

量子力学の仮定

量子力学を作るための数学の準備です。量子力学の有名な実験結果 (2重スリットとか) と、その一般的な解釈については知っているとしています。

「シュレーディンガー方程式とハイゼンベルク方程式」で続きの話をしています。

- ・ブラケット
- ・直交、完全
- ・線形演算子
- ・交換関係、反交換関係
- ・c数、q数
- ・固有値、固有状態
- ・エルミート演算子
- ・確率
- ・ユニタリー演算子
- ・波動関数

力学は運動の法則を仮定することで作られているように、量子力学もいくつかの仮定によって作られています。細かいことや解釈に触れると厄介なので飛ばして、簡単に言えば

- (i) 状態はヒルベルト空間の単位ベクトルに対応させる
- (ii) 観測可能量はヒルベルト空間のエルミート演算子に対応させる
- (iii) 観測可能量が観測される確率は状態の内積から求まる
- (iv) 状態の時間発展にはハミルトニアンによるユニタリー演算子を使う

というものです ((iii) は準備が必要なので、かなり雑です)。ただし、力学の運動の法則のような教科書的な言い回しがないので、仮定の仕方は人によって異なります。また、これらの仮定から数学は作れますが具体的な計算はできなく、量子条件を加える必要があります。量子条件はここでは省いて、「シュレーディンガー方程式とハイゼンベルク方程式」で触れます。

いくつかの単語の説明を先にしておきます。

ここで言うヒルベルト空間は、有限次元、もしくは無限次元の可分な複素ヒルベルト空間です。単純に言えば、無限個の和であろうと重ね合わせの原理が保証されている複素ベクトル空間です。実用上で困らない言い方をすれば、ヒルベルト空間を使うのは、フーリエ級数展開 (フーリエ変換) と線形代数が使えるからです。

状態 (state) は抽象化された単語で曖昧な部分もありますが、例えば力学での粒子の運動と同じ意味です。なので、力学で言えば、ある時刻での状態は位置と運動量 (速度) によって指定できます。これは運動の第二法則 (運動方程式) によるものです。というわけで、状態は扱う対象の知りたい何かしらの情報を持っているもので、量子力学はそれをヒルベルト空間の単位ベクトルとします。

観測可能量 (observable, オブザーバブル) は量子力学において測定可能な量のことで、ここでは観測量と言ってしまいます。一般的に物理量 (エネルギーや運動量など) と呼ばれるものが観測量です。わざわざ新しく単語を作っているのは、実験での測定値との区別のためです。

仮定 (i),(ii) は使う数学のことを言っているなので、それから見ていきます。

・ブラケット

ヒルベルト空間は複素ベクトル空間なので、ベクトル空間と同じ話 (線形代数) が使えます。しかし、量子力学ではベクトルの表記に独特なものを使います。それは、ディラックによって導入されたブラケット (bracket) と呼ばれるものです。ブラ (bra, ブラベクトル) は

$$\langle \phi |$$

ケット (ket, ケットベクトル) は

$$|\phi\rangle$$

と表記され、合わせてブラケットです。単にベクトルに対してこのような記号を使っているだけだと思えばいいです。ブラケットのことをベクトルと呼んでいきます。

ちなみに、数学ではブラケット表記を使う理由がないので、ほとんど使われていないです。また、ブラケットの数学との対応は「ヒルベルト空間」をご覧ください。

ベクトルなので和とスカラー倍を定義できて、 α, β をスカラー (複素数) として

$$(\alpha + \beta)|\phi\rangle = \alpha|\phi\rangle + \beta|\phi\rangle, \alpha(|\phi\rangle + |\psi\rangle) = \alpha|\phi\rangle + \alpha|\psi\rangle$$

と表記されます (ブラでも同様)。また、 $\alpha|\phi\rangle = |\phi\rangle\alpha$ のようにスカラーとは交換できます。ゼロベクトルに対応するものを $|0\rangle$ と表記すれば

$$|\phi\rangle + |0\rangle = |\phi\rangle$$

と書けます。太字で $|0\rangle$ としているのは、 $|0\rangle$ を基底状態や真空と定義することが多いからです (物理では真空のノルムは 1 と定義され、ゼロベクトルではない)。ただし、量子力学ではゼロベクトルは対象に入らないので、ゼロベクトルのことは無視していいです。他にも表記として

$$|\alpha\phi\rangle = \alpha|\phi\rangle, |\phi\rangle + |\psi\rangle = |\phi + \psi\rangle$$

というものもありますが、紛らわしくなるのであまり使わない方がいいです。

気を付ける点は、ブラとケットは別のベクトル空間で定義されているために

$$\langle\phi| + |\psi\rangle$$

このようなブラとケットの和は定義されていません。

内積はブラとケットを合わせて

$$\langle\phi|\psi\rangle$$

と書かれます。これは分配法則

$$\langle\phi|(|\psi_1\rangle + |\psi_2\rangle) = \langle\phi|\psi_1\rangle + \langle\phi|\psi_2\rangle, (\langle\psi_1| + \langle\psi_2|)|\phi\rangle = \langle\psi_1|\phi\rangle + \langle\psi_2|\phi\rangle$$

