量子力学の基本法則（2）：変換論と表示理論 filename=theorem2-050526.tex

1 量子状態、演算子の変換論 (一般論）

1.1 ヒルベルト空間とオブザーバブル

無限次元の複素ベクトル空間としてのヒルベルト空間を考える。ヒルベルト空間の中のベクトルを $\Psi,\ \Psi_1,\cdots$ と記すと、次のような性質をもつ、有限の値をもつ内積（＝内積が収束する）が定義される。内積の記号を $\langle\Psi_1,\Psi_2\rangle$ で表すと、

$$\langle\Psi_1,\Psi_2\rangle = \langle\Psi_2,\Psi_1\rangle^*, \tag{1.1}$$

$$\langle\Psi_1,\lambda\Psi_2\rangle = \lambda\langle\Psi_1,\Psi_2\rangle, \tag{1.2}$$

$$\langle\Psi_1,\Psi_2+\Psi_3\rangle = \langle\Psi_1,\Psi_2\rangle+\langle\Psi_1,\Psi_3\rangle, \tag{1.3}$$

$$\langle\Psi,\Psi\rangle \geq 0 \tag{1.4}$$

ここで、λ は一般には複素数である。（内積の記号はディラック（Dirac) の記号のように、ブラベクトルとケットベクトルの積であると考えてもよい。）式 (1.1) と（1.2）から

$$\langle\lambda\Psi_1,\Psi_2\rangle = \lambda^*\langle\Psi_1,\Psi_2\rangle \tag{1.5}$$

が得られる。もし

$$\langle\Psi_1,\Psi_2\rangle = 0 \tag{1.6}$$

ならば、ベクトル Ψ_1,Ψ_2 は直交するという。ベクトル Ψ の長さまたはノルム (norm) と呼び、それを

$$||\Psi|| = (\langle\Psi,\Psi\rangle)^{1/2} \tag{1.7}$$

で定義する。ノルム 1 のベクトルは規格化されているという。

あるエルミート演算子 $\hat{A}$ を考え、その固有値と固有ベクトルを $a,\ |a\rangle$ と書く。すなわち、

$$\hat{A}|a\rangle = a|a\rangle. \tag{1.8}$$

この式（1.8）を満たす固有ベクトルが完全系をなすとき、言い換えると、ヒルベルト空間の任意のベクトルが演算子 $\hat{A}$ の固有ベクトルで展開できるとき、Dirac は演算子 $\hat{A}$ をオブザーバブル（観測可能量、observable）と読んだ。

1.2 基底の完全性

任意のケット・ベクトル $|a\rangle$ は完全直交規格化された基底ベクトルまたは基底 (basis)$\{|e_i\rangle,\ i=1,2,\cdots\}$ により展開できる、すなわち基底の線形結合で表される。ディラックのブラ

ケット記号で表現すれば、完全性 (完備性）

$$\sum_i |e_i\rangle\langle e_i| = 1 \tag{1.9}$$

と直交規格性

$$\langle e_i|e_j\rangle = \delta_{ij} \tag{1.10}$$

が成立する場合には

$$|a\rangle = \sum_i |e_i\rangle\langle e_i|a\rangle = \sum_i a_i|e_i\rangle,\ (a_i \equiv \langle e_i|a\rangle) \tag{1.11}$$

と表される。すなわち、ケット・ベクトル $|a\rangle$ と $(a_1, a_2, \cdots)^t$ は 1 対 1 に対応する。同様に、ブラ・ベクトル $\langle a|$ と $(a_1^*, a_2^*, \cdots)$ は 1 対 1 に対応する。

1.3　演算子とその表現行列

一般に、演算子 $\hat{B}$ はあるベクトル $|a\rangle$ に作用して、別のベクトル $|c\rangle$ に変化させる。

$$\hat{B}|a\rangle = |c\rangle \tag{1.12}$$

演算子の基底ベクトルに対する作用を知れば、その演算子は特定される、または定められる。ベクトル $\hat{O}|e_i\rangle$ も基底ベクトルの線形結合として書ける。

$$\hat{O}|e_i\rangle = (\sum_j |e_j\rangle\langle e_j|)\hat{O}|e_i\rangle = \sum_j O_{ji}|e_j\rangle,\ (O_{ji} \equiv \langle e_j|\hat{O}|e_i\rangle). \tag{1.13}$$

