$\langle\mathrm{Bra}|\mathrm{Ket}\rangle$ とは？　どう使う？

The current file is: braket.tex

February 2, 2022 6:00pm

まずは空間のベクトルの復習をしよう。ベクトルは向きと大きさをもつ量である。ある直線上の存在する点の位置はその直線上にあるベクトル $\mathbf{r}$ にある係数を掛ければ特定できる。ベクトルは長さ 1 の単位ベクトル $\hat{\mathbf{r}}$ を用いることが便利である。

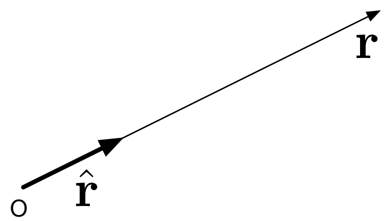

Figure 1: ベクトルは長さ r と方向を示す単位ベクトル $\hat{\mathbf{r}}$ であらわされる。$\mathbf{r} = \mathrm{r}\ \hat{\mathbf{r}}$

2 次元の場合を考えよう。平面内の位置は 2 つの単位ベクトル $\hat{\mathbf{a}}, \hat{\mathbf{b}}$ と 2 つの係数 α, β であらわされる。

$$\mathbf{r} = \alpha\hat{\mathbf{a}} + \beta\hat{\mathbf{b}} \tag{1}$$

$\hat{\mathbf{a}}$ と $\hat{\mathbf{b}}$ が直交してない場合を Fig.2 に示した。ベクトル $\mathbf{r}$ と $\hat{\mathbf{a}}$ の内積（射影）$\mathbf{r}\cdot\hat{\mathbf{a}}$ は |OA| となり，ベクトル $\mathbf{r}$ と $\hat{\mathbf{b}}$

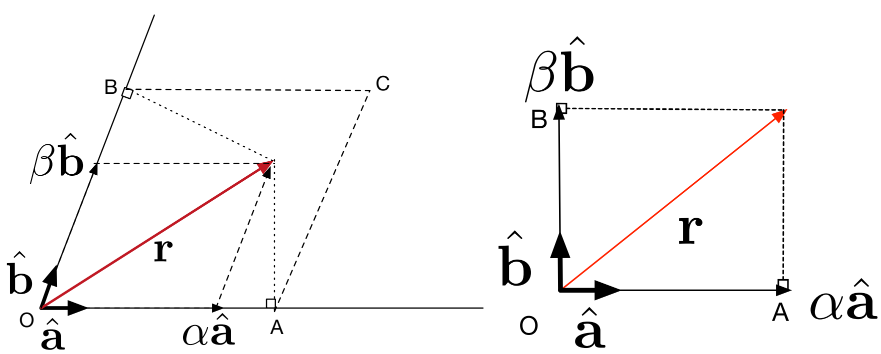

Figure 2: 非直交座標系と直交系座標でのベクトル

の内積（射影）$\mathbf{r}\cdot\hat{\mathbf{b}}$ は |OB| となるが，この射影された二つのベクトルの和 $\vec{\mathrm{OC}} = |\mathrm{OA}|\hat{\mathbf{a}}+|\mathrm{OB}|\hat{\mathbf{a}}$ はベクトル $\mathbf{r}$ とはならない。一方で，$\hat{\mathbf{a}}$ と $\hat{\mathbf{b}}$ が直交している場合は，$\mathbf{r}\cdot\hat{\mathbf{a}} = \alpha$, $\mathbf{r}\cdot\hat{\mathbf{b}} = \beta$ となり，

$$\mathbf{r} = (\mathbf{r}\cdot\hat{\mathbf{a}})\hat{\mathbf{a}} + (\mathbf{r}\cdot\hat{\mathbf{b}})\hat{\mathbf{b}} \tag{2}$$