に従います。注意ですが、数学では内積を $\langle\phi, \psi\rangle$ と表記することがありますが、ここでの内積の定義とは異なったものです。物理の量子力学の本だけならこの違いを気にする必要はありませんが、数学よりの本を読むときは注意する必要があります。

複素ベクトル空間なので内積を実数とする必要がなく、複素数になってもいいです。このため複素共役「 $*$ 」によって

$$\langle\phi|\psi\rangle = \langle\psi|\phi\rangle^*$$

という関係を持たせます ($\langle\psi|\phi\rangle^* = \langle\phi|\psi\rangle$)。これは内積を定義するための条件の 1 つである対称性のことです。

複素数 α によって $|\alpha\phi\rangle$ という表記を使ったとき、ブラとケットどちらに α がいるかで複素共役の取り方が変わります。

$$\langle \phi | \alpha \psi \rangle = \alpha \langle \phi | \psi \rangle, \quad \langle \alpha \phi | \psi \rangle = \alpha^* \langle \phi | \psi \rangle$$

実際に

$$\langle \alpha \phi | \psi \rangle = (\langle \psi | \alpha \phi \rangle)^* = (\alpha \langle \psi | \phi \rangle)^* = \alpha^* \langle \psi | \phi \rangle^* = \alpha^* \langle \phi | \psi \rangle$$

なので、成立しています。また、内積を取るときの言い方の問題でしかないですが、ベクトルの内積を取るときの言い方に合わせて、 $|\phi\rangle$ と $\alpha|\psi\rangle$ の内積を取るといったとき、 $|\phi\rangle$ がブラで $\alpha|\psi\rangle$ がケットなら $\alpha\langle\phi|\psi\rangle$ となって、 $\alpha_1|\psi_1\rangle + \alpha_2|\psi_2\rangle$ とでは

$$\langle \phi | (\alpha_1|\psi_1\rangle + \alpha_2|\psi_2\rangle) = \alpha_1\langle\phi|\psi_1\rangle + \alpha_2\langle\phi|\psi_2\rangle$$

逆に、 $|\phi\rangle$ と $\alpha|\psi\rangle$ の内積を取るといったとき、 $\alpha|\phi\rangle$ をブラにして $|\psi\rangle$ をケットとする内積は $\alpha^*\langle\phi|\psi\rangle$ となり、 $\alpha_1|\phi_1\rangle + \alpha_2|\phi_2\rangle$ となら

$$(\alpha_1^*\langle\phi_1| + \alpha_2^*\langle\phi_2|)|\psi\rangle = \alpha_1^*\langle\phi_1|\psi\rangle + \alpha_2^*\langle\phi_2|\psi\rangle$$

このように複素数がブラとケットのどちらをスカラー倍しているかで複素共役の取り方が変わります。

同じベクトル同士の内積は 0 以上というのは通常通りで

$$\langle \phi | \phi \rangle \geq 0$$

0 になるのはゼロベクトルに対応する $|0\rangle$ のときです。量子力学で見えることはほぼないですが、0 以上を外して定義する場合もあります (例えば場の量子論でのゲージ場の話で出てくる)。

ノルム (norm) は、これの正の平方根

$$\sqrt{\langle \phi | \phi \rangle}$$

として定義します (ユークリッド空間でのノルムの定義の仕方と同じ)。単位ベクトルならノルムは 1 です。 $\langle \phi | \phi \rangle$ を自乗ノルムと言ったりもします。ノルムの記号を

$$||\phi|| = \sqrt{\langle \phi | \phi \rangle}$$

と表記します。注意ですが、絶対値と同じ $||$ を使うので、複素数 $\langle \psi | \phi \rangle$ の絶対値

$$|\langle \psi | \phi \rangle| = \sqrt{\langle \psi | \phi \rangle^* \langle \psi | \phi \rangle} = \sqrt{\langle \phi | \psi \rangle \langle \psi | \phi \rangle}$$

との区別に気をつけてください。 $||\phi||$ はベクトルのノルム、 $|\langle \psi | \phi \rangle|$ は複素数の絶対値です。

ブラとケットはベクトルで、ベクトルは行列表記ができます。なので、行列と対応させられます (線形演算子の項参照)。 N 次元ベクトルと同じように、ブラは $1 \times N$ 行列、ケットは $N \times 1$ 行列とみなします。例えば、3 次元なら、ケットを

$$|\phi\rangle \Rightarrow \begin{pmatrix} a \\ b \\ c \end{pmatrix}$$

とします。細かいことですが、等号でなく「 \Rightarrow 」にしているのは、ベクトルの成分が基底の選択で変わるのと同じ理由からです (デカルト座標 (x, y, z) と極座標 (r, θ, ϕ) で成分が変わるのと同じ)。

