

第 III 部

閉じた有限自由度系の純粋状態の量子論

1 量子論の基本原則

ここから先は、既にみてきたヒルベルト空間の性質を利用して、量子力学を実際に展開しよう。ここで抽象的な数学の世界と具体的な物理の世界を結びつけるために、いくつかの基本原則を立てる。この基本原則は数学における公理のように、無条件で認め、それを足がかりとして議論を展開する。

定義 1.1 (射線). ある, $|\Psi\rangle \in \mathcal{H}$ に対して, 集合,

$$\{e^{i\theta}|\Psi\rangle \mid \theta \in \mathbb{R}\} \quad (1.1)$$

を $|\Psi\rangle$ の射線と呼ぶ。

この射線を用いると、量子力学の最初の基本原則は次のように表される:

基本原則 (1)

量子系の純粋状態はある複素ヒルベルト空間 \mathcal{H} の規格化された射線で表される。

この仮定において、射線という言葉のことをさら難しく考える必要はない。要するに、ある量子系の状態を考えると、 $|\Psi\rangle \in \mathcal{H}$ で状態を表せるなら (これを状態ベクトルと呼ぶ)、任意の $\theta \in \mathbb{R}$ に対して、 $e^{i\theta}|\Psi\rangle$ を代表にとってもよいということを意味している。これは測定される量を求めるときに常に $|\Psi\rangle$ (または、 $e^{i\theta}|\Psi\rangle$) の複素共役と掛け合わせるような操作を行うため、長さが 1 で平行な状態ベクトルならばなにを選んでもかまわないということを行っているに過ぎない。その場合同じ状態に対する、状態ベクトルが無数に出てしまうので、一つの状態に対してただ一つの数学的対象を対応させるために基本原則 (1) のような射線によって定義しただけなのである。

基本原則 (2)

可観測量は \mathcal{H} 上のエルミート演算子によって表される。

この仮定はエルミート演算子の固有値が全て実数になるという、第 II 部定理 2.10. により、可観測量が必ず実数になることに対応する原理である。一般に観測値に実数を与えるのが自然であるように、ある意味観測値に複素数値を与えるのも決して論理的には不自然とはいえない。が、しかし、この原理は本質的な意味において物理量が実数であることを要請している。無論二つの観測値 A, B を組み合わせて $C = A + Bi$ を新たな観測値とすることは禁止されないが、これは本質的に A と B に分解出来る。このように全ての観測値が実数で表現されるというのがこの仮定より得られる。一方この仮定の逆は一般には成立しない。任意のエルミート演算子が必ずしも可観測量になるかどうかはこの仮定からは保障されない。

基本原則 (3) (ボルの確率規則) の離散固有値版

状態 $|\Psi\rangle$ について物理量 A の誤差のない (無視できるほど小さい) 測定を行ったとき、測定値 a_Ψ は A の固有値のどれかに定まる。 a_Ψ が \hat{A} の固有値 a になる確率は、

$$P(a) = \left\| \hat{P}(a)|\Psi\rangle \right\|^2 = \langle \Psi | \hat{P}(a) | \Psi \rangle \quad (1.2)$$

となり、このとき a_Ψ は同時にほかの固有値に一致することはない。即ちこのときの測定の結果は、 $a_\Psi = a$ であり、沢山実験を繰り返したとき $a_\Psi = a$ となる確率が、 $P(a)$ である。

この条件より、

$$P(a) = \langle \Psi | \hat{P}(a) | \Psi \rangle = \langle \Psi | \sum_{l=1}^{m_a} |a, l\rangle \langle a, l| \Psi \rangle = \sum_{l=1}^{m_a} \langle \Psi | a, l\rangle \langle a, l| \Psi \rangle = \sum_{l=1}^{m_a} |\langle a, l | \Psi \rangle|^2 = \sum_{l=1}^{m_a} |\Psi(a, l)|^2$$

などが得られる。特に固有値 a が縮退していない場合は、

$$P(a) = |\langle a | \Psi \rangle|^2 = |\Psi(a)|^2$$

となり、シンプルになる。(1.2)式の左辺に現れる確率 $P(a)$ の定義は、当たり前であるが、

$$P(a) \stackrel{\text{def}}{=} \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{N \text{ 回の測定で測定値 } a_{\Psi} \text{ が } a \text{ に一致した回数}}{N} \quad (1.3)$$

である。ここで(1.2)式の右辺より、

- $P(a) \geq 0$
- $\sum_a P(a) = \sum_a \sum_{l=1}^{m_a} |\Psi(a, l)|^2 = 1$

が常に成り立つから、これは(1.2)式の右辺が確率 $P(a)$ になるとして矛盾が生じない、ということを示している。(英語では Well-defined などというらしい)

定義 1.2 (測定の平均値の定義). 物理量 A の測定を N 回行ったとき、 k 回目の実験で得た測定値を $a_{\Psi}^{(k)}$ とすると、それらの平均値は、

$$\langle A \rangle \stackrel{\text{def}}{=} \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \sum_{k=1}^N a_{\Psi}^{(k)} \quad (1.4)$$

によって定義される。これを物理量 A の期待値と呼ぶ。特によく知られているように、離散固有値の場合、

$$\begin{aligned} \langle A \rangle &= \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \sum_{k=1}^N a_{\Psi}^{(k)} \\ &= \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \sum_a a \times (N \text{ 回の測定のうち } a_{\Psi} \text{ が } a \text{ に一致した回数}) \\ &= \sum_a a \times \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{N \text{ 回の測定のうち } a_{\Psi} \text{ が } a \text{ に一致した回数}}{N} \\ &= \sum_a a P(a) \end{aligned}$$

が成り立つ。

またこのとき、

$$\langle \Psi | \hat{A} | \Psi \rangle = \langle \Psi | \sum_a a \hat{P}(a) | \Psi \rangle = \sum_a a \langle \Psi | \hat{P}(a) | \Psi \rangle = \sum_a a \left\| \hat{P}(a) | \Psi \rangle \right\|^2 = \sum_a a P(a) = \langle A \rangle$$

も成り立つ。これは大変便利な結果である。連続固有値の場合にも \sum_a を $\int da$ 、確率 $P(a)$ を確率密度 $p(a)$ に置き換えれば同様の式が成り立つが、その証明については後に述べることにする。

基本原理の(3)は、離散固有値の場合の条件で、一般に連続固有値の場合のある一点 a での確率 $P(a)$ は常に0になってしまうからこのままでは連続固有値の場合に一般化できない。そこである区間 $(a - \Delta, a + \Delta]$ の中に測定値 a_{Ψ} が入る確率によって、基本原理(3)を書き換えよう。単にこうすればよい:

基本原理(3)(ボルンの確率規則)の離散・連続固有値両対応版

状態 $|\Psi\rangle$ について物理量 A の誤差のない(無視できるほど小さい)測定を行ったとき、測定値 a_{Ψ} は A の固有値のどれかに定まる。 a_{Ψ} が \hat{A} の固有値 a の区間 $(a - \Delta, a + \Delta]$ に入る確率は、

$$P(a - \Delta, a + \Delta] = \left\| \hat{P}(a - \Delta, a + \Delta] | \Psi \rangle \right\|^2 = \langle \Psi | \hat{P}(a - \Delta, a + \Delta] | \Psi \rangle \quad (1.5)$$

となり、このとき a_{Ψ} は同時にほかの固有値に一致することはない。即ちこのときの測定の結果は、 $a_{\Psi} \in (a - \Delta, a + \Delta]$ であり、沢山実験を繰り返したとき $a_{\Psi} \in (a - \Delta, a + \Delta]$ となる確率が、 $P(a - \Delta, a + \Delta]$ である。

この定義は単に連続固有値の場合にも対応できるように一点での確率からある程度の幅のある範囲の固有値の場合の確率に変更しただけであるが、そもそも $P(a - \Delta, a + \Delta]$ 及び、 $\hat{P}(a - \Delta, a + \Delta]$ がまだ未定義であった。最初の方については”普通に”考えれば想像つくように、

$$P(a - \Delta, a + \Delta] \stackrel{\text{def}}{=} \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{N \text{ 回のうちで測定値 } a_{\Psi} \text{ が } (a - \Delta, a + \Delta] \text{ の範囲内であった回数}}{N} \quad (1.6)$$

とすればよい。この定義自体は連続の場合も離散の場合も特に問題がないことが分かるだろう。また $(a-\Delta, a+\Delta]$ などと、下限を開区間” (“とし上限を閉区間”)]”としたのも、こうすれば、 $(a, b] = (a, c] + (c, b]$ のように直和で表せて便利だからに他ならない。

さて、ここで、 $\hat{P}(a-\Delta, a+\Delta]$ をどのように定義したらよいのかを、離散固有値の場合についてみてみよう。まず、(1.3) と (1.6) を比較することにより、

$$P(a-\Delta, a+\Delta] = \sum_{a-\Delta < a' \leq a+\Delta} P(a') \quad (1.7)$$

が得られる。従って、離散固有値版の定義 (1.2) より、

$$P(a-\Delta, a+\Delta] = \sum_{a-\Delta < a' \leq a+\Delta} P(a') = \sum_{a-\Delta < a' \leq a+\Delta} \langle \Psi | \hat{P}(a) | \Psi \rangle = \left\langle \Psi \left| \sum_{a-\Delta < a' \leq a+\Delta} \hat{P}(a') \right| \Psi \right\rangle \quad (1.8)$$

が得られるが、離散・連続固有値版の定義 (1.5) より、

$$P(a-\Delta, a+\Delta] = \langle \Psi | \hat{P}(a-\Delta, a+\Delta] | \Psi \rangle$$

が成り立つべきだから、

$$\hat{P}(a-\Delta, a+\Delta] \stackrel{\text{def}}{=} \sum_{a-\Delta < a' \leq a+\Delta} \hat{P}(a') \quad (1.9)$$

とするのが自然であろう。これが離散固有値の場合の $\hat{P}(a-\Delta, a+\Delta]$ の定義である。連続固有値の場合も \sum から \int にするのが自然だから、

$$\hat{P}(a-\Delta, a+\Delta] \stackrel{\text{def}}{=} \int_{a-\Delta}^{a+\Delta} da' \hat{P}(a') \quad (1.10)$$

とすることにすればよい。これより連続固有値の場合次のような変形が成り立つことになる：

$$P(a-\Delta, a+\Delta] = \langle \Psi | \hat{P}(a-\Delta, a+\Delta] | \Psi \rangle \quad (1.11)$$

$$= \int_{a-\Delta}^{a+\Delta} da' \langle \Psi | \hat{P}(a') | \Psi \rangle \quad (1.12)$$

$$= \begin{cases} \int_{a-\Delta}^{a+\Delta} da' \left\langle \Psi \left| \sum_{l=1}^{m_a} |a', l'\rangle \langle a', l' | \right| \Psi \right\rangle & (\text{縮退が離散の場合}), \\ \int_{a-\Delta}^{a+\Delta} da' \left\langle \Psi \left| \int |a', l'\rangle \langle a', l' | dl \right| \Psi \right\rangle & (\text{縮退が連続の場合}), \end{cases} \quad (1.13)$$

$$= \int_{a-\Delta}^{a+\Delta} d\mathbf{a}' \langle \Psi | a', l' \rangle \langle a', l' | \Psi \rangle \quad (1.14)$$

$$= \int_{a-\Delta}^{a+\Delta} d\mathbf{a}' |\langle a', l' | \Psi \rangle|^2 \quad (1.15)$$

$$= \int_{a-\Delta}^{a+\Delta} d\mathbf{a}' |\Psi(\mathbf{a}')|^2 \quad (1.16)$$

ここで、(1.10) 式で $\hat{P}(a-\Delta, a+\Delta]$ を定義した場合に、(1.5) 式の、

$$\left\| \hat{P}(a-\Delta, a+\Delta] | \Psi \right\|^2 = \langle \Psi | \hat{P}(a-\Delta, a+\Delta] | \Psi \rangle \quad (1.17)$$