3 次元のベクトル $\mathbf{r}$ は、直交した単位ベクトル $\mathbf{i}, \mathbf{j}, \mathbf{k}$ とそれらへの射影（内積）$x = \mathbf{r}\cdot\mathbf{i}, y = \mathbf{r}\cdot\mathbf{j}, z = \mathbf{r}\cdot\mathbf{k}$ の単純な和で

$$\mathbf{r} = \underbrace{(\mathbf{r}\cdot\mathbf{i})}_{=x}\mathbf{i} + \underbrace{(\mathbf{r}\cdot\mathbf{j})}_{=y}\mathbf{j} + \underbrace{(\mathbf{r}\cdot\mathbf{k})}_{=z}\mathbf{k} \tag{3}$$

$\mathbf{r} = x\mathbf{i} + y\mathbf{j} + z\mathbf{k}$ と表される。我々は 3 次元の空間しか認識できないが，3 次元のベクトルを 4 次元，5 次元, , , , N 次元へと拡張することもできる。

一般のベクトル $\mathbf{r}$ は，そのベクトルのそれぞれの直交単位ベクトルへの射影ベクトルの和となる。これを一般化して，N 次元空間の正規直交単位ベクトルを $\mathbf{e}_1, \mathbf{e}_2, \mathbf{e}_3, ..., \mathbf{e}_N$ とすると，一般にベクトル $\mathbf{r}$ は

$$\mathbf{r} = \sum_{i=1}^{N} (\mathbf{r} \cdot \mathbf{e}_i)\mathbf{e}_i \tag{4}$$

その際，正規直交単位ベクトル $\mathbf{e}_i$ は以下の関係を満たす。

$$\mathbf{e}_i \cdot \mathbf{e}_j = \delta_{i,j}, \quad \delta_{i,j} = \begin{cases} 1, & i = j \\ 0, & i \neq j \end{cases} \tag{5}$$

これまでは，ベクトルの話であったが関数はどうであろうか？ (4) 式と同じように一般の関数を規格直交関数で展開することは可能であろうか？また関数どうしの内積も存在するのであろうか？答えは YES であり，これはまさにフーリエ級数，フーリエ変換の発想である。いま，ある関数 $f(x)$ が，正規直交関数 $g_n(x)$ で以下のように展開できるとする。展開係数 a_n は左から $g_n^*(x)$ をかけて積分すると以下のように与えられる。ここで，*は複素共役をあらわす。

$$f(x) = \sum_n a_n g_n(x) \tag{6}$$

$$\begin{aligned} \int g_n^*(x) f(x) \mathrm{d}x &= \int g_n^*(x) \sum_m a_m g_m(x) \mathrm{d}x = \sum_m a_m \int g_n^*(x) g_m(x) \mathrm{d}x \\ &= \sum_m a_m \delta_{n,m} = a_n \end{aligned} \tag{7}$$

ここで，以下の規格直交条件を使った。

$$\int g_n^*(x) g_m(x) \mathrm{d}x = \delta_{n,m} = \begin{cases} 1, & n = m \\ 0, & n \neq m \end{cases} \tag{8}$$

２つの関数の積分 $\int g_n^* f(x) \mathrm{d}x$ や $\int g_n^* g_m(x) \mathrm{d}x$ はベクトルの内積に対応して関数の内積とよばれる。

量子力学の波動関数（状態ベクトル）は，（複素）無限次元空間（ヒルベルト空間）での単位ベクトルとその射影であらわされる。すなわち，ある波動関数 ψ は以下のように ϕ_n で展開できるとする

$$\psi(x) = \sum_n c_n \phi_n(x) \tag{9}$$

展開係数 c_n は以下のように与えられる。

$$\langle \phi_n | \psi \rangle \equiv \int \phi_n^*(x) \psi(x) \mathrm{d}x = \sum_m c_m \underbrace{\int \phi_n^*(x) \phi_m(x) \mathrm{d}x}_{=\ \delta_{n,m}} = c_n \tag{10}$$

n は 1 から無限に続くが，正規直交系の ϕ_n を指定しておけば，波動関数 $\psi(x)$ は係数 $c_1, c_2, c_3, ...$ によって決まる。係数 $c_1, c_2, c_3, ...$ を以下に示すように列ベクトルと見なせば，Dirac のケットベクトルで以下のように定義できる。

$$|\psi\rangle \quad \Longrightarrow \quad \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \\ c_3 \\ . \\ . \\ . \\ c_n \\ . \\ . \\ . \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \langle \phi_1 | \psi \rangle \\ \langle \phi_2 | \psi \rangle \\ \langle \phi_3 | \psi \rangle \\ . \\ . \\ . \\ \langle \phi_n | \psi \rangle \\ . \\ . \\ . \end{pmatrix} \tag{11}$$

