量子力学 2a

1　行列表示での量子力学の体系

Def 1.1. 内積空間 (計量ベクトル空間)
実数体または複素数体 $\mathbb{K}$ 上の線形空間の任意の元 $x, y, z \in X$ と任意の $\lambda \in \mathbb{K}$ に対して、

1. $\langle x, x \rangle \geq 0, \qquad$ 特に $\langle x, x \rangle = 0 \iff x = 0$

2. $\langle x, y \rangle = \overline{\langle y, x \rangle}$

3. $\langle x, \lambda y + z \rangle = \lambda \langle x, y \rangle + \langle x, z \rangle$

の条件を満たす、$\langle x, y \rangle$ が定まるとき、$\langle x, y \rangle$ を x と y の<u>内積</u>といい、内積をもつ線形空間を<u>内積空間</u>という。

Def 1.2. ノルム空間
$\mathbb{K}$ を実数体または複素数体とし、$\mathbb{K}$ 上のベクトル空間 V を考える。
このとき、任意の $a \in K$ と任意の $\boldsymbol{u}, \boldsymbol{v} \in V$ に対して、

1. $\|\boldsymbol{v}\| = 0 \iff \boldsymbol{v} = 0$

2. $\|a\boldsymbol{v}\| = |a| \, \|\boldsymbol{v}\|$

3. $\|\boldsymbol{u} + \boldsymbol{v}\| \leq \|\boldsymbol{u}\| + \|\boldsymbol{v}\|$

を満たす $\|\cdot\|$ が定まるとき、$\|\cdot\|$ の<u>ノルム</u>と呼ぶ。ノルムが定義されたベクトル空間 $(X, \|\cdot\|)$ を<u>ノルム空間</u>という。

Def 1.3. 距離空間
X を集合とする。任意の $x, y, z \in X$ に対して、

1. $d(x,y) \geq 0,$ 　　特に $d(x,y) = 0 \iff x = y$

2. $d(x,y) = d(y,x)$

3. $d(x,y) \leq d(x,z) + d(z,y)$

の条件を満たす、$d(x,y)$ が定まるとき、組 X, d を距離空間という。

Def 1.4. 距離空間におけるコーシー列
(X,d) を距離空間とする。列 $\{\psi\} \subset X$ がコーシー列であるとは、
任意の $\varepsilon > 0$ に対し、ある $N \geq 1$ が存在して、

$$n, m \geq N \implies d(\psi_n, \psi_m) < \varepsilon \tag{1}$$

となることをいう。

系 1.1. 収束する列はコーシー列である。

Def 1.5. 完備
(X,d) を距離空間とする。X が完備であるとは、X における任意のコーシー列が収束列になることである。

系 1.2. 任意の内積空間は距離空間である。内積空間で $d(x,y) := \sqrt{\langle x-y, x-y \rangle}$ は距離関数となる。

系 1.3. 任意の内積空間はノルム空間である。内積空間で $\|x\| := \sqrt{\langle x, x \rangle}$ はノルムとなる。

系 1.4. 任意のノルム空間は距離空間である。ノルム空間で $d(x,y) := \|x-y\|$ は距離関数となる。

Def 1.6. ヒルベルト空間
内積空間 X がノルムに関して完備であるとき、X をヒルベルト空間という。

Def 1.7. 重なり積分
波動関数 $\phi(\boldsymbol{r})$ と $\psi(\boldsymbol{r})$ の重なり積分 $\langle\phi|\psi\rangle$ を

$$\langle\phi|\psi\rangle \equiv \int \phi^*(\boldsymbol{r})\psi(\boldsymbol{r})d\boldsymbol{r} \tag{2}$$

と定義する。演算子 F を $\psi(\boldsymbol{r})$ に作用させたものと $\phi(\boldsymbol{r})$ の重なり積分を

$$\langle\phi|F|\psi\rangle \equiv \langle\phi|F\psi\rangle = \int \phi^*(\boldsymbol{r})F\psi(\boldsymbol{r})d\boldsymbol{r} \tag{3}$$

の記法で表す。

Def 1.8. 直交規格化条件
関数 $u_1(\boldsymbol{r}), u_2(\boldsymbol{r}), \cdots$ に対して、

$$\langle u_n|u_m\rangle = \int u_n^*(\boldsymbol{r})u_m(\boldsymbol{r})d\boldsymbol{r} = \delta_{n,m} = \begin{cases} 1 & (m=n) \quad \text{規格化条件} \\ 0 & (m \neq n) \quad \text{直交条件} \end{cases} \tag{4}$$