が成り立つことの証明が済んでいなかった。これについては、

$$\begin{aligned}
\left\| \hat{\mathcal{P}}(a - \Delta, a + \Delta) |\Psi\rangle \right\|^2 &= \langle \hat{\mathcal{P}}(a - \Delta, a + \Delta) \Psi | \hat{\mathcal{P}}(a - \Delta, a + \Delta) |\Psi\rangle \\
&= \left\langle \int_{a-\Delta}^{a+\Delta} da'' \hat{\mathcal{P}}(a'') \Psi \middle| \int_{a-\Delta}^{a+\Delta} da' \hat{\mathcal{P}}(a') \Psi \right\rangle \\
&= \int_{a-\Delta}^{a+\Delta} da' \int_{a-\Delta}^{a+\Delta} da'' \langle \hat{\mathcal{P}}(a'') \Psi | \hat{\mathcal{P}}(a') \Psi \rangle \\
&= \int_{a-\Delta}^{a+\Delta} da' \int_{a-\Delta}^{a+\Delta} da'' \langle \Psi | \hat{\mathcal{P}}^\dagger(a'') \hat{\mathcal{P}}(a') | \Psi \rangle \\
&= \int_{a-\Delta}^{a+\Delta} da' \int_{a-\Delta}^{a+\Delta} da'' \langle \Psi | \hat{\mathcal{P}}(a'') \hat{\mathcal{P}}(a') | \Psi \rangle \\
&= \int_{a-\Delta}^{a+\Delta} da' \int_{a-\Delta}^{a+\Delta} da'' \langle \Psi | \delta(a'' - a') \hat{\mathcal{P}}(a') | \Psi \rangle \\
&= \int_{a-\Delta}^{a+\Delta} da' \langle \Psi | \int_{a-\Delta}^{a+\Delta} \hat{\mathcal{P}}(a') \delta(a'' - a') da'' | \Psi \rangle \\
&= \int_{a-\Delta}^{a+\Delta} da' \langle \Psi | \hat{\mathcal{P}}(a') | \Psi \rangle \\
&= \langle \Psi | \int_{a-\Delta}^{a+\Delta} \hat{\mathcal{P}}(a') da' | \Psi \rangle \\
&= \langle \Psi | \hat{\mathcal{P}}(a - \Delta, a + \Delta) | \Psi \rangle
\end{aligned}$$

とすればよい。縮退が離散の場合も同様である。

定義 1.3. a を連続変数とするとき、確率 $P(a - \Delta, a + \Delta)$ を

$$P(a - \Delta, a + \Delta) = \int_{a-\Delta}^{a+\Delta} da' p(a') \quad (1.18)$$

で与える関数 $p(a)$ を確率密度と呼ぶ。

これは、 da が充分小さいとき、

$$P(a - da/2, a + da/2) = \int_{a-da/2}^{a+da/2} da' p(a') \simeq \left[a' p(a) \right]_{a-da/2}^{a+da/2} = p(a) da$$

が成り立つから、これは測定値が微小区間 $(a - da/2, a + da/2)$ に入る確率が区間幅 da と確率密度 $p(a)$ に比例するというを示している。また、この両辺を da で割ってやると、

$$\begin{aligned}
p(a) &= \lim_{da \rightarrow 0} \frac{P(a - da/2, a + da/2)}{da} \\
&= \lim_{da \rightarrow 0} \frac{P(-\infty, a + da/2) - P(-\infty, a - da/2)}{da} \\
&= \frac{d}{da} P(-\infty, a]
\end{aligned}$$

が成り立つから、 $p(a)$ は区間 $(-\infty, a]$ に測定値が入る確率 $P(-\infty, a]$ の微分でもある。量子論の場合に確率密度 $p(a)$ をボルンの確率規則で計算すると、

$$\begin{aligned}
p(a) &= \langle \Psi | \hat{\mathcal{P}}(a) | \Psi \rangle \\
&= \begin{cases} \sum_{l=1}^{m_a} |\langle a, l | \Psi \rangle|^2 = \sum_{l=1}^{m_a} |\Psi(a, l)|^2 & (\text{縮退が離散のとき}), \\ \int dl |\langle a, l | \Psi \rangle|^2 = \int dl |\Psi(a, l)|^2 & (\text{縮退が連続のとき}), \end{cases}
\end{aligned}$$

が得られる。特に、固有値 a が縮退していない場合、 $\hat{\mathcal{P}}(a) = \hat{\mathcal{P}}(a)$ だから、

$$p(a) = |\langle a | \Psi \rangle|^2 = |\Psi(a)|^2$$

となりシンプルになる。このように、離散固有値の場合は波動関数の絶対値の二乗和は確率を与えたが、連続固有値の場合は確率密度を与えることが分かる。

さて、連続固有値の場合の期待値を与える計算をまだ導いていなかったのでここで示そう。連続固有値の場合も、“測定の”期待値の定義は離散固有値の場合と何ら変わることなく、

$$\langle A \rangle \stackrel{\text{def}}{=} \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \sum_{k=1}^N a_{\Psi}^{(k)} \quad (1.19)$$

によって定義される。従って、

$$\begin{aligned} \langle A \rangle &= \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \sum_{k=1}^N a_{\Psi}^{(k)} \\ &= \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \lim_{da \rightarrow 0} \sum_a a \times (N \text{ 回の測定のうち } a_{\Psi} \text{ が } [a - da/2, a + da/2] \text{ に含まれた回数}) \\ &= \lim_{da \rightarrow 0} \sum_a a \times \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{N \text{ 回の測定のうち } a_{\Psi} \text{ が } [a - da/2, a + da/2] \text{ に含まれた回数}}{N} \\ &= \lim_{da \rightarrow 0} \sum_a a \times P(a - da/2, a + da/2) \\ &= \lim_{da \rightarrow 0} \sum_a a \times p(a) da \\ &= \int a p(a) da \end{aligned}$$

より、

$$\langle A \rangle = \int a p(a) da = \int a |\Psi(a)|^2 da$$

が得られる。また、離散固有値の場合と同様に、

$$\langle A \rangle = \int a p(a) da = \int a \langle \Psi | \hat{P}(a) | \Psi \rangle da = \langle \Psi | \int a \hat{P}(a) da | \Psi \rangle = \langle \Psi | \hat{A} | \Psi \rangle$$

も成り立つ。

1.1 分散とゆらぎ

物理量 A の測定の平均値を $\langle A \rangle$ とするとき、

$$\Delta A \stackrel{\text{def}}{=} A - \langle A \rangle \quad (1.20)$$

によって測定値とその平均値との差を定義する。このとき、 ΔA の平均値 $\langle \Delta A \rangle$ は、定数の平均値がそのまま同じ値になるから、

$$\langle \Delta A \rangle = \langle A - \langle A \rangle \rangle = \langle A \rangle - \langle A \rangle = 0$$

より当然0になってしまう¹。本当はこれで平均値 $\langle A \rangle$ の散らばり具合が分かれば理想的なのであるが、上記の結果よりそれは不可能である。そこでマイナスの散らばりもプラスの散らばりもどちらもプラスになるように修正すれば散らばりがあれば必ず0より大きくなり上手くいきそうである。そこで最も単純に散らばりを定義したものとして、 ΔA の二乗の平均値、

$$\langle (\Delta A)^2 \rangle = \langle (A - \langle A \rangle)^2 \rangle = \langle A^2 - 2\langle A \rangle A + \langle A \rangle^2 \rangle = \langle A^2 \rangle - \langle A \rangle^2 \quad (1.21)$$

をとれば、散らばり具合を表すことが出来る。これを A の分散と呼ぶ。分散は大変便利な量であるが、二乗しているから単位が A と異なってしまう。そこで単位をそろえたいときには分散のルートを取り、

$$\delta A \stackrel{\text{def}}{=} \sqrt{\langle (\Delta A)^2 \rangle} \quad (1.22)$$

によって散らばり具合を表す。これを標準偏差と呼ぶ。

¹このことがピンと来ない方は統計の本を読めば必ず説明が書いてあるのでご覧になってほしい。

具体的に測定値 $a_{\Psi}^{(k)}$ から、分散を求めるには、分散の定義に従い、

$$\langle(\Delta A)^2\rangle = \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \sum_{k=1}^N (a_{\Psi}^{(k)} - \langle A \rangle)^2 \quad (1.23)$$

を計算すればよい。これを量子論で理論的に予測するには、(1.18) 式と、 $P(a)$ や $p(a)$ の定義式より、

$$\langle(\Delta A)^2\rangle = \begin{cases} \sum_a (a - \langle A \rangle)^2 P(a) & \text{(離散固有値の場合),} \\ \int_a (a - \langle A \rangle)^2 p(a) da & \text{(連続固有値の場合),} \end{cases} \quad (1.24)$$

とすればよい。これから、離散・連続いずれの場合でも成り立つ、

$$\langle(\Delta A)^2\rangle = \langle(\hat{A} - \langle A \rangle)^2\rangle = \langle\Psi|(\Delta A)^2|\Psi\rangle \quad (1.25)$$

が得られる。いつも離散の場合のみ示しているのが、本質的には全く同じであるが、ここでは連続固有値の場合について証明を記そう：

$$\begin{aligned} \langle(\Delta A)^2\rangle &= \int (a - \langle A \rangle)^2 p(a) da \\ &= \int (a - \langle A \rangle)^2 \langle\Psi|\hat{P}(a)|\Psi\rangle da \\ &= \langle\Psi| \int (a - \langle A \rangle)^2 \hat{P}(a) da |\Psi\rangle \\ &= \langle\Psi|(\hat{A} - \langle A \rangle)^2|\Psi\rangle \\ &= \langle\Psi|(\Delta \hat{A})^2|\Psi\rangle \end{aligned}$$

離散固有値の場合は単に $\int da \rightarrow \sum_a$, $P(a) \rightarrow p(a)$ とすればよい。なお、

$$\begin{aligned} \langle\Psi|(\Delta \hat{A})^2|\Psi\rangle &= \langle\Psi|(\hat{A} - \langle A \rangle)^2|\Psi\rangle \\ &= \langle\Psi|\hat{A}^2 - 2\langle A \rangle\hat{A} + \langle A \rangle^2|\Psi\rangle \\ &= \langle\Psi|\hat{A}^2|\Psi\rangle - 2\langle A \rangle\langle\Psi|\hat{A}|\Psi\rangle + \langle\Psi|\langle A \rangle^2|\Psi\rangle \\ &= \langle\Psi|\hat{A}^2|\Psi\rangle - 2\langle A \rangle^2 + \langle A \rangle^2\langle\Psi|\Psi\rangle \\ &= \langle\Psi|\hat{A}^2|\Psi\rangle - \langle A \rangle^2 \\ &= \langle\Psi|\hat{A}^2|\Psi\rangle - \langle\Psi|\hat{A}|\Psi\rangle^2 \end{aligned}$$

のほうが計算は楽な場合が多いかもしれない。

定義 1.4. ある状態 $|\Psi\rangle$ における \hat{A} の値が、全くばらつかない、つまり $\langle(\Delta A)^2\rangle = \langle\Psi|(\Delta \hat{A})^2|\Psi\rangle = 0$ の場合、物理量 A が確定している状態または定まっている状態という。それ以外の場合、 A は揺らいでいる状態という。

定理 1.5. ある状態 $|\Psi\rangle$ が物理量 A が確定している状態であれば、状態 $|\Psi\rangle$ は物理量 A を表す演算子 \hat{A} の固有状態即ち、ある値 a があって、 $\hat{A}|\Psi\rangle = a|\Psi\rangle$ である。逆に、 $|\Psi\rangle$ が物理量 A を表す演算子 \hat{A} の固有状態であれば、その状態 $|\Psi\rangle$ は物理量 A がその値に確定している状態である。

証明. 状態 $|\Psi\rangle$ を物理量 A が確定している状態、即ち、 $\langle(\Delta A)^2\rangle = \langle\Psi|(\Delta \hat{A})^2|\Psi\rangle = 0$ とする。するとこのとき、

$$\langle\Psi|(\Delta \hat{A})^2|\Psi\rangle = \langle\Psi|(\hat{A} - \langle A \rangle)^2|\Psi\rangle = \langle(\hat{A} - \langle A \rangle)^\dagger \Psi|(\hat{A} - \langle A \rangle)|\Psi\rangle = \langle(\hat{A} - \langle A \rangle)\Psi|(\hat{A} - \langle A \rangle)|\Psi\rangle = 0$$

より、

$$(\hat{A} - \langle A \rangle)|\Psi\rangle = 0$$

である。従って、

$$\hat{A}|\Psi\rangle = \langle A \rangle|\Psi\rangle$$

だから状態 $|\Psi\rangle$ は、物理量 A が、 $\langle A \rangle = \langle\Psi|\hat{A}|\Psi\rangle$ に確定している状態である。逆に、 $\hat{A}|\Psi\rangle = a|\Psi\rangle$ とすれば、

$$\langle(\Delta A)^2\rangle = \langle\Psi|\hat{A}^2|\Psi\rangle - \langle\Psi|\hat{A}|\Psi\rangle^2 = a^2 - a^2 = 0$$