また，波動関数 $\chi(x)$ と $\psi(x)$ の内積は，$\int \chi^*(x)\psi(x)\mathrm{d}x$ であるが，$\chi(x)$ も正規直交系の ϕ_n で $\chi(x) = \sum_m d_m\phi_n(x)$ と展開できるとすると，

$$\begin{aligned}\int \chi^*(x)\psi(x)\mathrm{d}x &= \int \sum_m d_m^*\phi_m^*(x)\sum_n c_n\phi_n(x)\mathrm{d}x = \sum_m\sum_n d_m^* c_n \int \phi_m^*(x)\phi_n(x)\mathrm{d}x \\ &= \sum_m\sum_n d_m^* c_n \delta_{n,m} = \sum_n d_n^* c_n \end{aligned}\tag{12}$$

最後の式は，以下のように行ベクトルと列ベクトル積となっている。

$$\begin{pmatrix} d_1^* & d_2^* & d_3^* & \ldots & d_n^* & \ldots \end{pmatrix}\begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \\ c_3 \\ . \\ . \\ . \\ c_n \\ . \\ . \\ . \end{pmatrix}\tag{13}$$

$$\tag{14}$$

ここで，

$$\langle\chi|\phi_n\rangle = \int \chi^*(x)\phi_n(x)\mathrm{d}x = \sum_m d_m^* \underbrace{\int \phi_m^*(x)\phi_n(x)\mathrm{d}x}_{=\ \delta_{n,m}} = d_n^*\tag{15}$$

χ を Dirac のブラベクトルであらわせば，

$$\langle\chi| \implies \begin{pmatrix} d_1^* & d_2^* & d_3^* & \ldots & d_m^* & \ldots \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \langle\chi|\phi_1\rangle & \langle\chi|\phi_2\rangle & \langle\chi|\phi_3\rangle & \ldots & \langle\chi|\phi_m\rangle & \ldots \end{pmatrix}\tag{16}$$

であり波動関数 $\chi(x)$ と $\psi(x)$ の内積はブラケットをつかって，

$$\langle\chi|\psi\rangle = \begin{pmatrix} d_1^* & d_2^* & d_3^* & \ldots & d_m^* & \ldots \end{pmatrix}\begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \\ c_3 \\ . \\ . \\ . \\ c_n \\ . \\ . \\ . \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \langle\chi|\phi_1\rangle & \langle\chi|\phi_2\rangle & \langle\chi|\phi_3\rangle & \ldots & \langle\chi|\phi_m\rangle & \ldots \end{pmatrix}\begin{pmatrix} \langle\phi_1|\psi\rangle \\ \langle\phi_2|\psi\rangle \\ \langle\phi_3|\psi\rangle \\ . \\ . \\ . \\ \langle\phi_n|\psi\rangle \\ . \\ . \\ . \end{pmatrix}\tag{17}$$

と書かれる。

式 (9) の c_n に式 (10) を代入して，右辺の ϕ_n と c_n の順番を入れ替えると

$$|\psi\rangle = \sum_n |\phi_n\rangle\langle\phi_n|\psi\rangle\tag{18}$$

ここで右辺の $|\psi\rangle$ より前を演算子とみなすと $|\psi\rangle \to |\psi\rangle$ への恒等変換となるので

$$\hat{I} = \sum_n |\phi_n\rangle\langle\phi_n|\tag{19}$$

となる。これを射影演算子 (projection operator) という。[1]

[1] この式をファインマンは the great law of quantum mechanics! (There is no analog in vector analysis) と The Feynman Lectures on Physics, Volume III, Chapter 8、(8.9) 式で書いている。式の左辺は 1 や $\hat{I}$ ではなく縦棒 (vertical bar) すなわち $| = \sum_i |i\rangle\langle i|$ と記述しているところがファインマンらしいセンスを感じる！

