ブラとケットの話

テキスト p.109 の (3.26) 式で，$\langle u_n^\circ | u_m^\circ \rangle$ などの奇妙な記号がでてくる．この $|\quad\rangle$ の部分をブラ，$\langle\quad|$ をケットとよぶ (2 つ合わせてブラケット，つまり括弧の意味)．両方ともベクトルを表し，合わせたものは内積を意味するのだが，あまりきちんと書いてある教科書はないので，以下簡単に説明する．

ある物理量 F に対応する演算子 $\hat{F}$ の固有関数を ϕ_1, $\phi_2, \ldots$ とし，これらの関数群 (以下，$\{\phi_n\}$ で表す) について，完全規格直交条件が成立しているとする．すなわち，

$$\int \phi_m^* \phi_n dq = \delta_{mn} \quad \text{(規格直交性)} \tag{1}$$

であり，また，任意の波動関数 ψ が，$\phi_n (n = 1, 2, ...)$ の次のような線形結合で書けるとする．

$$\psi = \sum_{k=1} c_k \phi_k \quad \text{(完全性)} \tag{2}$$

ここで，δ_{mn} はクロネッカーのデルタとよばれ，$m = n$ のときのみ 1 でそれ以外は 0 である．また c_k は各関数に対する係数 (一般には複素数) である．

このとき，係数 c_k だけからなるベクトル

$$|\psi\rangle = \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \\ \vdots \end{pmatrix} \tag{3}$$

を考え，これをブラ・ベクトルとよぶ．このブラ・ベクトル単独では，固有関数系 $\{\phi_n\}$ で表した波動関数 ψ そのものだと考えてよい．

さて，$|\psi|^2 = \psi^* \psi$ が粒子の存在確率であり (* は複素共役を表す)，1 粒子の場合，全空間にわたって積分した $I = \int |\psi|^2 dq$ が 1 にならなければならない．この積分を関数系 $\{\phi_n\}$ で表すとどうなるであろう．(2) 式をそのまま代入すると，

$$I = \int \left(\sum_{k'=0} c_{k'}^* \phi_{k'}^* \right) \left(\sum_{k=0} c_k \phi_k \right) dq \tag{4}$$

となり，たくさんの項がでてくるが，(1) 式より，$k' \neq k$ の項は 0 になるので，結局

$$I = c_1^* c_1 + c_2^* c_2 + \ldots \tag{5}$$

となる．ただし，c_k^* は c_k の複素共役 (複素数 c_k の i を $-i$ でおきかえたもの) である．

ここで，行列の積を思い出すと，(5) 式は

$$I = \begin{pmatrix} c_1^* & c_2^* & \ldots \end{pmatrix} \times \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \\ \vdots \end{pmatrix} \tag{6}$$

と同じであることが分かる．この左側のベクトルをケット・ベクトルといい $\langle\psi|$ で表す．すなわち，

$$\langle\psi| = \begin{pmatrix} c_1^* & c_2^* & \ldots \end{pmatrix} \tag{7}$$

である．係数がブラ・ベクトルの要素の複素共役になっていることに注意しよう．このケット・ベクトルも単独では ψ^* そのものだと考えてよい．線形代数の言葉を使えば，ブラ・ベクトルの複素共役をとって転置行列にしたものがケット・ベクトルということになる．この，複素共役をとって転置行列にすることを随伴をとるとか，エルミート共役とよび，記号 $\dagger$ で表す．すなわち，

$$|\psi\rangle^\dagger = \langle\psi| \tag{8}$$

また，(6) 式をベクトル同士の内積と考え，それが積分 I に等しいとする．これを次のように定義する．

$$I = \int \psi^* \psi dq = \langle\psi|\psi\rangle \tag{9}$$

任意の 2 つの波動関数 f, g についても同様に考え，ブラ $|f\rangle$ とケット $\langle g$ の内積を g^* と f の積の積分，すなわち，

$$\int g^* f dq = \langle g|f\rangle \tag{10}$$

と定義する．式 (10) は，単に f と g^* の積を積分したものを別記号で表したものと考えてもいいし，それぞれ関数系 $\{\phi_n\}$ で展開してそのベクトルの内積だと考えてもよい．また，この定義式から次式

$$\langle f|g\rangle^* = \langle g|f\rangle \tag{11}$$

が成り立つこともわかるであろう．

またこれを使うと (1) や (2) 式に示した $\{\phi_n\}$ の完全規格直交条件は

$$\langle\phi_m|\phi_n\rangle = \delta_{mn}, \quad |\psi\rangle = \sum_{k=1} c_k |\phi_k\rangle \tag{12}$$

と書ける．成分で書けば，$|\phi_n\rangle$ は，n 行目のみが 1 でそれ以外は 0 のベクトルになる．

さらに，ある演算子 $\hat{H}$ に対して，ブラとケットではさんだものを

$$\int g^* \hat{H} f dq = \langle g|\hat{H}|f\rangle \tag{13}$$

と定義する．意味ありげな書き方であるが，今のところ，こう定義するものだと考えればよい．何故このように書くかは別のところで説明する．

ここまで，関数系 $\{\phi_n\}$ を例に，その係数を使ったベクトルで表してきたが，$\{\phi_n\}$ は任意であり，当然のことながら違う関数系をとれば係数は異なる．したがって，$|\psi\rangle$ や $\langle\psi|$ は決まった係数をもつベクトルではないことに注意しよう．