だから、状態 $|\Psi\rangle$ は物理量 A がその値に確定している状態である。 □

1.2 交換関係と不確定性原理

量子論においては二つの異なる物理量がともに確定しているまたは確定させることが出来るとはいえないことが良く知られている。ここではそのための条件である交換関係について述べたい。

定義 1.6. 二つの演算子 \hat{A} と \hat{B} について、全ての $|\Psi\rangle \in \mathcal{H}$ について、 $\hat{A}\hat{B}|\Psi\rangle = \hat{B}\hat{A}|\Psi\rangle$ が成り立つとき、演算子、 \hat{A} と \hat{B} は可換、または交換するといひ、そうでないとき、非可換、または交換しないという。例えば、任意の演算子 \hat{A} に対し、 $\hat{A} \cdot c\hat{1}|\Psi\rangle = c\hat{1} \cdot \hat{A}|\Psi\rangle$ だから、 $c\hat{1}$ は任意の演算子と可換である。

定義 1.7. 任意の演算子 \hat{A} と \hat{B} に対して、 $\hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}$ もまた演算子になる。これを \hat{A} と \hat{B} の交換子と呼び $[\hat{A}, \hat{B}]$ で表す。特に、 $\hat{B}\hat{A} - \hat{A}\hat{B} = -(\hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A})$ だから、 \hat{B} と \hat{A} の演算子は \hat{A} と \hat{B} の演算子と符号だけ逆にしたものである。

さて、 \hat{A} と \hat{B} の交換子が 0 のとき、明らかに $\hat{A}\hat{B} = \hat{B}\hat{A}$ が成り立つので、

$$[\hat{A}, \hat{B}] = 0 \iff \hat{A} \text{ と } \hat{B} \text{ が可換}$$

である。

\hat{A} , \hat{B} がエルミート演算子のとき、

$$[\hat{A}, \hat{B}]^\dagger = (\hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A})^\dagger = (\hat{A}\hat{B})^\dagger - (\hat{B}\hat{A})^\dagger = \hat{B}^\dagger \hat{A}^\dagger - \hat{A}^\dagger \hat{B}^\dagger = \hat{B}\hat{A} - \hat{A}\hat{B} = -[\hat{A}, \hat{B}] \quad (1.26)$$

が成り立つから、 $i\hat{C} \equiv [\hat{A}, \hat{B}]$ とおくと、 $(i\hat{C})^\dagger = -i\hat{C}$ が成り立つが、 $(i\hat{C})^\dagger = i\hat{C}^\dagger = -i\hat{C}$ だから、結局 $\hat{C}^\dagger = \hat{C}$ より、 \hat{C} はエルミート演算子になる。このとき、次の重要な定理が成り立つ:

定理 1.8. \hat{A} , \hat{B} をエルミート演算子とするとき、 $i\hat{C} \equiv [\hat{A}, \hat{B}]$ とおくと、任意の状態ベクトル $|\Psi\rangle$ に対して、

$$\langle \Psi | (\Delta\hat{A})^2 | \Psi \rangle \langle \Psi | (\Delta\hat{B})^2 | \Psi \rangle \geq \frac{\langle \Psi | \hat{C} | \Psi \rangle^2}{4} \quad (1.27)$$

が成り立つ。

この証明には次の補題を用いる:

補題 1.9. $[\Delta\hat{A}, \Delta\hat{B}] = [\hat{A}, \hat{B}]$

証明.

$$\begin{aligned} [\Delta\hat{A}, \Delta\hat{B}] &= \Delta\hat{A}\Delta\hat{B} - \Delta\hat{B}\Delta\hat{A} \\ &= (\hat{A} - \langle A \rangle)(\hat{B} - \langle B \rangle) - (\hat{B} - \langle B \rangle)(\hat{A} - \langle A \rangle) \\ &= \hat{A}\hat{B} - \langle B \rangle\hat{A} - \langle A \rangle\hat{B} + \langle A \rangle\langle B \rangle - [\hat{B}\hat{A} - \langle A \rangle\hat{B} - \langle B \rangle\hat{A} + \langle A \rangle\langle B \rangle] \\ &= \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A} \\ &= [\hat{A}, \hat{B}] \end{aligned}$$

□

定理 1.8 の証明.

$$\begin{aligned} 0 &\leq \langle (\Delta\hat{A} + i\lambda\Delta\hat{B})\Psi | (\Delta\hat{A} + i\lambda\Delta\hat{B})\Psi \rangle \\ &= \langle \Psi | (\Delta\hat{A} + i\lambda\Delta\hat{B})^\dagger (\Delta\hat{A} + i\lambda\Delta\hat{B}) | \Psi \rangle \\ &= \langle \Psi | (\Delta\hat{A}^\dagger + i\lambda\Delta\hat{B}^\dagger) (\Delta\hat{A} + i\lambda\Delta\hat{B}) | \Psi \rangle \\ &= \langle \Psi | (\Delta\hat{A} - i\lambda\Delta\hat{B}) (\Delta\hat{A} + i\lambda\Delta\hat{B}) | \Psi \rangle \\ &= \langle \Psi | (\Delta\hat{A})^2 + i\lambda\Delta\hat{A}\Delta\hat{B} - i\lambda\Delta\hat{B}\Delta\hat{A} + \lambda^2(\Delta\hat{B})^2 | \Psi \rangle \\ &= \langle \Psi | (\Delta\hat{A})^2 + i\lambda(\Delta\hat{A}\Delta\hat{B} - \Delta\hat{B}\Delta\hat{A}) + \lambda^2(\Delta\hat{B})^2 | \Psi \rangle \\ &= \langle \Psi | (\Delta\hat{A})^2 + i\lambda[\Delta\hat{A}, \Delta\hat{B}] + \lambda^2(\Delta\hat{B})^2 | \Psi \rangle \\ &= \langle \Psi | (\Delta\hat{A})^2 + i\lambda[\hat{A}, \hat{B}] + \lambda^2(\Delta\hat{B})^2 | \Psi \rangle \\ &= \langle \Psi | (\Delta\hat{A})^2 + i\lambda(i\hat{C}) + \lambda^2(\Delta\hat{B})^2 | \Psi \rangle \\ &= \langle \Psi | (\Delta\hat{A})^2 | \Psi \rangle - \lambda\langle \Psi | \hat{C} | \Psi \rangle + \lambda^2\langle \Psi | (\Delta\hat{B})^2 | \Psi \rangle \\ &= \langle \Psi | (\Delta\hat{B})^2 | \Psi \rangle \lambda^2 - \langle \Psi | \hat{C} | \Psi \rangle \lambda + \langle \Psi | (\Delta\hat{A})^2 | \Psi \rangle \end{aligned}$$

ここで、 $(\Delta\hat{B})^2$, \hat{C} , $(\Delta\hat{A})^2$ は全てエルミート演算子だから、 $\langle\Psi|(\Delta\hat{B})^2|\Psi\rangle$, $\langle\Psi|\hat{C}|\Psi\rangle$, $\langle\Psi|(\Delta\hat{A})^2|\Psi\rangle$ は全て実数である、従って最後の行を λ の二次関数とみなせば、最後の行 ≥ 0 より、判別式 $D \leq 0$ を満たすべきである。よって、

$$D = (-\langle\Psi|\hat{C}|\Psi\rangle)^2 - 4\langle\Psi|(\Delta\hat{B})^2|\Psi\rangle\lambda\langle\Psi|(\Delta\hat{A})^2|\Psi\rangle \leq 0$$

だから、

$$\langle\Psi|(\Delta\hat{B})^2|\Psi\rangle\lambda\langle\Psi|(\Delta\hat{A})^2|\Psi\rangle \geq \frac{\langle\Psi|\hat{C}|\Psi\rangle^2}{4}$$

が示された。 □

特に $\hat{C} = k\hat{1}$ の場合 (このとき $k\hat{1} = (k\hat{1})^\dagger = k\hat{1}$ より k は必ず実数になる)、つまり、恒等演算子 $\hat{1}$ の定数倍のとき、次の有名な定理が成り立つ:

系 1.10. エルミート演算子 \hat{A} , \hat{B} が $[\hat{A}, \hat{B}] = ik\hat{1}$ を満たすとき、任意の状態ベクトル $|\Psi\rangle$ に対して、

$$\langle\Psi|(\Delta\hat{A})^2|\Psi\rangle\langle\Psi|(\Delta\hat{B})^2|\Psi\rangle \geq \frac{k^2}{4} \quad (1.28)$$

が成り立つ。従って、この式のルートをとれば、

$$\delta A \delta B \geq \frac{|k|}{2} \quad (1.29)$$

が成り立つ。(これは良く知られているハイゼンベルグの不確定性原理の式そのものである)

系 1.10 の不確定性については、その古典論と異なる顕著な性質としてさんざん多くの本で説明がされている。そこでここでは多くの本ではむしろあまり説明がされない点をあえて説明してみる。この不確定性の式は統計的な散らばりについての式である。つまり多くの実験をすれば、分散の積が必ず一定値以上になるという意味であって、決して一回ないしは数回の実験による標準偏差の積が一定値以上であると主張しているわけではない。つまり、 A と B の測定値の理論値との差の大きさ、つまり分散が有限回数の実験で偶然その一定値より小さくなることは全く禁止されていないのである。これは統計の考え方が分かっている人にとっては当たり前の事実なのであるが、二つの物理量の測定値の実験結果と理論値とのずれが必ず、不確定性原理から予想される一定値以上であると思ってしまうと、思わぬ勘違いとなり、当然、少ない回数の場合、実験結果と食い違うことも出てくるであろう。分かる人には当たり前のことだからなのかもしれないが、むしろこの点については殆どの本であまり触れられていないようなので念のため注意喚起しておく。

定理 1.8 と系 1.10 の顕著な違いは、系 1.10 は右辺に状態ベクトル $|\Psi\rangle$ を含まないのに対し、定理 1.8 は含むという点である。このため系 1.10 では”任意の”状態に対して、左辺 $\geq \frac{k^2}{4}$ となっているのに対して、定理 1.8 では状態ベクトルに依存して分散の積の最小値が決まるため、仮に $\langle\Psi|\hat{C}|\Psi\rangle = 0$ を満たす状態ベクトルが存在すれば、この状態ベクトルに対しては、物理量 A も B もともに”確定している”ことになる。このように一般的には定理 1.8 が示すように 1.8, 物理量 A と B が両方確定していたり、また状態ベクトルの選び方で、物理量 A と B の分散の積の最小値が変わったりする。これは \hat{A} と \hat{B} が非可換であっても、状態ベクトルを上手く選べば物理量 A と B が両方確定させることが出来る場合があることを示している。

1.3 同時固有ベクトル

定義 1.11 (同時固有ベクトルの定義). ある、ベクトル $|\Psi\rangle \in \mathcal{H}$ があって、 \mathcal{H} 上の演算子 \hat{A} , \hat{B} に対して、 $\hat{A}|\Psi\rangle = a|\Psi\rangle$ かつ $\hat{B}|\Psi\rangle = b|\Psi\rangle$ のように \hat{A} , \hat{B} 両方の固有ベクトルになるとき、 $|\Psi\rangle$ を \hat{A} , \hat{B} の同時固有ベクトルと呼ぶ。

定理 1.12. 二つのエルミート演算子が交換するとき、 \hat{A} , \hat{B} の全ての固有値に対する固有ベクトルとして同時固有ベクトルを選ぶことが出来る。従って、それらを規格化すれば \hat{A} と \hat{B} の同時固有ベクトルだけからなる、完全正規直交系を作ることが出来る。

証明. 今までどおり、 $\{|a, l\rangle\}_{a,l}$ を \hat{A} の固有ベクトルからなる完全正規直交系とすると、

$$\hat{A}\hat{B}|a, l\rangle = \hat{B}\hat{A}|a, l\rangle = a\hat{B}|a, l\rangle \quad (1.30)$$

より, $\hat{B}|a, l\rangle$ は \hat{A} の固有値 a に属する固有ベクトルになる. 従って, $\{\hat{B}|a, l\rangle\}_l$ の張る部分空間は $\{|a, l\rangle\}_l$ の張る部分空間に含まれる. この部分空間をそれぞれ, $S\{\hat{B}|a, l\rangle\}_l$, $S\{|a, l\rangle\}_l$ と表すと, \hat{B} が \mathcal{H} 上のエルミート演算子だから, その部分空間 $S\{\hat{B}|a, l\rangle\}_l$ においても, \hat{B} はエルミート演算子になっている. 従って \hat{B} の固有ベクトル, $|b_j, k\rangle \in S\{\hat{B}|a, l\rangle\}_l$ 達からなる部分空間 $S\{\hat{B}|a, l\rangle\}_l$ の完全系 $\{|b_j, k\rangle\}_{j,k}$ が存在する. ここで $S\{\hat{B}|a, l\rangle\}_l \subseteq S\{|a, l\rangle\}_l$ より, $|b_j, k\rangle$ は $\{|a, l\rangle\}_l$ 達の線形結合で表せるから, この $|b_j, k\rangle$ は明らかに b_j と a の同時固有ベクトルになっている. そこでこの同時固有ベクトルを規格化して, $|a, b, k\rangle$ と表せば, $\{|a, b, k\rangle\}_{a,b,k}$ は同時固有ベクトルのみからなる完全正規直交形になる. \square

定理 1.13. あるエルミート演算子 $\hat{A}^{(1)}, \hat{A}^{(2)}, \hat{A}^{(3)}, \dots$ がどの二つを選んでも交換するなら, これら全ての演算子の全ての固有値に対して, 全ての演算子の同時固有ベクトルが存在する. 即ち, 全ての演算子に対する同時固有ベクトル, $|a^{(1)}, a^{(2)}, a^{(3)}, \dots, k\rangle$ が存在し, $\{|a^{(1)}, a^{(2)}, a^{(3)}, \dots, k\rangle\}_{a^{(1)}, a^{(2)}, a^{(3)}, \dots, k}$ は完全正規直交系となる (なお, k は縮退を表すラベルである).