ある演算子 $\hat{O}$ を波動関数 ψ に作用させて，別の波動関数 χ との内積をとる。2 つの波動関数は正規直交関数 ϕ_N で展開できるとすると

$$\int \chi^*(x)\hat{O}\psi(x)\mathrm{d}x = \sum_m \sum_n d_m^* \int \phi_m^*(x)\hat{O}\phi_n(x)\mathrm{d}x c_n = \sum_m \sum_n d_m^* \langle \phi_m|\hat{O}|\phi_n\rangle c_n$$

これは，以下のように行ベクトル，行列，列ベクトルの積とみなせる。演算子を行列とみなせば

$$\langle \phi_i|\hat{O}|\phi_j\rangle \equiv O_{ij} \tag{20}$$

$$\int \chi^*(x)\hat{O}\psi(x)\mathrm{d}x = \tag{21}$$

$$(d_1^*\ d_2^*\ d_3^* \dots d_m^* \dots) \begin{pmatrix} O_{11} & O_{12} & O_{13} & \dots & O_{1n} & \dots \\ O_{21} & O_{22} & O_{23} & \dots & O_{2n} & \dots \\ O_{31} & O_{32} & O_{33} & \dots & O_{3n} & \dots \\ . & . & . & \dots & . & \dots \\ . & . & . & \dots & . & \dots \\ . & . & . & \dots & . & \dots \\ O_{m1} & O_{m2} & O_{m3} & \dots & O_{mn} & \dots \\ . & . & . & \dots & . & \dots \\ . & . & . & \dots & . & \dots \\ . & . & . & \dots & . & \dots \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \\ c_3 \\ . \\ . \\ . \\ c_n \\ . \\ . \\ . \end{pmatrix}$$

また，$d_m^* = \langle \chi|\phi_m\rangle, c_n = \langle \phi_n|\psi\rangle$ を用いると

$$\begin{aligned} \int \chi^*(x)\hat{O}\psi(x)\mathrm{d}x &= \sum_m \sum_n d_m^* \langle \phi_m|\hat{O}|\phi_n\rangle c_n = \langle \chi| \sum_m |\phi_m\rangle\langle\phi_m|\hat{O}\sum_n |\phi_n\rangle\langle\phi_n|\psi\rangle \\ &= \langle \chi|\hat{I}\hat{O}\hat{I}|\psi\rangle = \langle\chi|\hat{O}|\psi\rangle \end{aligned} \tag{22}$$

このように，波動関数はヒルベルト空間の列または行ベクトルであらわされ，演算子は行列としてあらわされるので，行列をもちいた線型代数が量子力学には重要な働きを示す。

連続的な基底系に対するブラケット表現:空間表示

前の例では，離散的な基底系に対して考慮したが，連続する基底系にも定義しよう。今位置に対する演算子 $\hat{\mathbf{R}}$ と連続系の基底 $|\mathbf{r}\rangle$ の固有方程式は，

$$\hat{\mathbf{R}}|\mathbf{r}\rangle = \mathbf{r}|\mathbf{r}\rangle \tag{23}$$

ここで，$\mathbf{r}$ は位置ベクトルである。この基底系に対する正規直交条件は

$$\langle \mathbf{r}'|\mathbf{r}\rangle = \delta(\mathbf{r}-\mathbf{r}') = \delta(x-x')\delta(y-y')\delta(z-z') \tag{24}$$

$$\int d\mathbf{r}\ |\mathbf{r}\rangle\langle\mathbf{r}| = \hat{I} \tag{25}$$

デルタ関数は以下の性質をもつ。

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \delta(x)\mathrm{d}x = 1, \quad \int_{-\infty}^{+\infty} f(x)\delta(x-x')\mathrm{d}x = f(x') \tag{26}$$