行列 $\{O_{ij}\}$ を基底 $\{|e_i\rangle\}$ における演算子 $\hat{O}$ の表現行列 (representation matrix) という。

2 つ以上の演算子の積の表現行列はそれぞれの表現行列の積である。ここでは 2 つの演算子 $\hat{A}, \hat{B}$ の積 $\hat{C} \equiv \hat{A}\hat{B}$ の表現行列を考える。まず、$\hat{C}$ の表現行列は

$$\hat{C}|e_j\rangle = \sum_i C_{ij}|e_i\rangle \tag{1.14}$$

のように得られる。他方、$\hat{A}\hat{B}$ の表現行列は

$$\begin{aligned}\hat{A}(\hat{B}|e_j\rangle) &= \hat{A}(\sum_k B_{kj}|e_k\rangle) = \sum_k B_{kj}(\hat{A}|e_k\rangle) = \sum_k B_{kj}(\sum_i A_{ik}|e_i\rangle) \\ &= \sum_i(\sum_k A_{ik}B_{kj})|e_i\rangle\end{aligned} \tag{1.15}$$

と書ける。したがって

$$C_{ij} = \sum_k A_{ik}B_{kj} \tag{1.16}$$

となり、2 つの演算子の積の表現行列がそれぞれの表現行列の積であることが証明された。3 つ以上の演算子の積の場合も同様に証明できる。

2 つ以上の演算子の積の順序、あるいは表現行列の積の順序は非常に重要である。一般には $\hat{A}\hat{B} \neq \hat{B}\hat{A}$、非可換であり、対応する表現行列の積の順序も一般には非可換である。

1.4 共役演算子とエルミート演算子

演算子 $\hat{O}$ がケット・ベクトル $|a\rangle$ を $|b\rangle$ に変換する

$$\hat{O}|a\rangle = |b\rangle \tag{1.17}$$

ならば、定義により、その共役演算子 $\hat{O}^\dagger$ はブラ・ベクトル $\langle a|$ を $\langle b|$ に変換する。

$$\langle a|\hat{O}^\dagger = \langle b|. \tag{1.18}$$

この式は式（1.17）の共役形と呼ばれている。式（1.17）の両辺に左から $\langle c|$ をかけると

$$\langle c|\hat{O}|a\rangle = \langle c|b\rangle. \tag{1.19}$$

同様に、式（1.18）の両辺に右から $|c\rangle$ をかけると

$$\langle a|\hat{O}^\dagger|c\rangle = \langle b|c\rangle \tag{1.20}$$

が得られる。ここで、$\langle b|c\rangle = \langle c|b\rangle^*$ なので

$$\langle a|\hat{O}^\dagger|c\rangle = \langle c|\hat{O}|a\rangle^* \tag{1.21}$$

である。ブラ、ケット・ベクトルのラベル、a, b, c は任意であるから、

$$\begin{aligned} \langle i|\hat{O}^\dagger|j\rangle &\equiv (\hat{O}^\dagger)_{ij} \\ &= \langle j|\hat{O}|i\rangle^* \equiv O^*_{ji} \end{aligned} \tag{1.22}$$

と書けるので、演算子 $\hat{O}$ の共役演算子 (adjoint operator)$\hat{O}^\dagger$ の表現行列は $\hat{O}$ の表現行列の共役行列（adjoint matrix）であること が示された。演算子が自己共役

$$\hat{O} = \hat{O}^\dagger \tag{1.23}$$

であるとき、その演算子を エルミート演算子（Hermite operator) と呼ぶ。エルミート演算子の表現行列は

$$\langle i|\hat{O}^\dagger|j\rangle = \langle i|\hat{O}|j\rangle = \langle j|\hat{O}|i\rangle^* \tag{1.24}$$

という関係を満たす。

1.5 2つの基底の間の相互関係

直交規格完全性をもつ基底は、次のように、一般に複数組存在する。

$$\langle i|j\rangle = \delta_{ij}, \ \sum_i |i\rangle\langle i| = 1, \tag{1.25}$$

$$\langle \alpha|\beta\rangle = \delta_{\alpha\beta}, \ \sum_\alpha |\alpha\rangle\langle \alpha| = 1. \tag{1.26}$$