証明. 帰納法で示す. $n=1$ のときは明らか. n のとき成立するとする. $\{|a^{(1)}, \dots, a^{(n)}, k\rangle\}$ を $\hat{A}^{(1)}, \dots, \hat{A}^{(n)}$ の同時固有ベクトルからなる完全正規直交系とする. すると, 全ての $1 \leq m \leq n$ に対して,

$$\hat{A}^m \hat{A}^{n+1} |a^{(1)}, \dots, a^{(n)}, k\rangle = \hat{A}^{n+1} \hat{A}^m |a^{(1)}, \dots, a^{(n)}, k\rangle = a^{(m)} \hat{A}^{n+1} |a^{(1)}, \dots, a^{(n)}, k\rangle$$

より, $\hat{A}^{n+1} |a^{(1)}, \dots, a^{(n)}, k\rangle$ は, $a^{(1)}, \dots, a^{(n)}$ 全ての同時固有ベクトルとなるから,

$$S\{\hat{A}^{(n+1)} |a^{(1)}, \dots, a^{(n)}, k\rangle\} \subseteq S\{|a^{(1)}, \dots, a^{(n)}, k\rangle\}$$

が成り立つ. ここで $\hat{A}^{(n+1)}$ は \mathcal{H} のエルミート演算子だから, 当然その部分空間 $S\{\hat{A}^{(n+1)} |a^{(1)}, \dots, a^{(n)}, k\rangle\}$ に制限してもエルミート演算子になっている. 従って, ある完全系 $\{|a_j^{(n+1)}, h\rangle\}$ が存在して,

$$S\{|a_j^{(n+1)}, h\rangle\} = S\{\hat{A}^{(n+1)} |a^{(1)}, \dots, a^{(n)}, k\rangle\} \subseteq S\{|a^{(1)}, \dots, a^{(n)}, k\rangle\}$$

が成り立つ. よって, $|a_j^{(n+1)}, h\rangle$ は $a^{(1)}, \dots, a^{(n)}$ の同時固有ベクトル, $|a^{(1)}, \dots, a^{(n)}, k\rangle$ の線形結合で表せるから, $|a_j^{(n+1)}, h\rangle$ を規格化すれば, $|a^{(1)}, \dots, a^{(n)}, a_j^{(n+1)}, g\rangle$ は完全正規直交系になり, かつ $\hat{A}^{(1)}, \dots, \hat{A}^{(n)}, \hat{A}^{(n+1)}$ 全ての同時固有ベクトルになっている. \square

定理 1.14. \hat{A} をエルミート演算子とするとき, \hat{A} と任意の関数 $f(\hat{A})$ は可換である.

証明.

$$\begin{aligned} [f(\hat{A}), \hat{A}] &= \left(\sum_a f(a) \hat{\mathcal{P}}(a) \right) \left(\sum_{a'} a' \hat{\mathcal{P}}(a') \right) - \left(\sum_{a'} a' \hat{\mathcal{P}}(a') \right) \left(\sum_a f(a) \hat{\mathcal{P}}(a) \right) \\ &= \sum_{a, a'} a' f(a) \left(\hat{\mathcal{P}}(a) \hat{\mathcal{P}}(a') - \hat{\mathcal{P}}(a') \hat{\mathcal{P}}(a) \right) \\ &= \sum_{a, a'} a' f(a) \left(\delta_{aa'} \hat{\mathcal{P}}(a) - \delta_{aa'} \hat{\mathcal{P}}(a') \right) \\ &= 0 \end{aligned}$$

\square

定理 1.15. \hat{A}, \hat{B} がエルミート演算子で, そのスペクトル分解を,

$$\hat{A} = \sum_a a \hat{\mathcal{P}}_A(a), \quad \hat{B} = \sum_b b \hat{\mathcal{P}}_B(b)$$

とする. このとき,

$$[\hat{A}, \hat{B}] = 0 \iff \text{全ての固有値 } a, b \text{ に対して, } [\hat{\mathcal{P}}_A(a), \hat{\mathcal{P}}_B(b)] = 0$$

が成り立つ.

証明.

$$\begin{aligned} [\hat{A}, \hat{B}] &= \left(\sum_a a \hat{\mathcal{P}}_A(a) \right) \left(\sum_b b \hat{\mathcal{P}}_B(b) \right) - \left(\sum_b b \hat{\mathcal{P}}_B(b) \right) \left(\sum_a a \hat{\mathcal{P}}_A(a) \right) \\ &= \sum_{a, b} ab \left[\hat{\mathcal{P}}_A(a), \hat{\mathcal{P}}_B(b) \right] \end{aligned}$$

より, 全ての $\hat{P}_A(a), \hat{P}_B(b)$ が可換, 即ち, $[\hat{P}_A(a), \hat{P}_B(b)] = 0$ なら, 明らかに $[\hat{A}, \hat{B}] = 0$. 逆に \hat{A}, \hat{B} が可換なら, 定理 1.12 より同時固有ベクトルからなる完全系 $\{|a, b, k\rangle\}$ が存在するので,

$$\begin{aligned}\hat{P}_A(a)\hat{P}_B(b) &= \sum_{b', k} |a, b', k\rangle\langle a, b', k| \sum_{a', k'} |a', b, k'\rangle\langle a', b, k'| \\ &= \sum_{a', b', k, k'} |a, b', k\rangle\langle a, b', k| a', b, k'\rangle\langle a', b, k'| \\ &= \sum_{a', b', k, k'} |a, b', k\rangle\delta_{aa'}\delta_{bb'}\delta_{kk'}\langle a', b, k'| \\ &= \sum_k |a, b, k\rangle\langle a, b, k|\end{aligned}$$

一方,

$$\begin{aligned}\hat{P}_B(b)\hat{P}_A(a) &= \sum_{a', k'} |a', b, k'\rangle\langle a', b, k'| \sum_{b', k} |a, b', k\rangle\langle a, b', k| \\ &= \sum_{a', b', k, k'} |a', b, k'\rangle\langle a', b, k'| a, b', k\rangle\langle a, b', k| \\ &= \sum_{a', b', k, k'} |a', b, k'\rangle\delta_{aa'}\delta_{bb'}\delta_{kk'}\langle a, b', k| \\ &= \sum_k |a, b, k\rangle\langle a, b, k|\end{aligned}$$

よってこれより, $[\hat{P}_A(a), \hat{P}_B(b)] = 0$ が示せた. □

定理 1.16. エルミート演算子 \hat{A} と \hat{B} とが可換であれば, \hat{A} と \hat{B} の任意の関数同士も可換である.

証明.

$$f(\hat{A}) = \sum_a f(a)\hat{P}_A(a), \quad g(\hat{B}) = \sum_b g(b)\hat{P}_B(b)$$

だから, 定理 1.15 より,

$$[f(\hat{A}), g(\hat{B})] = \sum_{a,b} f(a)g(b) [\hat{P}_A(a), \hat{P}_B(b)] = 0$$

となる. □

定義 1.17 (交換する物理量の完全集合). ある量子系の物理量を表す演算子, $\hat{A}_1, \hat{A}_2, \dots$, が次の条件を満たすとき, 交換する物理量の完全集合と呼ぶ.

1. 任意の j, k に対して $[\hat{A}_j, \hat{A}_k] = 0$ が成り立つ.
2. 全ての j に対して, $[\hat{A}_j, \hat{B}] = 0$ ならば $\hat{B} = f(\{\hat{A}_n\})$ のように \hat{B} は $\{A_n\}$ 達の関数で表せる.
3. どの A_j も, それ以外の A_n 達の関数としては表せない.

この定義より, 交換する物理量の完全集合とは, お互いに独立であって, かつ交換できるような物理量の演算子からなる最大の集合を意味するが, 一般に選び方は 1 通りではない.

定義 1.18 (有限自由度系と無限自由度系の定義). 交換する物理量の演算子を有限個に選べる系を有限自由度系と呼び, そうでないとき無限自由度系と呼ぶ.

有限自由度系の場合有限個の演算子からなる完全集合 $\hat{A}_1, \hat{A}_2, \dots, \hat{A}_N$ が存在するが, 定理 1.12 より, それら全てに対する同時固有ベクトルを固有値の縮退も考慮したラベル ξ をつけて $|a_1, a_2, \dots, a_N, \xi\rangle$ と表せるが, 実はこの固有値の縮退によって区別される量子状態 $|\tilde{a}_1, \tilde{a}_2, \dots, \tilde{a}_N, \xi_1\rangle$ と $|\tilde{a}_1, \tilde{a}_2, \dots, \tilde{a}_N, \xi_2\rangle$ は任意の物理量に対して全く同じ確率分布をもち, 従って物理的には区別できない状態である. 実際, 演算子 \hat{X} を,

$$\hat{X} \equiv |\tilde{a}_1, \dots, \tilde{a}_N, \xi_1\rangle\langle \tilde{a}_1, \dots, \tilde{a}_N, \xi_1| - |\tilde{a}_1, \dots, \tilde{a}_N, \xi_2\rangle\langle \tilde{a}_1, \dots, \tilde{a}_N, \xi_2| \quad (1.31)$$

と置くと、物理量 \hat{X} の期待値は、

$$\langle \tilde{a}_1, \dots, \tilde{a}_N, \xi_1 | \hat{X} | \tilde{a}_1, \dots, \tilde{a}_N, \xi_1 \rangle = \langle \tilde{a}_1, \dots, \tilde{a}_N, \xi_1 | \tilde{a}_1, \dots, \tilde{a}_N, \xi_1 \rangle \langle \tilde{a}_1, \dots, \tilde{a}_N, \xi_1 | \tilde{a}_1, \dots, \tilde{a}_N, \xi_1 \rangle = \delta(0)$$

となり、一方、

$$\langle \tilde{a}_1, \dots, \tilde{a}_N, \xi_2 | \hat{X} | \tilde{a}_1, \dots, \tilde{a}_N, \xi_2 \rangle = -\langle \tilde{a}_1, \dots, \tilde{a}_N, \xi_2 | \tilde{a}_1, \dots, \tilde{a}_N, \xi_2 \rangle \langle \tilde{a}_1, \dots, \tilde{a}_N, \xi_2 | \tilde{a}_1, \dots, \tilde{a}_N, \xi_2 \rangle = -\delta(0)$$

となるので、 \hat{X} は物理状態 $|\tilde{a}_1, \dots, \tilde{a}_N, \xi_1\rangle$ と $|\tilde{a}_1, \dots, \tilde{a}_N, \xi_2\rangle$ を簡単に峻別できる演算子となっているが、いま、 \hat{A}_j が、

$$\hat{A}_j = \int da_1 \cdots \int da_N \int d\xi a_j |a_1, \dots, a_N, \xi\rangle \langle a_1, \dots, a_N, \xi|$$