の条件を直交規格化条件と呼び、$u_1, u_2, \cdots$ は直交規格関数系または正規直交関数系を作るという。

Def 1.9. 直交関数系における完全性
任意の関数 ψ が、ある直交関数系 $\{u_n\}$ で展開できるとき、

$$\psi = \sum_n c_n u_n \tag{5}$$

直交関数系 $\{u_n\}$ は完全系であるという。また、完全系を固有関数としてもつ力学量をオブザーバブルとよぶ。

系 1.5. $\{1, \cos x, \cos 2x, \cdots, \sin x, \sin 2x, \cdots\}$ は完全系である。
よって、$-\pi \leq x \leq \pi$ の範囲における任意の関数をこの線形結合で表せる。

Thm 1.1.
関数 ψ が、直交規格関数系 $\{u_n\}$ の線形結合の和 $\psi = \sum c_n u_n$ で表されるとき、展開係数 c_n は

$$c_n = \langle u_n, \psi\rangle \tag{6}$$

と表される。

proof 1.1. $\psi = \sum_m c_m u_m$ の両辺に u_n^* をかけて空間積分すればよい。

Thm 1.2. 完全性の条件
関数系 $\{u_n(\boldsymbol{r})\}$ が完全系となる条件は

$$\sum_n u_n(\boldsymbol{r})u_n^*(\boldsymbol{r}') = \delta(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}') \tag{7}$$

が成り立つことである。

proof 1.2. $\sum_n c_n u_n(\boldsymbol{r})$ を展開係数の積分表示とこの条件を使って変形すると $\psi(\boldsymbol{r})$ となることを確認すればよい。

Thm 1.3. 波動関数 ϕ, ψ に演算子 F をはさんだ重なり積分 $\langle\phi|F|\psi\rangle$ は *3* つの行列の積で表せられる。

$$\langle\phi|F|\psi\rangle = \sum_{m=1}^{\infty}\sum_{n=1}^{\infty} d_m^* F_{m,n}\ c_n \tag{8}$$

proof 1.3. ψ と ϕ を完全直交関数系の線形結合和で表し、重なり積分を実行すればよい。

系 1.6. 波動関数は、無限次元のベクトルで表される。

$$\langle\phi| \quad \longrightarrow \quad \begin{pmatrix} d_1^* & d_2^* & \cdots \end{pmatrix}, \qquad |\psi\rangle \quad \longrightarrow \quad \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \\ \vdots \end{pmatrix} \tag{9}$$

Def 1.10.
波動関数の表現 $|\psi\rangle$ を<u>状態ベクトル</u>と呼び、状態ベクトルの集合 $V = \{|\psi_1\rangle, |\psi_2\rangle, \cdots\}$ を<u>状態空間</u>と呼ぶ。

Thm 1.4. 状態空間はヒルベルト空間である。

proof 1.4. 状態空間では内積 $\langle\phi|\psi\rangle$ が定義され、また、規格化条件より

$$\langle\psi|\psi\rangle = \sum_{n=1}^{\infty}\|c_n\|^2 = 1 \tag{10}$$

であるから、状態空間は完備である。

Def 1.11. エルミート演算子
演算子 $F^\dagger$ および F について、

$$\int \psi^* F\phi dx = \int (F^\dagger\psi)^*\phi dx \quad \text{または} \quad \int \psi^* F^\dagger\phi dx = \int (F\psi)^*\phi dx \tag{11}$$

と変形できるとき、演算子 $F^\dagger$ を、F に対する<u>エルミート共役な演算子</u>と呼ぶ。
特に、$F^\dagger = F$ が成立するとき、この演算子 F を<u>エルミート演算子</u>という。

Thm 1.5.
波動関数 ϕ, ψ の重なり積分の行列表示

$$\langle\phi|F|\psi\rangle = \sum_{m=1}^{\infty}\sum_{n=1}^{\infty} d_m^* F_{m,n}\ c_n \tag{12}$$

において、F はエルミート行列である。

proof 1.5.
エルミート共役な演算子の定義式 (積分) に波動関数の線形和表示を代入して、$\left(F^\dagger\right)_{m,n} = F_{n,m}^*$ となることを示せばよい。

系 1.7. エルミート演算子の期待値 $\langle F\rangle = \langle\psi|F|\phi\rangle$ は実数となる。

系 1.8. 期待値が実数である物理量に対する演算子はエルミート演算子でないといけない。

系 1.9. ハミルトニアンがエルミート演算子であるとき、波動関数の確率は保存される。