ケットベクトル系 $\{|\alpha\rangle\}$ から出発して

$$|\alpha\rangle = \sum_i |i\rangle\langle i|\alpha\rangle = \sum_i U_{i\alpha}|i\rangle,\ (U_{i\alpha} \equiv \langle i|\alpha\rangle). \tag{1.27}$$

という関係が得られる。同様に、基底 $\{|i\rangle\}$ から出発して

$$|i\rangle = \sum_\alpha |\alpha\rangle\langle\alpha|i\rangle = \sum_\alpha U^*_{i\alpha}|\alpha\rangle \tag{1.28}$$

という関係が得られる。一方、基底 $\{|\alpha\rangle\}$ の直交規格性より

$$\begin{aligned}\delta_{ij} &= \langle i|j\rangle = \sum_\alpha \langle i|\alpha\rangle\langle\alpha|j\rangle = \sum_\alpha U_{i\alpha}U^*_{j\alpha} \\ &= (UU^\dagger)_{ij}\end{aligned} \tag{1.29}$$

が得られる。同様に、基底 $\{|\alpha\rangle\}$ の直交規格性より

$$\delta_{\alpha\beta} = (U^\dagger U)_{\alpha\beta} \tag{1.30}$$

が得られる。すなわち、基底ベクトルは相互にユニタリ変換で関連づけられる。

1.6　2つの基底における波動関数の相互関係

2つの基底 $\{|i\rangle\}, \{|\alpha\rangle\}$ が存在するとき、任意の状態ベクトル $|\Psi\rangle$ は次のように展開できる:

$$|\Psi\rangle = \begin{cases} \sum_i |i\rangle\langle i|\Psi\rangle = \sum_n \Psi(i)|i\rangle & (\Psi \text{ の i 表示}), \\ \sum_\alpha |\alpha\rangle\langle\alpha|\Psi\rangle = \sum_\alpha \Psi(\alpha)|\alpha\rangle & (\Psi \text{ の}\alpha\text{表示}). \end{cases} \tag{1.31}$$

ここで 状態ベクトル $|\Psi\rangle$ の i, α 成分としての波動関数 の定義を用いた。

$$\Psi(i) \equiv \langle i|\Psi\rangle, \tag{1.32}$$

$$\Psi(\alpha) \equiv \langle\alpha|\Psi\rangle. \tag{1.33}$$

ここで、2つの基底で表現された波動関数の相互関係を調べる。式（1.32）に基底 $\{|\alpha\rangle\}$ の完全性を示す単位演算子をはさむと

$$\Psi(i) \equiv \langle i \sum_\alpha |\alpha\rangle\langle|\Psi\rangle = \sum_\alpha U_{i\alpha}\Psi(\alpha) \tag{1.34}$$

となり、2つの基底の間のユニタリ変換による変換されることがわかる。

1.7　ある演算子の2つの基底における表現行列の間の相互関係

演算子 $\hat{A}$ の2つの基底における表現行列の間の関係を調べる。ひとつの基底における行列要素の式の間に完全性を表す単位演算子をはさみこめば

$$\begin{aligned}A_{\alpha\beta} &= \langle\alpha|\hat{A}|\beta\rangle = \langle\alpha|\sum_i |i\rangle\langle i|\hat{A}\sum_j |j\rangle\langle j|\beta\rangle \\ &= \sum_{ij}\langle\alpha|i\rangle\langle i|\hat{A}|j\rangle\langle j|\beta\rangle = \sum_{ij} U^*_{i\alpha}A_{ij}U_{j\alpha} \\ &= (U^\dagger AU)_{\alpha\beta}\end{aligned} \tag{1.35}$$

が得られる。すなわち、2つの基底における表現行列は基底の間を結びつける同じユニタリ変換によって変換される。

ユニタリ変換が重要であるのは、ある基底 $\{|i\rangle\}$ において対角形ではないどんなエルミート演算子に対しても、常にその表現行列が対角形, つまり

$$A_{\alpha\beta} = a_\alpha \delta_{\alpha\beta} \tag{1.36}$$

であるような基底 $\{|\alpha\rangle\}$ を見つけられるということである。

1.8　非直交基底の直交化：Schmidt の方法

（追加予定！）

1.9　演算子が連続的な固有値をもつ場合

前小節において導入された、離散的スペクトル（固有値）をもつ固有関数の性質を記述する全ての関係式は、和を積分に、クロネッカーのデルタ記号をディラックのデルタ関数に置き換えれば、固有値が連続的スペクトルをとる場合にも困難なく一般化できる。