のように展開できることより、

$$\begin{aligned} & \hat{A}_j (|\tilde{a}_1, \dots, \tilde{a}_N, \xi_1\rangle \langle \tilde{a}_1, \dots, \tilde{a}_N, \xi_1| - |\tilde{a}_1, \dots, \tilde{a}_N, \xi_2\rangle \langle \tilde{a}_1, \dots, \tilde{a}_N, \xi_2|) \\ &= \int da_1 \cdots \int da_N \int d\xi a_j |a_1, \dots, a_N, \xi\rangle \langle a_1, \dots, a_N, \xi| \\ & \quad \cdot (|\tilde{a}_1, \dots, \tilde{a}_N, \xi_1\rangle \langle \tilde{a}_1, \dots, \tilde{a}_N, \xi_1| - |\tilde{a}_1, \dots, \tilde{a}_N, \xi_2\rangle \langle \tilde{a}_1, \dots, \tilde{a}_N, \xi_2|) \end{aligned}$$

となるが、この \hat{A} と括弧の中身の最初の項との積は、

$$\begin{aligned} & \int da_1 \cdots \int da_N \int d\xi a_j |a_1, \dots, a_N, \xi\rangle \langle a_1, \dots, a_N, \xi| \tilde{a}_1, \dots, \tilde{a}_N, \xi_1 \rangle \langle \tilde{a}_1, \dots, \tilde{a}_N, \xi_1| \\ &= \int da_1 \cdots \int da_N \int d\xi a_j |a_1, \dots, a_N, \xi\rangle \delta(a_1 - \tilde{a}_1) \cdots \delta(a_N - \tilde{a}_N) \delta(\xi - \xi_1) \langle \tilde{a}_1, \dots, \tilde{a}_N, \xi_1| \\ &= \tilde{a}_j |\tilde{a}_1, \dots, \tilde{a}_N, \xi_1\rangle \langle \tilde{a}_1, \dots, \tilde{a}_N, \xi_1| \end{aligned}$$

となるが、

$$\begin{aligned} & |\tilde{a}_1, \dots, \tilde{a}_N, \xi_1\rangle \langle \tilde{a}_1, \dots, \tilde{a}_N, \xi_1| \hat{A}_j \\ &= |\tilde{a}_1, \dots, \tilde{a}_N, \xi_1\rangle \langle \tilde{a}_1, \dots, \tilde{a}_N, \xi_1| \int da_1 \cdots \int da_N \int d\xi a_j |a_1, \dots, a_N, \xi\rangle \langle a_1, \dots, a_N, \xi| \\ &= \int da_1 \cdots \int da_N \int d\xi a_j |\tilde{a}_1, \dots, \tilde{a}_N, \xi_1\rangle \langle \tilde{a}_1, \dots, \tilde{a}_N, \xi_1| a_1, \dots, a_N, \xi\rangle \langle a_1, \dots, a_N, \xi| \\ &= \int da_1 \cdots \int da_N \int d\xi a_j |\tilde{a}_1, \dots, \tilde{a}_N, \xi_1\rangle \delta(\tilde{a}_1 - a_1) \cdots \delta(\tilde{a}_N - a_N) \delta(\xi_1 - \xi) \langle a_1, \dots, a_N, \xi| \\ &= \tilde{a}_j |\tilde{a}_1, \dots, \tilde{a}_N, \xi_1\rangle \langle \tilde{a}_1, \dots, \tilde{a}_N, \xi_1| \end{aligned}$$

より、 \hat{A}_j と可換である。第2項目についても全く同じ議論が出来るから、全体として演算子 \hat{X} は、任意の \hat{A}_j と可換であることが分かる。

演算子 \hat{X} は、その定義に縮退を表すラベル ξ_1 と ξ_2 を含み、式 (1.31) の形から、 a_1, \dots, a_N だけでは値が定まらないので、 $\hat{A}_1, \dots, \hat{A}_N$ だけの関数にはならないことになる。これは $\hat{A}_1, \dots, \hat{A}_N$ が、交換する物理量の完全系であるという仮定に反する。よって、異なる縮退のラベルであっても確率分布は等しくなる。

このようにヒルベルト空間の大きさをむやみに大きくすると、このような無駄なラベルが現れてしまうので、通常は $\hat{A}_1, \hat{A}_2, \dots, \hat{A}_N$ のどの同時固有ベクトルも縮退を持たないように、必要最低限の大きさのヒルベルト空間を採用する。もちろん、縮退が現れるようなヒルベルト空間を選んだからといって、理論の予測が変わるわけではない。あくまでも最も簡単で済むようにするためにそのように選ぶのである。

基本原理 (4) シュレディンガー方程式の定義

閉じた量子系の時刻 t における状態ベクトルを $|\Psi(t)\rangle$ と表すと、その時間発展は、シュレディンガー方程式と呼ばれる次の微分方程式で記述される:

$$i\hbar \frac{d}{dt} |\Psi(t)\rangle = \hat{H} |\Psi(t)\rangle \quad (1.32)$$

但し、 \hat{H} は系のエネルギーを表すエルミート演算子で、ハミルトニアンと呼ぶ。

このシュレディンガー方程式は時刻 t に関する一階の微分方程式だから、初期条件を与えれば、任意の時刻における解が一意に定まる。量子論は決定論ではないと思われがちであるが、この条件は、閉じた量子系においては、系の時間発展を表す状態ベクトル $|\Psi(t)\rangle$ の変化は決定論的であることを示している。

1.4 エネルギー固有状態

1.4.1 エネルギー固有状態の時間発展

定理 1.19. 同じ固有値 E を持つ固有状態 $|E, l\rangle$ の重ね合わせ状態を,

$$|\Psi(0)\rangle = \sum_{l=1}^m c_l |E, l\rangle$$

とする. 但し, 状態ベクトルの規格化条件より, $\sum_{l=1}^m |c_l|^2 = 1$ であるものとする. このとき, シュレディンガー方程式の解は,

$$|\Psi(t)\rangle = e^{-i\frac{E}{\hbar}t} \sum_{l=1}^m c_l |E, l\rangle \quad (1.33)$$

となる.

証明.

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{d}{dt} \langle \Psi(0) | \Psi(t) \rangle &= \left(i\hbar \frac{d}{dt} \langle \Psi(0) | \right) |\Psi(t)\rangle + \langle \Psi(0) | \left(i\hbar \frac{d}{dt} |\Psi(t)\rangle \right) \\ &= \mathbf{0}^\dagger |\Psi(t)\rangle + \langle \Psi(0) | \hat{H} |\Psi(t)\rangle \\ &= \langle \hat{H}^\dagger \Psi(0) | \Psi(t) \rangle \\ &= \langle \hat{H} \Psi(0) | \Psi(t) \rangle \\ &= \langle E \Psi(0) | \Psi(t) \rangle \\ &= \bar{E} \langle \Psi(0) | \Psi(t) \rangle \\ &= E \langle \Psi(0) | \Psi(t) \rangle \end{aligned}$$

よってこれより,

$$\left(\frac{d}{dt} - \frac{E}{i\hbar} \right) \langle \Psi(0) | \Psi(t) \rangle = 0$$

だから,

$$\langle \Psi(0) | \Psi(t) \rangle = C e^{\frac{E}{i\hbar}t}$$

であるが, 規格化条件より,

$$1 = \langle \Psi(0) | \Psi(0) \rangle = C$$

だから, 結局,

$$\langle \Psi(0) | \Psi(t) \rangle = e^{\frac{E}{i\hbar}t} = e^{\frac{E}{i\hbar}t} \langle \Psi(0) | \Psi(0) \rangle = \langle \Psi(0) | e^{\frac{E}{i\hbar}t} \Psi(0) \rangle$$

となる. これより,

$$\langle \Psi(0) | \Psi(t) - e^{\frac{E}{i\hbar}t} \Psi(0) \rangle = 0$$

が成り立つから,

$$|\Psi(t) - e^{\frac{E}{i\hbar}t} \Psi(0)\rangle = |\Psi(t)\rangle - |e^{\frac{E}{i\hbar}t} \Psi(0)\rangle = \mathbf{0}$$

即ち,

$$|\Psi(t)\rangle = |e^{\frac{E}{i\hbar}t} \Psi(0)\rangle = e^{-i\frac{E}{\hbar}t} \sum_{l=1}^m c_l |E, l\rangle$$

が得られた. □

定理 1.19 において, $|\Psi(t)\rangle$ と $|\Psi(0)\rangle$ は, 位相因子 $e^{-i\frac{E}{\hbar}t}$ しか違いはないので, 同じ量子状態である. これより一つのエネルギー固有状態にある閉じた量子系は同じ量子状態を保つことが分かる. このように同じ量子状態を保つ状態を定常状態と呼ぶ.

1.4.2 一般の状態の時間発展

定理 1.19. のようにエネルギー固有状態じゃない場合の時間発展については次の定理がある:

定理 1.20. 任意の状態ベクトル $|\Psi_k\rangle$ に対して, 初期条件が $|\Psi(0)\rangle = |\Psi_k\rangle$ であるときのシュレディンガー方程式の解を $|\Psi_k(t)\rangle$ とすると, 初期条件が, $|\Psi(0)\rangle = \sum_k c_k |\Psi_k\rangle$ のときの解は,

$$|\Psi(t)\rangle = \sum_k c_k |\Psi_k(t)\rangle$$

である.

証明.

$$i\hbar \frac{d}{dt} \left(\sum_k c_k |\Psi_k(t)\rangle \right) = \sum_k c_k i\hbar \frac{d}{dt} |\Psi_k(t)\rangle = \sum_k c_k \hat{H} |\Psi_k(t)\rangle = \hat{H} \left(\sum_k c_k |\Psi_k(t)\rangle \right)$$

従って,

$$|\Psi(t)\rangle \equiv \sum_k c_k |\Psi_k(t)\rangle$$

はシュレディンガー方程式を満たす. ここで $t=0$ を代入すると,

$$|\Psi(0)\rangle = \sum_k c_k |\Psi_k(0)\rangle = \sum_k c_k |\Psi_k\rangle$$

より初期条件も満たす. □

ハミルトニアン \hat{H} はエネルギーという物理量を表すエルミート演算子だから, その固有値 E_n に対応する固有ベクトル $|E_n, l\rangle$ 達は完全正規直交系に選べる. 従って, 任意の初期状態を表す状態ベクトル $|\Psi(0)\rangle$ は $\{|E_n, l\rangle\}_{E_n, l}$ で展開できて,

$$|\Psi(0)\rangle = \sum_{E_n} \sum_l \Psi(E_n, l) |E_n, l\rangle$$

と表せる. ここで $|E_n, l\rangle$ も $\Psi(E_n, l)$ も n と l の関数だから, 簡単のため E を省いても見間違えることはないだろう. そこで固有値以外は $E_n \rightarrow n$ と置き換えてしまおう. そうすると次のようにややすっきり表せる:

$$|\Psi(0)\rangle = \sum_n \sum_l \Psi(n, l) |n, l\rangle$$

ここで $|\Psi_{n,l}(0)\rangle \equiv |n, l\rangle$ とすれば, $\hat{H}|n, l\rangle = E_n |n, l\rangle$ が成り立つから, 定理 1.19 より,

$$|\Psi_{n,l}(t)\rangle = e^{-i\frac{E_n}{\hbar}t} |n, l\rangle \tag{1.34}$$

が成り立つ. よって定理 1.20 より,

$$|\Psi(t)\rangle = \sum_n \sum_l \Psi(n, l) e^{-i\frac{E_n}{\hbar}t} |n, l\rangle = \sum_n e^{-i\frac{E_n}{\hbar}t} \sum_l \Psi(n, l) |n, l\rangle \tag{1.35}$$

と表せることになる. このように, エネルギー固有値 E_n (これを固有エネルギーと呼ぶ) とエネルギー固有状態ベクトルが全て求まれば, 外部と干渉しない閉じた量子系の時間発展も求まることになる.