すべての状態ベクトル $|\psi\rangle$ は以下のように展開できる

$$|\psi\rangle = \hat{I}|\psi\rangle = \int d\mathbf{r}\ |\mathbf{r}\rangle\langle\mathbf{r}|\psi\rangle \equiv \int d\mathbf{r}\ \psi(\mathbf{r})|\mathbf{r}\rangle \tag{27}$$

$$\psi(\mathbf{r}) \equiv \langle \mathbf{r}|\psi\rangle \tag{28}$$

これが，位置に依存した波動関数 $\psi(\mathbf{r})$ の本来の定義である。存在確率密度は，

$$\psi^*(\mathbf{r})\psi(\mathbf{r})d\mathbf{r} = |\psi(\mathbf{r})|^2 d\mathbf{r} = |\langle\mathbf{r}|\psi\rangle|^2 d\mathbf{r} \tag{29}$$

２つの状態ベクトル間の内積は

$$\langle\phi|\psi\rangle = \langle\phi|\int d\mathbf{r}\ |\mathbf{r}\rangle\langle\mathbf{r}|\psi\rangle = \int d\mathbf{r}\phi^*(\mathbf{r})\psi(\mathbf{r}) \tag{30}$$

空間表示の際，交換関係 $[\hat{X},\hat{P}_x] = i\hbar$ より,$\hat{P}_x = -i\hbar\frac{\partial}{\partial x}$ とすれば,

$$\begin{aligned}(\hat{X}\hat{P}_x - \hat{P}_x\hat{X})\psi(x) &= [x(-i\hbar)\frac{\partial}{\partial x} + i\hbar\frac{\partial}{\partial x}x]\psi(x) = -i\hbar(x\frac{\partial}{\partial x} - 1 - x\frac{\partial}{\partial x})\psi(x) \\ &= i\hbar\psi(x) \end{aligned}\tag{31}$$

が成立する。以下の運動量表示での交換関係と比較せよ。

連続的な基底系に対するブラケット表現:運動量表示

今運動量に対する演算子 $\hat{\mathbf{P}}$ と連続系の基底 $|\mathbf{p}\rangle$ の固有方程式は,

$$\hat{\mathbf{P}}|\mathbf{p}\rangle = \mathbf{p}|\mathbf{p}\rangle \tag{32}$$

ここで，$\mathbf{p}$ は運動量ベクトルである。この基底系に対する正規直交条件は

$$\langle\mathbf{p}'|\mathbf{p}\rangle = \delta(\mathbf{p}-\mathbf{p}') = \delta(p_x - p_{x'})\delta(p_y - p_{y'})\delta(p_z - p_{z'}) \tag{33}$$

$$\int d\mathbf{p}\ |\mathbf{p}\rangle\langle\mathbf{p}| = \hat{I} \tag{34}$$

この基底系に対する正規直交条件は

$$\langle\mathbf{p}'|\mathbf{p}\rangle = \delta(\mathbf{p}-\mathbf{p}') = \delta(p_x - p_{x'})\delta(p_y - p_{y'})\delta(p_z - p_{z'}) \tag{35}$$

$$\int d\mathbf{p}\ |\mathbf{p}\rangle\langle\mathbf{p}| = \hat{I} \tag{36}$$

すべての状態ベクトル $|\psi\rangle$ は以下のように展開できる

$$|\psi\rangle = \hat{I}|\psi\rangle = \int d\mathbf{p}\ |\mathbf{p}\rangle\langle\mathbf{p}|\psi\rangle \equiv \int d\mathbf{p}\ \psi(\mathbf{p})|\mathbf{p}\rangle \tag{37}$$

$$\psi(\mathbf{p}) \equiv \langle\mathbf{p}|\psi\rangle \tag{38}$$

これが, 運動量に依存した波動関数 $\psi(\mathbf{p})$ の本来の定義である。運動量空間での存在確率密度は,

$$\psi^*(\mathbf{p})\psi(\mathbf{p})d\mathbf{p} = |\psi(\mathbf{p})|^2 d\mathbf{p} = |\langle\mathbf{p}|\psi\rangle|^2 d\mathbf{p} \tag{39}$$