量 $\hat{f}$ を連続スペクトルをもつ物理量とする。その連続的固有値を、単に添え字のない同じ記号 f で表すことにすると, それぞれ直交規格性と完全性を表す

$$\begin{aligned} \langle f|f'\rangle &= \delta(f-f'), & (1.37) \\ 1 &= \int |f\rangle df \langle f| & (1.38) \end{aligned}$$

が成立する。積分は量 f の取り得る全ての範囲にわたって行われる。任意の状態ベクトルは固有ベクトル $|f\rangle$ により次のように展開される。

$$\begin{aligned} |\psi\rangle &= \int |f\rangle df \langle f|\psi\rangle \\ &= \int \psi(f)|f\rangle df. \ (\psi(f) \equiv \langle f|\psi\rangle) & (1.39) \end{aligned}$$

量子系がスピンやアイソスピンなど、内部自由度をもつ場合

1.10　演算子が離散的な固有値と連続的な固有値をもつ場合

ある範囲では離散スペクトルをとり、また別の範囲では連続スペクトルをとるような物理量が存在する。離散的スペクトル（固有値）をもつ固有状態の性質を記述する全ての関係式、固有値が連続的スペクトルをとる場合の関係式と同じ関係式がすべて成立する。注意すべき

ことは 離散的、連続的な両スペクトルの固有状態をあわせた基底が完全性を形成すること である。

量 $\hat{f}$ を離散的および連続スペクトルをもつ物理量とする。その離散的固有値に対する固有ベクトルを $|\phi_i\rangle$、その連続的固有値を、単に添え字のない同じ記号 f で表すことにすると, それぞれ直交規格性と完全性を表す

$$\begin{aligned}\langle\phi_i|\phi_j\rangle &= \delta_{ij}, && (1.40)\\ \langle f|f'\rangle &= \delta(f-f'), && (1.41)\\ 1 &= \sum_i |\phi_i\rangle\langle\phi_i| + \int |f\rangle df\langle f| && (1.42)\end{aligned}$$

が成立する。積分は量 f の取り得る全ての範囲にわたって行われる。任意の状態ベクトルは固有ベクトル $|\phi_i\rangle, |f\rangle$ により次のように展開される。

$$\begin{aligned}|\psi\rangle &= \sum_i |\phi_i\rangle\langle\phi_i|\psi\rangle + \int |f\rangle df\langle f|\psi\rangle\\ &= \sum_i \langle\phi_i|\psi\rangle\cdot|\phi_i\rangle + \int \psi(f)|f\rangle df.\ (\psi(f)\equiv\langle f|\psi\rangle) && (1.43)\end{aligned}$$

2 表示の具体例

2.1 座標表示と運動量表示

2.1.1 座標表示（1 次元の場合）の再考

粒子が位置座標 x に局在している量子状態を $|x\rangle$, 運動量（x 軸成分）が p である量子状態を $|p\rangle$ とすると、これらは、それぞれ座標演算子 $\hat{x}$ と座標演算子 $\hat{p}$ の固有状態であるので

$$\begin{aligned}\hat{x}|x\rangle &= x|x\rangle, && (2.1)\\ \hat{p}|p\rangle &= p|p\rangle && (2.2)\end{aligned}$$

が成立する。これらの固有状態は次の完全性を満たす。

$$\begin{aligned}1 &= \int_{-\infty}^{+\infty} |x\rangle dx\langle x|, && (2.3)\\ 1 &= \int_{-\infty}^{+\infty} |p\rangle dp\langle p|. && (2.4)\end{aligned}$$

これらの状態ベクトルの内積は

$$\langle x|p\rangle = \sqrt{\frac{1}{2\pi\hbar}}\exp(i\frac{xp}{\hbar}). \quad (2.5)$$