1.4.3 確率の保存

状態ベクトル $|\Psi\rangle$ の内積は,

$$\langle \Psi | \Psi \rangle = \langle \Psi | \hat{1} | \Psi \rangle = \langle \Psi | \int da \int dl |a, l\rangle \langle a, l | \Psi \rangle = \langle \Psi | \int da \hat{P}(a) | \Psi \rangle = \int da \langle \Psi | \hat{P}(a) | \Psi \rangle = \int p(a) da = 1$$

より確率の総和になるので常に 1 であるべきである. 従って基本原理 (4) によって状態ベクトルが時間発展をしても確率の総和が 1 であることが保障されるべきであろう. そこで次の定理を証明する:

定理 1.21. $\langle \Psi(t)|\Psi(t) \rangle$ の値は時間が変わっても変わらない．従ってある時点の状態ベクトル $|\Psi(t_0)\rangle$ が規格化されていれば， $\langle \Psi(t)|\Psi(t) \rangle$ の値は常に 1 である．

証明. シュレディンガー方程式，

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

の両辺の共役をとると，

$$\begin{aligned} \left(i\hbar \frac{d}{dt} |\Psi(t)\rangle \right)^\dagger &= i\hbar \frac{d}{dt} (|\Psi(t)\rangle)^\dagger = -i\hbar \frac{d}{dt} \langle \Psi(t)|, \\ (\hat{H} |\Psi\rangle)^\dagger &= (|\Psi(t)\rangle)^\dagger \hat{H}^\dagger = \langle \Psi(t)| \hat{H}, \end{aligned}$$

だから，

$$-i\hbar \frac{d}{dt} \langle \Psi(t)| = \langle \Psi(t)| \hat{H},$$

となるので，

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{d}{dt} \langle \Psi(t)|\Psi(t) \rangle &= \left(i\hbar \frac{d}{dt} \langle \Psi(t)| \right) |\Psi(t)\rangle + \langle \Psi(t)| \left(i\hbar \frac{d}{dt} |\Psi(t)\rangle \right) \\ &= -\langle \Psi(t)| \hat{H} |\Psi(t)\rangle + \langle \Psi(t)| \hat{H} |\Psi(t)\rangle \\ &= 0 \end{aligned}$$

従って， $\langle \Psi(t)|\Psi(t) \rangle$ は定数，つまり時間変化しないことがわかる． □

定理 1.22. シュレディンガー方程式 (1.32) 式によつての時刻 $t = t_0$ での状態ベクトル $|\Psi(t_0)\rangle$ の時間 t 後の状態ベクトル $|\Psi(t_0 + t)\rangle$ を与える，時間発展に関する演算子を $\hat{U}(t)$ とする．即ち，

$$\hat{U}(t) |\Psi(t_0)\rangle = |\Psi(t_0 + t)\rangle, \tag{1.36}$$

とする．このとき $\hat{U}(t)$ は，

$$\hat{U}^\dagger(t) \hat{U}(t) = \hat{1},$$

を満たす．従って，演算子 $\hat{U}(t)$ はユニタリー演算子である．

証明.

$$\hat{U}(t) |\Psi(t_0)\rangle = |\Psi(t_0 + t)\rangle,$$

より，この両辺の共役をとると，

$$\langle \Psi(t_0)| \hat{U}^\dagger(t) = \langle \Psi(t_0 + t)|$$

が得られる．従って，

$$\langle \Psi(t_0 + t)|\Psi(t_0 + t)\rangle = \langle \Psi(t_0)| \hat{U}^\dagger(t) \hat{U}(t) |\Psi(t_0)\rangle,$$

ここで定理 1.21 より状態ベクトル同士の内積は常に一定だから， $\langle \Psi(t_0)|\Psi(t_0)\rangle = \langle \Psi(t_0 + t)|\Psi(t_0 + t)\rangle$ が成り立つ．従って，

$$\langle \Psi(t_0)| \hat{U}^\dagger(t) \hat{U}(t) |\Psi(t_0)\rangle = \langle \Psi(t_0 + t)|\Psi(t_0 + t)\rangle = \langle \Psi(t_0)| \hat{1} |\Psi(t_0)\rangle$$

よつて，

$$\langle \Psi(t_0)| \hat{U}^\dagger(t) \hat{U}(t) - \hat{1} |\Psi(t_0)\rangle = 0$$

これが常に成り立つから，

$$\hat{U}^\dagger \hat{U}(t) = \hat{1}$$

即ち，時間発展はユニタリー変換になる． □

1.5 測定直後の状態 - 射影仮説

基本原理 (5) 射影仮説の離散固有値版

ある瞬間状態ベクトルが $|\Psi\rangle$ である量子系に物理量 \hat{A} の理想測定と呼ばれる測定を行ったとき、測定値が \hat{A} の固有値の一つ a であったとする。このとき測定直後の状態ベクトル $|\Psi_{\text{after}}\rangle$ は、次の式で与えられる:

$$|\Psi_{\text{after}}\rangle = \frac{1}{\|\hat{\mathcal{P}}(a)|\Psi\rangle\|} \hat{\mathcal{P}}(a)|\Psi\rangle \quad (1.37)$$

実際の測定には有限の時間がかかり、従って測定の直前と直後の間にはさまざまな状態に変化するが、理想測定と呼ばれる測定が”理論上”存在し、理想測定においては直後の状態は (1.37) で表されるということになる。シュレディンガー方程式による時間発展で確率が保存されることを既に見てきたが、この仮説においても、

$$\langle\Psi_{\text{after}}|\Psi_{\text{after}}\rangle = \left\langle \frac{1}{\|\hat{\mathcal{P}}(a)|\Psi\rangle\|} \hat{\mathcal{P}}(a)|\Psi\rangle \left| \frac{1}{\|\hat{\mathcal{P}}(a)|\Psi\rangle\|} \hat{\mathcal{P}}(a)|\Psi\rangle \right\rangle = \frac{1}{\|\hat{\mathcal{P}}(a)|\Psi\rangle\|^2} \langle\hat{\mathcal{P}}(a)|\Psi\rangle\langle\hat{\mathcal{P}}(a)|\Psi\rangle = 1 = \langle\Psi|\Psi\rangle$$

が成り立ち、測定の前後で全確率が保存することが分かる。従ってこれより、シュレディンガー方程式に従って時間発展する場合も、理想測定によって時間発展する場合もいずれの場合についても確率が保存されることが分かる。またもし元々固有値 a の固有状態だったら、この理想測定によって、状態ベクトルは変化しないから、測定の反作用はないことになる。特に、測定直後の状態は a の固有状態だから、直後にもう一度測定しても同じ測定値 a を得ることになる。逆に一般的に固有状態以外の場合においては、この理想測定によって量子系の状態はある固有値の固有状態へと変化してしまう。これを波束の収縮と呼び、これにより量子系の状態は非可逆的に変化してしまう。これは量子論の古典論と比較した場合における際立った特徴である。

定理 1.22 により、閉じた量子系の時間発展はユニタリー発展であったが、理想測定直後は波束の収束が起きてしまうため、時間方向を逆向きに解くことは出来ない。これは理想測定による時間発展がユニタリー発展でないことを意味する。このように一般に観測行為によって時間発展はユニタリーでなくなる²。

連続固有値の場合に基本原理 (5) を定義するのは意外と大変である。規格化されてなくて良ければ、

$$|\Psi_{\text{after}}\rangle = \hat{\mathcal{P}}(a)|\Psi\rangle \quad (1.38)$$

などとしてしまえばよい。これでも規格化を必要としない多くの計算が実行でき従ってそれなりに実用的である。もっとより多くの計算に対応させるためには少々工夫が必要である。実際には、

基本原理 (5) 射影仮説の連続固有値版

連続スペクトルを持つ物理量の測定における有効桁数は有限なので、測定値がぴったり一つの値になるかどうかを測っているわけではない。そこで、 \hat{A} の連続スペクトルを幅 2Δ ごとに区間に分割して、『どの区間に入るかを判定する測定が、連続スペクトルを持つ物理量に対する理想測定である』とする。すると、この測定は、何番目の有限区間に入るかの番号を測るという、離散的な量の測定に帰着するので、離散固有地番の基本原理 (5) を適用して、

$$|\Psi_{\text{after}}\rangle = \frac{1}{\|\hat{\mathcal{P}}(a-\Delta, a+\Delta)|\Psi\rangle\|} \hat{\mathcal{P}}(a-\Delta, a+\Delta)|\Psi\rangle \quad (1.39)$$

が測定後の状態であるとする。これならきちんと規格化できている。

²哲学的にみればこれはかなり興味深いことではある。観測行為を行わなければ、未来も過去も完全に決定論になってしまい、古典力学のラプラスの悪魔が再び蘇ることになる。一方、測定によって決定論は破綻するので単純にラプラスの悪魔が蘇るということは実際には起こらない。それにも関わらず、実際には測定器具というマクロな存在も全部含めれば、これは閉じた量子系ということになり、測定器具それ自体を外から”測定”しない限り、それは完全にユニタリー発展に従う決定論の世界になりそうである。こう考えると結局は全ては決定論に従うのか?とも考えられ、これは大変難しい問題である。

2 有限自由度系の正準量子化

前節で量子力学の基本原則を述べたが、前節で紹介したハミルトニアン \hat{H} の具体形などについては述べていなかった。この節では、具体的に量子力学を構成する方法として正準量子化を紹介する。この節での手続きは一般に通りではないし、完全に決定する能力もない。そもそも量子論は古典論より多くの内容を含んでいるのだから、古典論を足がかりとした正準量子化だけでは量子論を完全に決定する能力がないのは致し方ない。しかし、交換関係を利用することにより、大体は推測することが出来、大変便利なので最もよく使われる。

2.1 古典論のおさらい

正準量子化は古典解析力学から出発するので、まず古典解析力学についておさらいしよう。古典解析力学が古典力学(通常のニュートン力学)と顕著に異なるのは、質点系の運動等を記述するとき用いる座標系としてどのようなものを用いても同じ形式に書けるという、一般性にある。通常ニュートン力学で扱える座標系は基本的にはデカルト座標で、それ以外の座標系を選ぶ場合には方程式の形が変わってしまうのであるが、解析力学では基本的にこのような制限はない。系の自由度に応じた”一般的な”座標を表す変数の組 q_j ($j = 1, 2, \dots, f$) とその時間微分 \dot{q}_j が与えられていれば良い。それにもかかわらずこのようにハミルトンの原理によって構成された古典解析力学は、運動方程式を前提としたニュートン力学と完全に同値であることが知られている。ここで、明らかに f は運動の自由度を表しているのに単に自由度という。ここではこの自由度が有限の場合について考察する。なお、古典解析力学の詳細な証明等は本文に入れるにはあまりにも長く、見通しが悪くなってしまうので付録に詳細な説明等は記した。キチンと理解したい方はそちらも参照するとよいだろう。

2.1.1 ラグランジアン

古典解析力学においては、系の時間発展はラグランジアンと呼ばれる $\{q_j, \dot{q}_j\}$ の関数、

$$L = L(q_1, \dots, q_f, \dot{q}_1, \dots, \dot{q}_f) = L(\{q_j, \dot{q}_j\}) \quad (2.1)$$

によって決定され、特に、

$$S \equiv \int L(\{q_j, \dot{q}_j\}) dt \quad (2.2)$$

が極値、即ち、

$$\delta S = \delta \int L(\{q_j, \dot{q}_j\}) dt = 0 \quad (2.3)$$

を満たすような運動が実現されることが知られている。これをハミルトンの原理と呼ぶ。

さて、このようにラグランジアンを求めることは古典解析力学において大変重要なのであるが、残念ながらラグランジアンを一般的に求める方法はない。しかし、系のエネルギーが運動エネルギー T とポテンシャルエネルギー V の和で書けていて、しかも、それぞれの具体的な関数形が分かっていたら、

$$L = T - V \quad (2.4)$$

を $\{q_j, \dot{q}_j\}$ で表したものが、その系のラグランジアン $L(\{q_j, \dot{q}_j\})$ であることが知られている。

ハミルトンの原理からオイラー・ラグランジュの微分方程式と呼ばれる $\{q_j, \dot{q}_j\}$ に関する微分方程式が得られ、これより初期条件 $\{q_j(0), \dot{q}_j(0)\}$ が与えられれば、全時刻において $\{q_j, \dot{q}_j\}$ が求まる。従って、任意の物理量

$$A = A(\{q_j, \dot{q}_j\}) \quad (2.5)$$

が任意の時刻で求まることになる。

2.1.2 ハミルトン形式

以上のことを別の形式に書き換えることができ、量子力学ではこちらを重宝する。そのためにはまず、

$$p_j \stackrel{\text{def}}{=} \frac{\partial L(q_1, \dots, q_f, \dot{q}_1, \dots, \dot{q}_f)}{\partial \dot{q}_j} \quad (j = 1, \dots, f) \quad (2.6)$$

によって変数 p_j を導入する。これは特に q_j がデカルト座標で表した粒子の位置である場合粒子の運動量の q_j 成分となるため「 q_j に共役な一般化運動量」と呼ばれるが、一般には運動量にはならない。