２つの状態ベクトル間の内積は

$$\langle\phi|\psi\rangle = \langle\phi|\int d\mathbf{p}\ |\mathbf{p}\rangle\langle\mathbf{p}|\psi\rangle = \int d\mathbf{p}\phi^*(\mathbf{p})\psi(\mathbf{p}) \tag{40}$$

運動量表示の際，交換関係 $[\hat{X},\hat{P}_x] = i\hbar$ より, $\hat{X} = i\hbar\frac{\partial}{\partial p_x}$ とすれば,

$$\begin{aligned}(\hat{X}\hat{P}_x - \hat{P}_x\hat{X})\psi(p_x) &= [i\hbar\frac{\partial}{\partial p_x}p_x - p_x i\hbar\frac{\partial}{\partial p_x}]\psi(p_x) = i\hbar(1 + p_x\frac{\partial}{\partial p_x} - p_x\frac{\partial}{\partial p_x})\psi(p_x) \\ &= i\hbar\psi(p_x) \end{aligned}\tag{41}$$

が成立する。上で示した空間表示での交換関係と比較せよ。

デルタ関数

基本的な性質は

$$\delta(x-x_0) = \begin{cases} \infty, & x = x_0 \\ 0, & x \neq x_0 \end{cases} \tag{42}$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} \delta(x-x_0)\mathrm{d}x = 1 \tag{43}$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} f(x)\delta(x-x_0)\mathrm{d}x = f(x_0) \tag{44}$$

$$\tag{45}$$

となる。
　定義としては,

$$\delta(x) \equiv \lim_{\epsilon\to 0}\delta_\epsilon(x),\ \delta_\epsilon(x) = \begin{cases} \frac{1}{\epsilon} & -\frac{\epsilon}{2} < x < \frac{\epsilon}{2} \\ 0, & |x| > \frac{\epsilon}{2} \end{cases} \tag{46}$$

$$\delta(x) \equiv \lim_{\epsilon\to 0}\frac{\sin(x/\epsilon)}{\pi x} = \lim_{K\to\infty}\frac{\sin(Kx)}{\pi x} \tag{47}$$

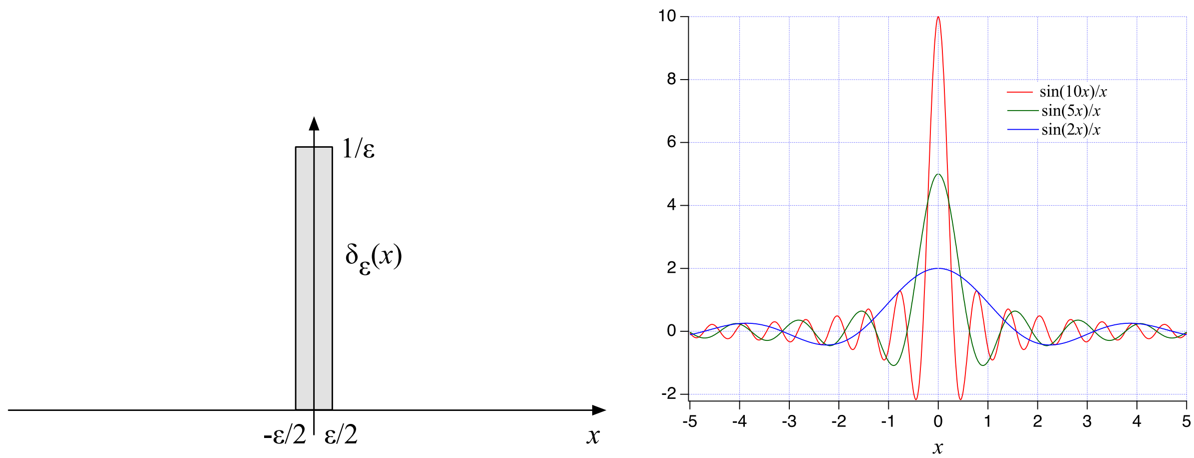

Figure 3: デルタ関数の２つの定義

最後の式について考える。

$$\lim_{x\to 0}\sin(Kx)/x = \lim_{x\to 0}[\sin(Kx)]'/x' = K\cos(0)/1 = K \tag{48}$$

$$\text{zero cross point} : \sin(Kx) = 0, Kx = -\pi, \pi,\ x = -\pi/K, \pi/K \tag{49}$$

$$\text{surface area} : S = (2\pi/K)K/2 = \pi \tag{50}$$

$$\lim_{K\to\infty}\frac{1}{\pi}\int_{-\infty}^{\infty}\frac{\sin(Kx)}{x} = 1 \tag{51}$$