と表される。この関係式が正しいかどうか、次のような吟味をしてみよう。

$$\begin{aligned}\langle x|x'\rangle &= \int_{-\infty}^{+\infty}\langle x|p\rangle dp\langle p|x'\rangle = \frac{1}{2\pi\hbar}\int_{-\infty}^{+\infty}\exp(i\frac{(x'-x)p}{\hbar})dp\\ &= \frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{+\infty}\exp(i\frac{(x'-x)p}{\hbar})dp\\ &= \delta(x'-x). && (2.6)\end{aligned}$$

$$
\begin{aligned}
\langle p|p'\rangle &= \int_{-\infty}^{+\infty}\langle p|x\rangle dx\langle x|p'\rangle = \frac{1}{2\pi\hbar}\int_{-\infty}^{+\infty}\exp(i\frac{(p'-p)x}{\hbar})dx \\
&= \frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{+\infty}\exp(i\frac{(p'-p)x}{\hbar})dx \\
&= \delta(p'-p). \qquad (2.7)
\end{aligned}
$$

これらの関係式の導出の際、デルタ関数の定義（のひとつ）

$$
\delta(x) = \frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{+\infty}\exp(ikx)dk \qquad (2.8)
$$

を用いた。この関係 (2.5) と完全性を用いると、座標表示における波動関数 $\psi(x)$ と運動量表示における波動関数 $\tilde{\psi}(p) \equiv \langle p|\psi\rangle$ の関係

$$
\begin{aligned}
\psi(x) &= \langle x|\psi\rangle = \langle x|\int_{-\infty}^{+\infty}|p\rangle\langle p|\psi\rangle \\
&= \int_{-\infty}^{+\infty}\tilde{\psi}(p)\langle x|p\rangle dp \\
&= \sqrt{\frac{1}{2\pi\hbar}}\int_{-\infty}^{+\infty}\tilde{\psi}(p)\exp(i\frac{xp}{\hbar})dp \qquad (2.9)
\end{aligned}
$$

が得られる。この関係はフーリエ変換と同等の内容をもつ。座標表示における波動関数とは量子状態ベクトル $|\psi\rangle$ の ”座標軸 ”に射影した成分 $\psi(x)$、座標表示における波動関数とは量子状態ベクトル $|\psi\rangle$ の ”運動量軸 ”に射影した成分 $\tilde{\psi}(p)$ の意味である。今の記法においては <u>$\psi(x)$ と $\tilde{\psi}(p)$ とは関数形が必ずしも同じであることを意味しないこと</u> を注意する。また

$$
\begin{aligned}
\langle x|\hat{x}|\psi\rangle &= x\langle x|\psi\rangle = x\psi(x), \\
\langle x|\hat{p}|\psi\rangle &= \langle x|\hat{p}\int_{-\infty}^{+\infty}|p'\rangle dp'\langle p'|\psi\rangle = \sqrt{\frac{1}{2\pi\hbar}}\int_{-\infty}^{+\infty}dp'\exp(i\frac{xp'}{\hbar})p'\tilde{\psi}(p') \\
&= \frac{\hbar}{i}\frac{d}{dx}\psi(x) \qquad (2.10)
\end{aligned}
$$

が得られる。したがって、座標表示において、座標演算子 $\hat{x}$ と座標演算子 $\hat{p}$ は、それぞれ

$$
\begin{aligned}
\hat{x} &= x, \qquad (2.11) \\
\hat{p} &= \frac{\hbar}{i}\frac{d}{dx} \qquad (2.12)
\end{aligned}
$$

と表される。

波数を用いた運動量表示（1 次元の場合）

運動量 p と波数 k との間にはドブローイの関係 $(p = \hbar k)$ がある。運動量よりも波数を用いた方が適当な場合もあるので、波数を用いた運動量表示の関係式を記す。

$$
\hat{k}|k\rangle = k|k\rangle, \qquad (2.13)
$$

$$
\begin{aligned}
\langle k|k'\rangle &= \delta(k-k'), && (2.14)\\
\int_{-\infty}^{+\infty}|k\rangle dk\langle k| &= 1, && (2.15)\\
\langle x|k\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\exp(ikx). && (2.16)
\end{aligned}
$$

