ヒルベルト空間

ここでは量子状態の空間について、最小限の数学的な準備をする

量子ゼミ第３回　細谷暁夫

ヒルベルト空間の定義

Diracの記法

ある空間の元$|0>,|1>$に対して、その線型結合

$$\alpha|0> + \beta|1> , \alpha, \beta \in \mathscr{C}$$

も元であるときに、そのような空間を線形空間と呼ぶ。
　ユークリッド幾何学における、ベクトル全体が例になっている。

さらに、その線形空間に次の性質を持つ内積が導入されているときに、ヒルベルト空間と呼ぶ。
　ヒルベルト空間$\mathscr{H}$に対して、その双対空間$\mathscr{H}^*$を考え、
それぞれの元の一つを$|x> \in \mathscr{H}$、$<x| \in \mathscr{H}^*$と書こう。

・

内積

それらの間の内積を $< y|x >$ と表す。

その内積が

(1)線形性

$$<y|(\alpha|x> + \beta|x'>) = \alpha < y|x > + \beta < y|x' >$$

(2)共役

$$< y|x >^* = < x|y >$$

(3)正値性

$$< x|x > \geq 0$$

を満たす。

内積が導入された線形空間$\mathscr{H}$をヒルベルト空間と呼ぶ。

重要な例

シュレーディンガー方程式

$$[-\frac{\hbar^2}{2m}\triangle + V(x)]\psi(x) = E\psi(x)$$

の解$\psi(x)$は、内積

$$<\psi|\psi'> = \int dx\psi(x)^*\psi'(x)$$

に対してヒルベルト空間をなす。

ヒルベルト空間にはたらく演算子

演算子を一般にAと書こう。
はたらき方は

$|\psi> \to |\psi'> = A|\psi>$

Aの共役演算子$A^\dagger$を

$<\psi| \to <\psi'|$

$<\psi|A^\dagger = <\psi'|$

と定義する。

演算子 Aとそのエルミート共役 $A^\dagger$が等しいときに、Aを自己共役演算子

と呼ぶ。共役演算子の固有値 aは実数である。

証明

$A|a> = a|a>$　従って　$<a|A = <a|A^\dagger = <a|a*$

$<a|A|a> = a<a|a> = a*<a|a>$ だから

$a = a*$

物理量の値が実数であると信じると、自己共役演算子が物理量に当たるとみてよいだろう。

以下、自己共役演算子を測定可能量（observable）と呼ぶ。

測定可能量すなわち自己共役演算子の固有状態全体は
完全正規直交基底をなす

$$A|a> = a|a> \qquad a \in \mathscr{R}$$

$$<a|b> = \delta_{ab}$$

$$\sum_a |a><a| = 1$$

量子状態$|\psi>$と波動関数$\psi(x)$の関係

量子状態を抽象的に$|\psi>$とする。

粒子の位置座標演算子$\hat{x}$の固有値xに属する固有状態を

$|x>$としよう。

$$\hat{x}|x> = x|x>$$

波動関数$\psi(x)$を内積

$$\psi(x) := <x|\psi>$$

と定義する。

$$< \psi | \psi' > = \int dx \psi(x)^* \psi'(x)$$

の右辺を書き直して

$$\int dx \psi(x)^* \psi'(x) = \int dx < \psi | x > < x | \psi' >$$

$$= < \psi (\int dx | x > < x |) \psi' >$$

において、完全性 $\int | x > dx < x | = 1$

を用いると、右辺は $< \psi | \psi' >$ となることが確認できる。

完全正規直交基底

ヒルベルト空間$\mathscr{H}$に $<a|b> = \delta_{ab}$ のような正規直交基底$\{|a>\}$を選ぶことができる。

（ケイスバイケースで証明を要するが）

多くの場合、それは完全でもある;

$$\sum_a |a><a| = 1$$

言い換えると任意の状態$|\psi> \in \mathscr{H}$は正規直交基底$\{|a>\}$で展開できる。

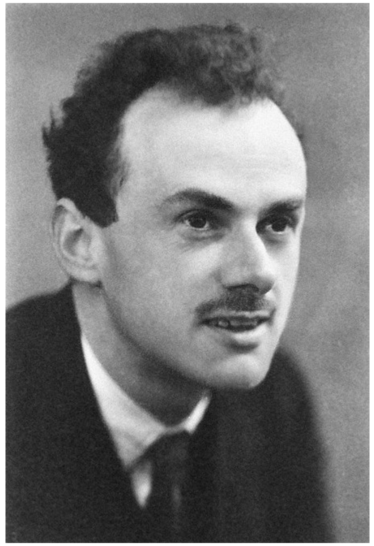
$$|\psi> = \sum_a |a><a|\psi> == \sum_a <a|\psi>|a> \ = \sum_a C_a|a>.$$

ここに、係数C_aは内積 $C_a = <a|\psi>$ で与えられる。

Dirac の記法は便利

読み方

- $<a|$ をブラ a
- $|b>$ をケット b と呼ぶ
- $<a|b>$ をブラケット a bと呼ぶ

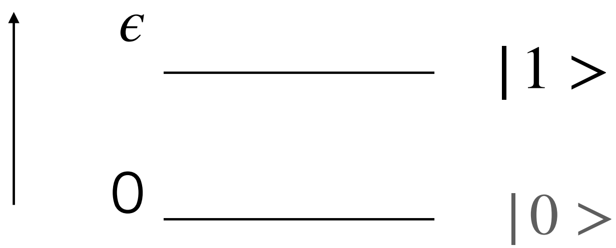


- Paul Adrien Maurice Dirac
- 1902-1984

線形表現

これまで、量子状態$|\psi >$を抽象的に扱ってきたが、具体的に列ベクトルで表すと計算がしやすいことがある。そのときには、演算子は行列となる。
それらをひっくるめて、線形表現と呼ぶ。

例を挙げよう。２準位系の基底状態を$|0 >$、励起状態を$|1 >$とし、それぞれのエネルギーを0とϵとしよう。
これを線形表現すると、



演算子は行列になる

正規直行基底

$$|0> \to \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \qquad |1> \to \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

完全性

$$|0><0) + |1><1| = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$$

ハミルトニアン

$$H = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & \epsilon \end{pmatrix}$$

$$H|0> = 0|0> = 0$$
$$H|1> = \epsilon|1>$$

エルミート行列

$$A_{mn} := < m | A | n >$$

$$< n | A^{\dagger} | m > = < m | (A | n >) * = A_{mn} *$$

したがって

$$(A^{\dagger})_{nm} = < n | A^{\dagger} | m > = A_{mn} *$$

$A^{\dagger}$を行列表示したものは

Aのそれを転置して複素共役とったものである

$$A = \begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix}$$

$$A^\dagger = \begin{pmatrix} a^* & c^* \\ b^* & d^* \end{pmatrix}$$

箱に閉じ込められた一次元自由粒子の例

完全正規直交基底

$$\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{a}}\, \sin\, k_n x \qquad 0 \leq x \leq a \qquad k_n := \frac{n\pi}{a} \qquad n = 1,2,\ldots$$

正規直交性

$$< n\,|\,m > = \int dx\ \psi_n(x)\psi_m(x) = \delta_{n,m}$$

完全性

$$\sum_{n=1}^{\infty} \psi_n(y)\psi_n(x)^* = \delta(x - y)$$

Dirac のデルタ関数