1)を異なる記号で書いたものです。新しい記号に慣れるために、ひとまわりしてきただけです。

再度強調しておくべきことは、三次元空間ベクトルが三つの直交単位ベクトルで記述されるのに対し、量子力学的状態の基底ベクトル $|i\rangle$ は、問題に応じた完全なセットにわたるべきであるということです。状況によっては、二つ、三つ、五つ、あるいは無限の数の基底状態が関与することがあります。

また、粒子が装置を通過する際のことについても触れました。粒子がある状態 ϕ で始まり、装置を通過させた後に状態 χ にあるかどうかを測定する場合、結果は次の振幅で説明されます:

$$\langle\chi|A|\phi\rangle. \qquad (8.16)$$

このような記号はベクトル代数には密接な類似物がありません(テンソル代数に近いですが、アナロジーとしては特に有用ではありません)。第 5 章の式(5.32)で示したように、式(8.16)は次のように書くことができます:

$$\langle\chi|A|\phi\rangle=\sum_{ij}\langle\chi|i\rangle\langle i|A|j\rangle\langle j|\phi\rangle. \qquad (8.17)$$

これは、基本的なルール式(8.9)を 2 回使った例です。さらに、もし別の装置 Bを Aと直列に追加した場合、次のように書けます:

$$\langle\chi|BA|\phi\rangle=\sum_{ijk}\langle\chi|i\rangle\langle i|B|j\rangle\langle j|A|k\rangle\langle k|\phi\rangle. \ (8.18)$$

これは、ディラックの式(8.9)の書き方に直接由来しています。

Again, this comes directly from Dirac's method of writing Eq. (8.9)—remember that we can always place a bar (||), which is just like the factor 1, between *B* and *A*.

Incidentally, we can think of Eq. (8.17) in another way. Suppose we think of the particle entering apparatus *A* in the state ϕ and coming out of *A* in the state ψ, ("psi"). In other words, we could ask ourselves this question: Can we find a ψ such that the amplitude to get from ψ to χ is always identically and everywhere the same as the amplitude $\langle\chi|A|\phi\rangle$? The answer is yes. We want Eq. (8.17) to be replaced by

$$\langle\chi|\psi\rangle = \sum_i \langle\chi|i\rangle\langle i|\psi\rangle. \quad (8.19)$$

We can clearly do this if

$$\langle i|\psi\rangle = \sum_j \langle i|A|j\rangle\langle j|\phi\rangle = \langle i|A|\phi\rangle, \quad (8.20)$$

which determines ψ. "But it doesn't determine ψ," you say; "it only determines $\langle i|\psi\rangle$." However, $\langle i|\psi\rangle$ *does* determine ψ, because if you have all the coefficients that relate ψ to the base states *i*, then ψ is uniquely defined. In fact, we can play with our notation and write the last term of Eq. (8.20) as

$$\langle i|\psi\rangle = \sum_j \langle i|j\rangle\langle j|A|\phi\rangle. \quad (8.21)$$

Then, since this equation is true for all *i*, we can write simply

$$|\psi\rangle = \sum_j |j\rangle\langle j|A|\phi\rangle. \quad (8.22)$$

Then we can say: "The state ψ is what we get if we start with ϕ and go through the apparatus A."

One final example of the tricks of the trade. We start again with Eq. (8.17). Since it is true for any χ and ϕ, we can drop them both! We then get[1]

$$A = \sum_{ij} |i\rangle\langle i|A|j\rangle\langle j|. \quad (8.23)$$

What does it mean? It means no more, no less, than what you get if you put back the ϕ and χ. As it stands, it is an "open" equation and incomplete. If we multiply it "on the right" by $|\phi\rangle$, it becomes

$$A|\phi\rangle=\sum_{ij}|i\rangle\langle i|A|j\rangle\langle j|\phi\rangle, \quad (8.24)$$

B と A の間に、1 のような役割を果たすバー(||)をいつでも置けることを覚えておいてください。

式(8.17)を別の方法で考えてみましょう。粒子が状態 ϕ で装置 A に入って、状態 ψ (psi) で出ると仮定します。このとき、次のような振幅が常に同じかどうかを尋ねることができます：ψ から χ への振幅が、常にどこでも $\langle\chi|A|\varphi\rangle$と同じであるような ψ を見つけることはできますか？ 答えは，はいです。私たちは式（8.17）を次のように置き換えたいと考えています。

$$\langle\chi|\psi\rangle = \sum_i \langle\chi|i\rangle\langle i|\psi\rangle. \quad (8.19)$$

これは、もし次のようにするならば実現できます：

$$\langle i|\psi\rangle = \sum_j \langle i|A|j\rangle\langle j|\phi\rangle = \langle i|A|\phi\rangle, \quad (8.20)$$