2.1.2　運動量表示（1次元の場合）

場合によっては、座標表示よりも運動量を古典的な数量（c-number）とみなす表示（＝運動量表示）が簡単で見通しのよいことがある。ここでは運動量表示で、座標演算子, 運動量演算子、ポテンシャル、シュレディンガー方程式などがどのように表示されるか考える。

$$
\begin{aligned}
\langle p|\hat{p}|\psi\rangle &= p\langle p|\psi\rangle = p\tilde{\psi}(p),\\
\langle p|\hat{x}|\psi\rangle &= \langle p|\hat{x}\int_{-\infty}^{+\infty}|x'\rangle dx'\langle x'|\psi\rangle = \sqrt{\frac{1}{2\pi\hbar}}\int_{-\infty}^{+\infty}dx'\exp(-i\frac{x'p}{\hbar})x'\psi(x')\\
&= -\frac{\hbar}{i}\frac{d}{dp}\tilde{\psi}(p). \qquad (2.17)
\end{aligned}
$$

すなわち、運動量表示において、位置座標演算子と運動量演算子はそれぞれ次のようにあらわされることになる。

$$
\begin{aligned}
\hat{x} &= -\frac{\hbar}{i}\frac{d}{dp}, && (2.18)\\
\hat{p} &= p. && (2.19)
\end{aligned}
$$

運動量表示においても、位置座標演算子と運動量演算子とは正準交換関係

$$
[\hat{x},\hat{p}] = i\hbar \qquad (2.20)
$$

を満たすことは、座標表示における証明と同様の方法で、証明される。

質量 m の粒子がポテンシャル V の下で運動する場合のシュレディンガー方程式を演算子とケットベクトルを明示的に表現する。

$$
[\frac{\hat{p}^2}{2m}+V(\hat{x})]|\psi\rangle = E|\psi\rangle \qquad (2.21)
$$

運動エネルギー演算子の運動量表示ついて

$$
\langle p|\frac{\hat{p}^2}{2m}|\psi\rangle = \frac{p^2}{2m}\langle p|\psi\rangle = \frac{p^2}{2m}\tilde{\psi}(p) \qquad (2.22)
$$

が得られる。また、ポテンシャル演算子の運動量表示については

$$
\begin{aligned}
\langle p|V(\hat{x})|\psi\rangle &= \langle p|\int_{-\infty}^{+\infty}|x\rangle dx\langle x|V(\hat{x})\int_{-\infty}^{+\infty}|x'\rangle dx'\langle x'|\psi\rangle\\
&= \int_{-\infty}^{+\infty}dx\int_{-\infty}^{+\infty}\langle p|x\rangle V(x)\delta(x-x')\langle x'|\psi\rangle\\
&= \sqrt{\frac{1}{2\pi\hbar}}\int_{-\infty}^{+\infty}\exp(-i\frac{xp}{\hbar})V(x)\psi(x)dx \qquad (2.23)
\end{aligned}
$$

が得られる。ここで, ポテンシャル演算子の運動量表示を

$$\tilde{V}(p) \equiv \sqrt{\frac{1}{2\pi\hbar}}\int_{-\infty}^{+\infty} V(x)\exp(-i\frac{px}{\hbar})dx \tag{2.24}$$

と定義する。この逆変換は

$$V(x) = \sqrt{\frac{1}{2\pi\hbar}}\int_{-\infty}^{+\infty} \tilde{V}(p)\exp(i\frac{px}{\hbar})dp \tag{2.25}$$

となる。式（2.24）を（2.23）に代入すると

$$\langle p|V(\hat{x})|\psi\rangle = \sqrt{\frac{1}{2\pi\hbar}}\int_{-\infty}^{+\infty} \tilde{V}(p-p')\tilde{\psi}(p')dp' \tag{2.26}$$

が得られる。　結局、運動量表示におけるシュレディンガー方程式は

$$\frac{p^2}{2m}\tilde{\psi}(p) + \sqrt{\frac{1}{2\pi\hbar}}\int_{-\infty}^{+\infty} \tilde{V}(p-p')\tilde{\psi}(p')dp' = E\tilde{\psi}(p) \tag{2.27}$$