ここで普通の系であれば、(2.6) の $j = 1, \dots, f$ の f 本の式を逆に解いて、

$$\dot{q}_j = \dot{q}_j(q_1, \dots, q_f, p_1, \dots, p_f) \quad (2.7)$$

のように、 \dot{q}_j を $q_1, \dots, q_f, p_1, \dots, p_f$ の関数として一意的に表すことが出来るから、基本変数として、 $\{q_j, \dot{q}_j\}$ の代わりに $\{q_j, p_j\}$ を選ぶことも出来る。このとき (2.7) 式を (2.5) 式に代入すれば、物理量 A は $\{q_j, \dot{q}_j\}$ の関数ではなく、 $\{q_j, p_j\}$ となる。当然式の形は前者と後者で変わるが、これを物理では、

$$A(\{q_j, \dot{q}_j\}) = A(\{q_j, p_j\}) \quad (2.8)$$

のように、同じ記号で表す。

このとき系の運動を決定する関数は L の代わりに、

$$H \stackrel{\text{def}}{=} \sum_j p_j \dot{q}_j - L \quad (2.9)$$

を用いこれをハミルトニアンと呼ぶ。(2.7) 式を (2.9) 式に代入することにより、容易にハミルトニアンは $\{q_j, p_j\}$ の関数として表せるので、ラグランジアンからオイラー・ラグランジュ方程式が得られ、それによって系の運動が求まったように、今度はハミルトニアンから、ハミルトンの運動方程式と呼ばれる $\{q_j, p_j\}$ に関する微分方程式を導くことにより、系の運動が求まることになる。なお、ハミルトニアンは実は系の全エネルギーを表しているのので、系の全エネルギーが $\{q_j, p_j\}$ の関数として表されていれば、自動的に系の運動がハミルトンの運動方程式より求まることになる。このように一般化座標と一般化運動量を基本変数として古典力学を記述した形式をハミルトン形式と呼ぶ。

2.2 有限自由度系の正準量子化

着目する物理系が古典的には一般化座標 q_j と、それに共役な一般化運動量 p_j の組 $\{q_j, p_j\}$ ($j = 1, 2, \dots, f$) を基本変数として記述できたとする。すると、この系の任意の可観測量 A は、

$$A = A(\{q_j, p_j\}), \quad (2.10)$$

によって表せる。(以後単に物理量と呼ぶ。) 特にハミルトニアン H も系全体のエネルギーという物理量として、 $\{q_j, p_j\}$ で表せるので、前節で紹介したシュレディンガー方程式に表せるハミルトニアン \hat{H} に対応するものが具体的に得られることになる。ここで、 q_j, p_j を、

$$[\hat{q}_j, \hat{p}_k] = \delta_{jk} i\hbar, \quad [\hat{q}_j, \hat{q}_k] = 0, \quad [\hat{p}_j, \hat{p}_k] = 0, \quad (2.11)$$

という条件を満たすエルミート演算子に置き換える。(この関係を正準交換関係と呼ぶ。) そして物理量を表す演算子は、 $\{q_j, p_j\}$ を $\{\hat{q}_j, \hat{p}_j\}$ で置き換えて、

$$\hat{A} = A(\{\hat{q}_j, \hat{p}_j\}), \quad (2.12)$$

とする。但し、ここでも \hat{A} がエルミート演算子になるように置き換える。この意味が分かりにくいかも知れないので例を出すと、例えば一番簡単な例として、 $f = 1$ のとき、物理量 A を、

$$A = q_1 p_1 \quad (2.13)$$

であるものとするとき、単純に、

$$\hat{A} \equiv \hat{q}_1 \hat{p}_1 \quad (2.14)$$

と置くと、

$$\hat{A}^\dagger = (\hat{q}_1 \hat{p}_1)^\dagger = \hat{p}_1^\dagger \hat{q}_1^\dagger = \hat{p}_1 \hat{q}_1 \quad (2.15)$$

より、

$$\hat{A} = \hat{q}_1 \hat{p}_1 \neq \hat{p}_1 \hat{q}_1 = \hat{A}^\dagger \quad (2.16)$$

となってしまうので、この場合、

$$A = q_1 p_1 = \frac{q_1 p_1 + p_1 q_1}{2} \quad (2.17)$$

と変形して、この式の q_1, p_1 を \hat{q}_1, \hat{p}_1 に置き換えてみると、

$$\hat{A}^\dagger = \left(\frac{\hat{q}_1 \hat{p}_1 + \hat{p}_1 \hat{q}_1}{2} \right)^\dagger = \frac{\hat{p}_1^\dagger \hat{q}_1^\dagger + \hat{q}_1^\dagger \hat{p}_1^\dagger}{2} = \frac{\hat{p}_1 \hat{q}_1 + \hat{q}_1 \hat{p}_1}{2} = \frac{\hat{q}_1 \hat{p}_1 + \hat{p}_1 \hat{q}_1}{2} = \hat{A} \quad (2.18)$$

となりめでたくエルミート演算子になっていることがわかる。つまり、物理量を対応する演算子に置き換える際にはこのような同値な式で演算子がエルミートになるように選ばなくてはならない。このようにエルミート演算子に選ぶことによって、物理量が実数値になることと、この演算子の固有ベクトル達で任意の波動関数が展開できることの両方が保証される。

ここで注意が必要である。一般にこのようなエルミート演算子になるような置き換えは一意ではないし、またその必要も無い。しかし、とにかくエルミートになるように選びさえすれば、全く同じ予言をする量子論が出来ることが知られている。

2.2.1 3次元空間を運動するポテンシャルに捕らわれた1つの粒子からなる系の場合

正準変数の組として、 q_1, q_2, q_3 を $q_1 = x, q_2 = y, q_3 = z$ と選べるが、このとき、(2.6)の関係式によって、

$$p_j \stackrel{\text{def}}{=} \frac{\partial L(q_1, q_2, q_3, \dot{q}_1, \dot{q}_2, \dot{q}_3)}{\partial \dot{q}_j} = \frac{\partial L(x, y, z, \dot{x}, \dot{y}, \dot{z})}{\partial \dot{q}_j} \quad (j = 1, 2, 3) \quad (2.19)$$

また、(2.4)式より、ポテンシャルを $V = V(x, y, z)$ とし、粒子の質量を m とすると、運動エネルギー T は、

$$T = \frac{1}{2} m (\dot{x}^2 + \dot{y}^2 + \dot{z}^2) \quad (2.20)$$

だから、

$$L = T - V = \frac{1}{2} m (\dot{x}^2 + \dot{y}^2 + \dot{z}^2) - V(x, y, z) \quad (2.21)$$

だからこれを(2.19)式に代入して $\dot{q}_1 = \dot{x}, \dot{q}_2 = \dot{y}, \dot{q}_3 = \dot{z}$ で偏微分すると、

$$p_1 = m\dot{x} = p_x, \quad p_2 = m\dot{y} = p_y, \quad p_3 = m\dot{z} = p_z \quad (2.22)$$

が得られるので、正準交換関係、

$$[\hat{x}, \hat{p}_x] = [\hat{y}, \hat{p}_y] = [\hat{z}, \hat{p}_z] = i\hbar, \quad \text{それ以外の正準変数同士の交換子は全て } 0, \quad (2.23)$$

を仮定すると、この系の任意の物理量 A が既に述べた方法で対応するエルミート演算子に置き換えられる、例えばこの系の全エネルギーを表すハミルトニアン H は、

$$H = \frac{1}{2} m (\dot{x}^2 + \dot{y}^2 + \dot{z}^2) + V(x, y, z) \quad (2.24)$$

だから、これを正準変数の組で表すと、

$$H = \frac{1}{2} m (\dot{x}^2 + \dot{y}^2 + \dot{z}^2) + V(x, y, z) \quad (2.25)$$

$$= \frac{1}{2m} [(m\dot{x})^2 + (m\dot{y})^2 + (m\dot{z})^2] + V(x, y, z) \quad (2.26)$$

$$= \frac{1}{2m} (p_x^2 + p_y^2 + p_z^2) + V(x, y, z) \quad (2.27)$$

と表される。ここで各正準変数は2乗で現れることはあっても他の変数同士と掛け合わさったりしていないので、そのまま置き換えても自動的にエルミート演算子になる。従って、この系のハミルトニアン(演算子) \hat{H} は、

$$\hat{H} = \frac{1}{2m} (\hat{p}_x^2 + \hat{p}_y^2 + \hat{p}_z^2) + V(\hat{x}, \hat{y}, \hat{z}) \quad (2.28)$$

で表されることになる。

2.3 有限自由度系のシュレディンガー表現

ここでは全ての粒子が別の種類の粒子である場合についてのみ扱う。その理由は、同種の粒子は量子論においては全く区別がつかないのに、これまで見てきたように古典論では、正準変数の座標変数は一つ一つの粒子ごとに異なる座標の値を与えるため、従って、このままでは同じ粒子が複数個ある場合、扱えないからである。

正準量子化すると、全ての物理量は $\{\hat{q}_j, \hat{p}_j\}$ の関数だから、ヒルベルト空間を構成するための基底としては、 $\{\hat{q}_j, \hat{p}_j\}$ から選べば充分である。この中から互いに交換する完全集合を選ぶには、正準交換関係 (2.11) を考慮すれば、1つの j に対して、 \hat{q}_j か \hat{p}_j のいずれか一方のみを選んでゆけば交換する物理量の完全集合になることが分かる。例えば $f=2$ のときには、 \hat{q}_1, \hat{q}_2 または、 \hat{p}_1, \hat{q}_2 または、 \hat{q}_1, \hat{p}_2 または、 \hat{p}_1, \hat{p}_2 の4通りから選ぶことが出来る。その同時固有ベクトルは (以後、交換する物理量の完全集合として $\{\hat{q}_j\}$ を選ぶが、それ以外でも全く同じことである。),

$$\hat{q}_j |q_1, \dots, q_f\rangle = q_j |q_1, \dots, q_f\rangle, \quad (2.29)$$

を満たす。規格化条件は、連続固有値の場合、

$$\langle q_1, \dots, q_f | \tilde{q}_1, \dots, \tilde{q}_f \rangle = \delta(q_1 - \tilde{q}_1) \cdots \delta(q_f - \tilde{q}_f) \quad (2.30)$$

とるのが普通であるが、このやり方だとヒルベルト空間の元にならないということは既に説明した。この量子系を記述するヒルベルト空間は、無限個の同時固有ベクトル $|q_1, \dots, q_f\rangle$ 達の線形結合で表されるから、

$$\mathcal{H} = \left\{ |\psi\rangle \left| |\psi\rangle = \int \cdots \int dq_1 \cdots dq_f \psi(q_1, \dots, q_f) |q_1, \dots, q_f\rangle, \quad \int \cdots \int dq_1 \cdots dq_f |\psi(q_1, \dots, q_f)|^2 = \text{有限} \right\} \quad (2.31)$$

に選ぶことが出来る。これは無限個の基底を含むので明らかに無限次元のヒルベルト空間である。また、 $\psi(q_1, \dots, q_f)$ の絶対値の2乗の全空間での積分が有限というのは、 $\langle \psi | \psi \rangle$ が $\langle \psi | \psi \rangle = \|\psi\|^2 \geq 0$ なる有限の値を持つという条件そのものである。

ここで、明らかに、

$$|\psi\rangle \longleftrightarrow \psi(q_1, \dots, q_f) \quad (2.32)$$

が1対1対応するので、その意味でこの2つは同一視できる。この $\psi(q_1, \dots, q_f)$ を座標表示の (シュレディンガーの) 波動関数と呼ぶ。

また、

$$\begin{aligned} \langle \psi | \tilde{\psi} \rangle &= \int \cdots \int dq_1 \cdots dq_f \psi^*(q_1, \dots, q_f) \langle q_1, \dots, q_f | \int \cdots \int d\tilde{q}_1 \cdots d\tilde{q}_f \psi(\tilde{q}_1, \dots, \tilde{q}_f) |\tilde{q}_1, \dots, \tilde{q}_f\rangle \\ &= \int \cdots \int dq_1 \cdots dq_f \int \cdots \int d\tilde{q}_1 \cdots d\tilde{q}_f \psi^*(q_1, \dots, q_f) \psi(\tilde{q}_1, \dots, \tilde{q}_f) \langle q_1, \dots, q_f | \tilde{q}_1, \dots, \tilde{q}_f \rangle \\ &= \int \cdots \int dq_1 \cdots dq_f \int \cdots \int d\tilde{q}_1 \cdots d\tilde{q}_f \psi^*(q_1, \dots, q_f) \psi(\tilde{q}_1, \dots, \tilde{q}_f) \delta(q_1 - \tilde{q}_1) \cdots \delta(q_f - \tilde{q}_f) \\ &= \int \cdots \int dq_1 \cdots dq_f \psi^*(q_1, \dots, q_f) \psi(q_1, \dots, q_f) \end{aligned}$$