以下のフーリエ変換を求める

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{-ik(x-x')}\mathrm{d}k = \lim_{K\to\infty}\int_{-K}^{K} e^{-ik(x-x')}\mathrm{d}k \tag{52}$$

$$= \lim_{K\to\infty}\frac{1}{-i(x-x')}\left[e^{-ik(x-x')}\right]_{k=-K}^{k=+K} = \lim_{K\to\infty}\frac{1}{-i(x-x')}[e^{-iK(x-x')} - e^{iK(x-x')}] \tag{53}$$

$$= \lim_{K\to\infty}\frac{1}{-i(x-x')}[\cos K(x-x') - i\sin K(x-x') - \cos K(x-x') - i\sin K(x-x')] \tag{54}$$

$$= \lim_{K\to\infty}\frac{1}{-i(x-x')}[-2i\sin K(x-x')] = \lim_{K\to\infty}\frac{2\sin K(x-x')}{(x-x')} \tag{55}$$

$$= 2\pi\delta(x-x') \tag{56}$$

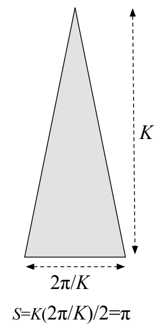

Figure 4: $\sin(Kx)/x$ の積分

$X = x - x'$ として以下の積分は留数の定理（複素関数論）をつかってもとめることができる。

$$\int_{-\infty}^{\infty} \frac{\sin(KX)}{X} \mathrm{d}X = \mathrm{Im} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{e^{iKz}}{z} \mathrm{d}z,\ Kz = Z \tag{57}$$

$$\mathrm{Im} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{e^{iZ}}{Z/K} \mathrm{d}Z/K = \mathrm{Im} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{e^{iZ}}{Z} \mathrm{d}Z \tag{58}$$

$$= \mathrm{Im} i\pi = \pi \tag{59}$$

最後の式で留数の定理を使った。

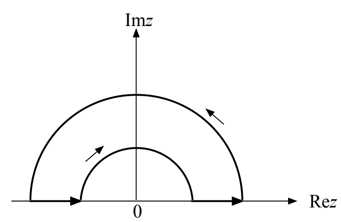

Figure 5: $\sin(Kx)/x$ の積分

留数の定理（理系学生が感動するツボらしい　発散する特異点の回りを経路積分すれば値がえられるからね！）については，George B. Arfken, Hans J. Weber, Frank E. Harris， Mathematical Methods for Physicists: A Comprehensive Guide, 7th ed. Chap. 11 (Academic Press, Oxford, 2013) に詳しい。

性質としてよく使うものに

$$\delta[g(x)] = \sum_i \frac{1}{|g'(x_i)|} \delta(x - x_i) \tag{60}$$

ここで，x_i は $g(x) = 0$ の点で，$g'(x_i) \neq 0$ である。この公式をつかって

$$\delta(ax) = \frac{1}{|a|} \delta(x),\ a \neq 0 \tag{61}$$

$$\delta[(x-a)(x-b)] = \frac{1}{|a-b|} [\delta(x-a) + \delta(x-b)],\ a \neq b \tag{62}$$

$$\delta[(x^2 - a^2)] = \frac{1}{2|a|} [\delta(x-a) + \delta(x+a)], a \neq 0 \tag{63}$$

$$\tag{64}$$

階段関数である θ 関数とは以下の関係がある

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x} \theta(x) = \delta(x), \quad \theta(x) = \begin{cases} 1, & x > 0 \\ 0, & x < 0 \end{cases} \tag{65}$$