と表される。

2.2　1次元における調和振動子の波動関数の運動量表示

1次元における調和振動子の波動関数の座標表示

$$E_n = (n+\frac{1}{2})\hbar\omega \tag{2.28}$$

$$\psi_n(x) = \frac{1}{\sqrt{2^n n!\sqrt{\pi b^2}}}\exp(-\frac{x^2}{2b^2})H_n(\frac{x}{b})\cdot \tag{2.29}$$

$$b \equiv \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}, \tag{2.30}$$

$$\int_{-\infty}^{\infty}\psi_n^*(x)\psi_{n'}(x)dx = \delta_{nn'}. \tag{2.31}$$

1次元における調和振動子の波動関数の運動量表示

$$\begin{aligned}\langle k|\psi_n\rangle &= \psi_n(k)\\ &= (-i)^n\sqrt{\frac{b}{2^n n!\sqrt{\pi}}}\exp(-\frac{b^2k^2}{2})\cdot H_n(kb).\end{aligned} \tag{2.32}$$

2.3　3次元における調和振動子の波動関数の運動量表示

$$\langle \boldsymbol{k}|\ell mn\rangle = (-1)^n(-i)^\ell\sqrt{\frac{2n!}{\Gamma(n+\ell+\frac{3}{2})}}b^{\frac{3}{2}}(bk)^\ell\exp(-\frac{b^2k^2}{2})L_n^{\ell+\frac{1}{2}}(b^2k^2)\cdot Y_{\ell m}(\hat{\boldsymbol{k}}), \tag{2.33}$$

$$
\begin{aligned}
\langle \ell m n|\boldsymbol{k}\rangle = & \ (-1)^n i^\ell \sqrt{\frac{2n!}{\Gamma(n+\ell+\frac{3}{2})}} b^{\frac{3}{2}} (bk)^\ell \exp(-\frac{b^2k^2}{2}) L_n^{\ell+\frac{1}{2}}(b^2k^2) \cdot Y^*_{\ell m}(\hat{\boldsymbol{k}}), \quad (2.34) \\
b \equiv & \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}} \quad (2.35)
\end{aligned}
$$

ここで、$L_n^\alpha(x)$ はラゲール多項式、$Y_{\ell m}(\hat{\boldsymbol{k}})$ は球面調和関数である。

3 時間的な変化の記述ーシュレディンガー描像とハイゼンベル描像ー

3.1 時間に依存するシュレディンガー方程式

状態ベクトルで表された、時間に依存するシュレディンガー方程式

$$
i\hbar \frac{d}{dt}|\Psi(t)\rangle = \hat{H}|\Psi(t)\rangle \quad (3.1)
$$

を考える。ここでは状態ベクトルの時間的変化を考えたので、時間微分が偏微分ではなく全微分になっていることに注意する。複素ベクトル空間におけるベクトル $|\Psi(t)\rangle$ が

参考 (波動関数で表現された, 時間に依存するシュレディンガー方程式の導出)

式（3.1）の両辺に左から、位置演算子 $\hat{x}$ の固有値 x をもつ固有状態のブラ・ベクトルとの内積をとり、右辺に連続状態についての完全性を用いると

$$
\begin{aligned}
i\hbar\langle x|\frac{d}{dt}|\Psi(t)\rangle &= \langle x|\hat{H}|\Psi(t)\rangle \\
\rightarrow i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\langle x|\Psi(t)\rangle &= \langle x|\hat{H}\int|x'\rangle dx'\langle x'|\Psi(t)\rangle \quad (3.2)
\end{aligned}
$$

となる。式（3.2）の左辺における時間に関する微分が (全) 微分から偏微分に変わったことに注意する。量子力学では位置演算子と時間は同等ではないこと、および状態ベクトルには位置について明示的な変化はないが、時間的な変化は問題にできるからである。ベクトル、行列に対するディラック表示を用いれば、波動関数 $\Psi(x,t)$ は状態ベクトル $|\Psi(t)\rangle$ の（位置座標という）x 軸への射影した成分、$\Psi(x,t) = \langle x|\Psi(t)\rangle$ である。また、ハミルトニアンは粒子の座標については局所的であるので、すなわち

$$
\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + V(x) \quad (3.3)
$$

のように表される。従って、その行列要素は

$$
\langle x|\hat{H}|x'\rangle = \delta(x-x')\hat{H}(x) \quad (3.4)
$$

と書き直せる。このことに留意すると、式 (3.2) は、通常与えられているような時間に依存するシュレディンガー方程式

$$
i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi(x,t) = \hat{H}(x)\Psi(x,t). \quad (3.5)
$$