のような対応関係も成り立つ。

ここで時間発展を物理量ではなく状態ベクトルに担わせる「シュレディンガー描像」で考える場合、状態ベクトルは時々刻々と変化するから時間の関数になる。そこで、

$$|\psi(t)\rangle = \int \cdots \int dq_1 \cdots dq_f \psi(q_1, \dots, q_f, t) |q_1, \dots, q_f\rangle \quad (2.33)$$

となることより、時刻 t の座標表示のシュレディンガーの波動関数を $\psi(q_1, \dots, q_f, t)$ と表すことが出来る。なお、各時刻において確率が保存することより、各 t において波動関数は2乗可積分な関数となっている。

また、次のことが簡単に示せる:

$$\hat{q}_j |\psi\rangle = \int \cdots \int dq_1 \cdots dq_f \psi(q_1, \dots, q_f) \hat{q}_j |q_1, \dots, q_f\rangle = \int \cdots \int dq_1 \cdots dq_f \psi(q_1, \dots, q_f) q_j |q_1, \dots, q_f\rangle \quad (2.34)$$

より、

$$\hat{q}_j |\psi\rangle \longleftrightarrow q_j \psi(q_1, \dots, q_f) \quad (2.35)$$

が成り立つから、 \hat{q}_j の作用は、座標表示すると、単に波動関数に変数 q_j を掛けただけということになる。

一方、 \hat{p}_j は (基底ベクトルを $|q_1, \dots, q_f\rangle$ に選んだ場合)、そう簡単ではない。例えば、いま、 q_j がデカルト座標である場合には、

$$\hat{p}_j|\psi\rangle \longleftrightarrow \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial q_j} \psi(q_1, \dots, q_f) \quad (2.36)$$

と選ぶことが出来る。これを示すには、正準交換関係を確認すればよい:

いま、演算子 \hat{q}_j, \hat{p}_k が

$$[\hat{q}_j, \hat{p}_k] = i\hbar\delta_{jk} \quad (2.37)$$

を満たすとは、両辺が演算子なのだから、任意の状態ベクトル $|\psi\rangle$ に対して、

$$[\hat{q}_j, \hat{p}_k] |\psi\rangle = i\hbar\delta_{jk} |\psi\rangle \quad (2.38)$$

となることに他ならないから、

$$[\hat{q}_j, \hat{p}_k] |\psi\rangle \longleftrightarrow \left[q_j \left(\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial q_k} \right) - \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial q_k} q_j \right] \psi(q_1, \dots, q_f) \quad (2.39)$$

かつ、

$$i\hbar\delta_{jk} |\psi\rangle \longleftrightarrow i\hbar\delta_{jk} \psi(q_1, \dots, q_f) \quad (2.40)$$

なので、

$$\left[q_j \left(\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial q_k} \right) - \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial q_k} q_j \right] \psi(q_1, \dots, q_f) = i\hbar\delta_{jk} \psi(q_1, \dots, q_f) \quad (2.41)$$

が成り立たなくてはならないが、左辺を計算すると、

$$\left[q_j \left(\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial q_k} \right) - \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial q_k} q_j \right] \psi = q_j \cdot \frac{\hbar}{i} \frac{\partial \psi}{\partial q_k} - \frac{\hbar}{i} \cdot \delta_{jk} \psi - q_j \cdot \frac{\hbar}{i} \frac{\partial \psi}{\partial q_k} = -\frac{\hbar}{i} \delta_{jk} \cdot \psi = i\hbar\delta_{jk} \psi \quad (2.42)$$

より明らかに成り立つ。また、

$$[\hat{p}_j, \hat{p}_k] = 0 \quad (2.43)$$

についても、演算子部分だけを取り出して書くと

$$\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial q_j} \left(\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial q_k} \right) - \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial q_k} \left(\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial q_j} \right) = 0 \quad (2.44)$$

となり、偏微分の入れ替えが自由に出来ることより明らかに 0 演算子になる。以上により、 \hat{q}_j がデカルト座標のとき、

$$\hat{p}_j|\psi\rangle \longleftrightarrow \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial q_j} \psi(q_1, \dots, q_f) \quad (2.45)$$

が示せた。

2.4 シュレディンガー表現による計算方法

ひとたびシュレディンガー表現を採用することにしたら結局次のようにして計算すればよいことが分かる。

$$\mathcal{H} = \{ 2 \text{乗可積分な関数 } \psi(q_1, \dots, q_f, t) \in \mathbf{C} \text{ の全体 } \}, \quad (2.46)$$

$$\langle \psi | \tilde{\psi} \rangle = \int \cdots \int dq_1 \cdots dq_f \overline{\psi(q_1, \dots, q_f, t)} \tilde{\psi}(q_1, \dots, q_f, t), \quad (2.47)$$

$$\text{波動関数} = \psi(q_1, \dots, q_f, t), \quad (2.48)$$

$$\hat{q}_j = q_j, \quad \hat{p}_j = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial q_j}, \quad (2.49)$$

$$\text{物理量 } \hat{A} = A \left(q_1, \dots, q_f, \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial q_1}, \dots, \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial q_f} \right), \quad (2.50)$$

これより、 \hat{A} の期待値は、

$$\langle \psi | \psi \rangle = \int \cdots \int dq_1 \cdots dq_f \overline{\psi(q_1, \dots, q_f)} A \left(q_1, \dots, q_f, \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial q_1}, \dots, \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial q_f} \right) \psi(q_1, \dots, q_f), \quad (2.51)$$

となる。またシュレディンガー方程式のシュレディンガー表記がどうなるかという、まず、

$$i\hbar \frac{d}{dt} |\psi\rangle = \hat{H} |\psi\rangle \quad (2.52)$$

が成り立つから、

$$i\hbar \frac{d}{dt} |\psi\rangle = i\hbar \frac{d}{dt} \int \cdots \int dq_1 \cdots dq_f \psi(q_1, \dots, q_f, t) |q_1, \dots, q_f\rangle \quad (2.53)$$

$$= \int \cdots \int dq_1 \cdots dq_f i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(q_1, \dots, q_f, t) |q_1, \dots, q_f\rangle \quad (2.54)$$

より

$$i\hbar \frac{d}{dt} |\psi\rangle \longleftrightarrow i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(q_1, \dots, q_f, t) \quad (2.55)$$

が対応する。従って、

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(q_1, \dots, q_f, t) = H \left(q_1, \dots, q_f, \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial q_1}, \dots, \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial q_f} \right) \psi(q_1, \dots, q_f, t) \quad (2.56)$$

となる。特に3次元空間を運動する1粒子からなる系の場合、ハミルトニアンが、(147)式、

$$\hat{H} = \frac{1}{2m} (\hat{p}_x^2 + \hat{p}_y^2 + \hat{p}_z^2) + V(\hat{x}, \hat{y}, \hat{z}) \quad (2.57)$$

で与えられることより、

$$\hat{H} = \frac{1}{2m} (\hat{p}_x^2 + \hat{p}_y^2 + \hat{p}_z^2) + V(\hat{x}, \hat{y}, \hat{z}) \quad (2.58)$$

$$= \frac{1}{2m} \left[\left(\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} \right)^2 + \left(\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial y} \right)^2 + \left(\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial z} \right)^2 + V(x, y, z) \right] \quad (2.59)$$

$$= -\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} + V(x, y, z) \right) \quad (2.60)$$

$$= -\frac{\hbar^2}{2m} (\nabla^2 + V(x, y, z)) \quad (2.61)$$

となるから、

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(q_1, \dots, q_f, t) = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi(q_1, \dots, q_f, t) + V(x, y, z) \psi(q_1, \dots, q_f, t) \quad (2.62)$$

と表されることになる。

このようにして得られたシュレディンガー表現のシュレディンガー方程式は、時刻 t に関する1階の偏微分方程式となっているから、初期条件 $\psi(q_1, \dots, q_f, 0)$ が与えられれば、解 $\psi(q_1, \dots, q_f, t)$ は一意に定まる。このようにシュレディンガー表現を用いると微積分の知識で計算が実行できるため有限自由度の量子論では広く用いられている。

2.5 行列表示

2.3, 2.4 節でシュレディンガー表現について説明したが、シュレディンガー表現は微積分で演算するところから分かるとおり、無限次元のヒルベルト空間を持つ量子系に適した方法であり、有限次元の場合には適さない。また、微積分のような連続な処理が必要な計算は計算機で計算させるのにも適さない。この点、今回説明する行列表示の計算方法はまさに有限次元の場合や計算機で処理させる場合にも力を発揮する。なお行列表現であっても、無限次元の行列を考えれば、無限次元のヒルベルト空間を持つ量子系にも対応できなくはない。

2.5.1 行列表示の仕組み

離散的な固有値のみからなる同時固有ベクトル $|a_1, a_2, \dots\rangle$ 達が張るヒルベルト空間 \mathcal{H} を持つ量子系に対して、固有値 a_j のとる値の数は高々可算個だし、固有値のラベル j の数も高々可算個だから、全体として高々可算個の同時固有ベクトルしか存在しない。従って、それらを順番に並べることが出来るのでそのようにして並べた同時固有ベクトルを $|n\rangle$ と表すことにすると、 $\{|n\rangle\}$ は完全正規直交系だから、任意のベクトル $|\Psi\rangle$ を、

$$|\Psi\rangle = \sum_n \Psi(n)|n\rangle, \quad (2.63)$$

のように展開できる。また任意の演算子 \hat{A} も次のように $\{|n\rangle\}$ で展開できる:

$$\hat{A} = \sum_{n,m} |n\rangle\langle n|\hat{A}|m\rangle\langle m| = \sum_{n,m} |n\rangle A_{nm}\langle m|, \quad (2.64)$$

但し、

$$A_{nm} = \langle n|\hat{A}|m\rangle \quad (2.65)$$

従って、式 (2.63) と (2.64) を組み合わせると、

$$\hat{A}|\Psi\rangle = \sum_{n,m} |n\rangle A_{nm}\langle m| \left(\sum_l \Psi(l)|l\rangle \right) \quad (2.66)$$

$$= \sum_{n,m} |n\rangle A_{nm} \sum_l \Psi(l)\langle m|l\rangle \quad (2.67)$$

$$= \sum_{n,m} |n\rangle A_{nm} \sum_l \Psi(l)\delta_{ml} \quad (2.68)$$

$$= \sum_{n,m} |n\rangle A_{nm}\Psi(m) \quad (2.69)$$

と表されるので、

$$|\Psi\rangle \longleftrightarrow (\Psi(n)), \quad (2.70)$$

$$\hat{A} \longleftrightarrow (A_{nm}), \quad (2.71)$$

$$\hat{A}|\Psi\rangle \longleftrightarrow (A_{nm})(\Psi(m)) \quad (2.72)$$

という対応関係があることが分かる。但し、 $(\Psi(n))$ は n 行の縦ベクトル、 (A_{nm}) は、 n 行 m 列の行列を表すものとする。このように行列の掛け算が演算子の作用に対応するから、例えば恒等演算子 $\hat{1}$ であれば、単位行列 (δ_{nm}) が対応することが分かる:

$$\hat{1} \longleftrightarrow (\delta_{nm}) \quad (2.73)$$

また、(2.72) 式を 2 回使用すれば、

$$\hat{B}\hat{A} \longleftrightarrow (B_{nm})(A_{ml}) \quad (2.74)$$

のように演算子の掛け算が当該演算子に対応する行列同士の掛け算に対応することも分かる。さらには、

$$\langle\Psi| = \sum_n \overline{\Psi(n)}\langle n|, \quad (2.75)$$

より,

$$\langle \Psi | \tilde{\Psi} \rangle = \sum_n \overline{\Psi(n)} \tilde{\Psi}(n) = {}^t \overline{(\Psi(n))} (\tilde{\Psi}(n)) \quad (2.76)$$

が成り立つから全ての主要な演算は全て行列演算に持ち込める. これを行列表示と呼ぶ. この行列表示のやり方は明らかに \mathbb{C}^N 或いは \mathbb{C}^∞ をヒルベルト空間としてとったものとなっており, 量子論の出来る唯一の予言, つまり確率分布の予測が他の (一般には) 不便なヒルベルト空間を選んだ場合と全く一緒になる. 従って実質上, 有限次元であれば, 行列表示した状態で計算を実行するのが, 実用上も理論上も最もすっきりするだろう.