これは ψ を決定します。「しかし、これは ψ を決定するのではなく、$\langle i|\psi\rangle$を決定するだけだ」とあなたは言うかもしれません。しかし、$\langle i|\psi\rangle$は ψ を決定します。なぜなら、もし ψ を基底状態 *i* に関連付けるすべての係数を持っているなら、ψ は一意に定義されるからです。実際、我々は記法を操作して、式(8.20)の最後の項を次のように書くことができます。

$$\langle i|\psi\rangle = \sum_j \langle i|j\rangle\langle j|A|\phi\rangle. \quad (8.21)$$

この方程式がすべての *i* について成り立つので、次のように単純化できます：

$$|\psi\rangle = \sum_j |j\rangle\langle j|A|\phi\rangle. \quad (8.22)$$

これにより、「状態 ψ は、ϕ から A を通過した結果として得られるものである」と言えます。

最後の秘訣の例です。再び式(8.17)から始めます。χ と ϕ について成り立つため、両方を省略できます！すると次のようになります：

which is just Eq. (8.22) all over again. In fact, we could have just dropped the js from that equation and written

$$|\psi\rangle=A|\phi\rangle. \quad (8.25)$$

The symbol A is neither an amplitude, nor a vector; it is a new kind of thing called an *operator*. It is something which "operates on" a state to produce a new state—Eq. (8.25) says that $|\psi\rangle$ is what results if A operates on $|\phi\rangle$. Again, it is still an open equation until it is completed with some bra like $\langle\chi|$ to give

$$\langle\chi|\psi\rangle=\langle\chi|A|\phi\rangle. \quad (8.26)$$

The operator A is, of course, described completely if we give the matrix of amplitudes $\langle i|A|j\rangle$—also written A_{ij}—in terms of any set of base vectors.

We have really added nothing new with all of this new mathematical notation. One reason for bringing it all up was to show you the way of writing pieces of equations, because in many books you will find the equations written in the incomplete forms, and there's no reason for you to be paralyzed when you come across them. If you prefer, you can always add the missing pieces to make an equation between numbers that will look like something more familiar.

Also, as you will see, the "bra" and "ket" notation is a very convenient one. For one thing, we can from now on identify a state by giving its state vector. When we want to refer to a state of definite momentum $\boldsymbol{p}$ we can say: "the state $|\boldsymbol{p}\rangle$." Or we may speak of some arbitrary state $|\psi\rangle$. For consistency we will always use the ket, writing $|\psi\rangle$, to identify a state. (It is, of course an arbitrary choice; we could equally well have chosen to use the bra, $\langle\psi|$.)

…

$$A = \sum_{ij} |i\rangle\langle i|A|j\rangle\langle j|. \quad (8.23)$$

これは、ϕ と χ を戻した場合と同じ意味です。現状では、「開いた」方程式であり不完全です。右側に$|\phi\rangle$を掛けると:

$$A|\phi\rangle=\sum_{ij}|i\rangle\langle i|A|j\rangle\langle j|\phi\rangle, \quad (8.24)$$

これは、式(8.22)を再度示しただけのことです。実際、私たちはその方程式から j を削除し、次のように書くこともできました:

$$|\psi\rangle=A|\phi\rangle. \quad (8.25)$$

記号 A は振幅でもベクトルでもありません。それは「演算子」と呼ばれる新しい種類のものです。演算子は状態に「作用して」新しい状態を生成します。式(8.25)は、A が$|\phi\rangle$に作用すると$|\psi\rangle$が得られることを示しています。この方程式も、$\langle\chi|$のようなブラで完成させるまでは、まだ「開いた」方程式です。完成させると次のようになります:

$$\langle\chi|\psi\rangle=\langle\chi|A|\phi\rangle. \quad (8.26)$$

演算子 A は、基底ベクトルの任意のセットに対して振幅の行列$\langle i|A|j\rangle$を与えることで完全に記述されます。

これまでの新しい数学的記法で、実際には新しいことを加えたわけではありません。これを紹介した理由の一つは、方程式の一部を書く方法を示すためです。多くの書籍では方程式が不完全な形で書かれていることがあり、それに遭遇してもパニックになる必要はありません。もしよければ、欠けている部分を追加して、より馴染みのある数式の形にすることができます。

また、「ブラ」と「ケット」の記法は非常に便利です。一つには、今後は状態ベクトルを用いて状態を特定することができます。例えば、定義された運動量 $\boldsymbol{p}$ の状態を指すときには「状態 $|\boldsymbol{p}\rangle$」と言えます。また、任意の状態$|\psi\rangle$についても言及できます。一貫性を持たせるために、状態を特定するためには常にケット$|\psi\rangle$を使用します。(もちろん、これは任意の選択であり、ブラ $\langle\psi|$を使うことも可能です。) …