に書き直せる。(導出終わり)。

時間に依存するシュレディンガー方程式（3.1）の一般解とその複素共役は

$$
\begin{aligned}
|\Psi(t)\rangle &= \exp(-i\hat{H}t/\hbar)|\Psi(0)\rangle, &(3.6)\\
\langle\Psi(t)| &= \langle\Psi(0)|\exp(i\hat{H}t/\hbar) &(3.7)
\end{aligned}
$$

のように、初めの時刻における状態ベクトル $|\Psi(0)\rangle$ のハミルトニアンによる時間発展として表される。この逆変換は、

$$
\begin{aligned}
|\Psi(0)\rangle &= \exp(i\hat{H}t/\hbar)|\Psi(t)\rangle, &(3.8)\\
\langle\Psi(0)| &= \langle\Psi(t)|\exp(-i\hat{H}t/\hbar) &(3.9)
\end{aligned}
$$

のように表される。

次に、演算子 $\hat{A}$ の期待値の時間変化を考える。

$$
\begin{aligned}
\frac{d}{dt}\left[\langle\Psi(t)|\hat{A}|\Psi(t)\rangle\right] &= \left[\frac{d}{dt}\langle\Psi(t)|\right]\hat{A}|\Psi(t)\rangle + \langle\Psi(t)|\frac{\partial\hat{A}}{\partial t}|\Psi(t)\rangle + \langle\Psi(t)|\hat{A}\left[\frac{d}{dt}|\Psi(t)\rangle\right]\\
&= \langle\Psi(t)|\frac{\partial}{\partial t}\hat{A}|\Psi(t)\rangle + \frac{1}{i\hbar}\langle\Psi(t)|[\hat{A},\hat{H}]|\Psi(t)\rangle \qquad (3.10)
\end{aligned}
$$

この式（3.10) の導出において、式 (3.6) と (3.7) を用いた。式 (3.10) は、関係式 (3.6) を用いると

$$
\begin{aligned}
\frac{d}{dt}\left[\langle\Psi(0)|\mathrm{e}^{i\hat{H}t/\hbar}\hat{A}\mathrm{e}^{-i\hat{H}t/\hbar}|\Psi(0)\rangle\right] &= \langle\Psi(0)|\mathrm{e}^{i\hat{H}t/\hbar}\frac{\partial}{\partial t}\hat{A}\mathrm{e}^{-i\hat{H}t/\hbar}|\Psi(0)\rangle\\
&\quad + \frac{1}{i\hbar}\langle\Psi(0)|[\mathrm{e}^{i\hat{H}t/\hbar}\hat{A}\mathrm{e}^{-i\hat{H}t/\hbar},\hat{H}]|\Psi(0)\rangle \qquad (3.11)
\end{aligned}
$$

が得られる。ここで次の演算子 (演算子 $\hat{A}$ のハイゼンベルク表示）を導入する。

$$
\hat{A}_H \equiv \mathrm{e}^{i\hat{H}t/\hbar}\hat{A}\mathrm{e}^{-i\hat{H}t/\hbar}. \qquad (3.12)
$$

もとの演算子 $\hat{A}$ が時間依存性を持たない場合でも、そのハイゼンベルク表示は時間依存性をもつ、すなわち、$\hat{A}_H = \hat{A}_H(t)$ である。式（？）に代入すると

(3.13)

参考文献

[1] 朝永振一郎「量子力学 (I),(II)」、みすず書房。（量子電磁力学の定式化に対してノーベル物理学賞受賞。）

[2] P. A. M. Dirac, Quantum Mechanics, Clarendon, 1959
ディラック著,「量子力學」、朝永振一郎　ほか　共譯、岩波書店, 1968
(イギリスの理論物理学者ディラック (Paul Adrien Maurice Dirac)。量子力学の変換論的定式化、陽電子の存在の仮説を提唱。ノーベル物理学賞受賞。)

[3] A. ザボ, N. S. オストランド著,「新しい量子化学：電子構造の理論入門」大野公男, 阪井健男, 望月祐志訳、東京大学出版会, 1987.7-1988.3（特に、第一章）