行列の計算規則に合わせるなら、 1×3 行列と 3×1 行列の積にするので、ブラを

$$\langle\phi| \Rightarrow (a^* \ b^* \ c^*)$$

とすることで、ブラとケットによる内積は

$$\langle\phi|\phi\rangle \Rightarrow (a^* \ b^* \ c^*) \begin{pmatrix} a \\ b \\ c \end{pmatrix} = a^*a + b^*b + c^*c$$

となります。そして、転置と複素共役を同時に行う記号「 \dagger 」(ダガー)を定義すれば

$$|\phi\rangle^\dagger = \langle\phi| \Rightarrow (a^* \ b^* \ c^*)$$

「 \dagger 」はエルミート共役の記号で、行列では転置して複素共役を取れという意味です。なので、転置を考慮したときのブラとケットの間は

$$|\phi\rangle^\dagger = \langle\phi|$$

となります。「 \dagger 」は転置の意味が必要ないなら複素共役に置き換わります。特に内積はただの複素数なので、複素共役の意味しか持っていません。ただし、複素共役であっても「 \dagger 」を使っている場合もあります。

このようにして量子力学ではヒルベルト空間のベクトルをブラケットで表記し、ノルムが1のブラケットを状態 (state) に対応させます。状態を状態ベクトルとも呼びます。状態の集まりに対してその各状態を、状態 A, B, C, \dots とすると、ブラケットはその状態に対応して、ケットなら $|A\rangle, |B\rangle, |C\rangle$ 、ブラなら $\langle A|, \langle B|, \langle C|$ というように使われます。このことから、状態を表すベクトル空間と言えるので、状態空間と呼ぶこともあります。

• 直交、完全

線形代数の話を使います。無限次元としますが、有限次元とっていいです。2つのベクトルが直交しているかは内積によって定義されていたように、ある状態 $|\phi_n\rangle$ ($n = 1, 2, \dots$) の直交性を

$$\langle\phi_m|\phi_n\rangle = \delta_{mn}$$

と定義します。 m, n はベクトルの区別するための整数です (ベクトルを v_1, v_2 と区別するのと同じ)。 δ_{mn} はクロネッカーデルタです。 $m = n$ のときノルムが1になることから、これは正規直交関係や規格直交関係と呼ばれ、単位ベクトルが直交している関係です。ノルムが1のとき正規化されているや規格化されていると言います。また、正規直交関係を満たす $|\phi_1\rangle, |\phi_2\rangle, \dots$ のことを正規直交系と言います (直交してるので線形独立)。

任意のベクトルのノルムを1にする規格化は (任意のベクトルから単位ベクトルを作ること)、今の場合は

$$|\phi'\rangle = \frac{|\phi\rangle}{\sqrt{\langle\phi|\phi\rangle}}$$

とすることで、常に可能です (実際にこれのノルムをとれば1) なので、状態は単位ベクトルと仮定されているために、規格化が出来ないゼロベクトルは状態になれません。

ここでは m, n のように離散的に区別できる場合を使っていますが、例えば位置 x は連続的なので

$$\langle x'|x\rangle = \delta(x' - x)$$

として、ディラックのデルタ関数が使われます (連続的な位置でなくても同様)。細かい注意になりますが、連続的な値 x による $|x\rangle$ は数学的に厄介です。例えばすぐに分かるように、 $\langle x|x\rangle = \delta(x - x) = \delta(0) = \infty$ のために、数学的な取り扱いが難しくなっています。しかし、よっぽど数学の領域に踏み込まない限り、気を回す必要性がないので、連続的な場合はデルタ関数となってしまうと思っていれば平気です。

正規直交系を構成する $|\phi_n\rangle$ ($n = 1, 2, \dots$) を使い、任意の $|\psi\rangle$ を

$$|\psi\rangle = \sum_{n=1}^{\infty} a_n |\phi_n\rangle, \quad a_n = \langle\phi_n|\psi\rangle$$

このように展開できることを完全性と言い、完全性を持った正規直交系 $|\phi_n\rangle$ を完全正規直交系と言います。これは正規直交系を基底とした線形結合と同じ形ですが、無限個の和になっているために完全性という新しい言葉を使っています。

無限個でなく N 個で展開できるなら、ただの N 個の基底ベクトルを使った線形結合として定義されます。しかし、無限個だと無限和になるために和が収束するのかわからない問題が出てきます。これに対して、完全性によって無限和が収束するとしています。完全正規直交系を定義できることがヒルベルト空間を使う理由になっていて、仮定 (ii) に関連しています。これはエルミート演算子の項で触れます。

$a_n = \langle\phi_n|\psi\rangle$ は、展開において $\langle\phi_m|$ を左からかけると

$$\langle\phi_m|\psi\rangle = \sum_{n=1}^{\infty} a_n \langle\phi_m|\phi_n\rangle = \sum_{n=1}^{\infty} a_n \delta_{mn} = a_m$$

となるからです。また、完全性は $\langle\phi_n|\psi\rangle$ を右にもっていくと

$$|\psi\rangle = \sum_{n=1}^{\infty} |\phi_n\rangle \langle\phi_n|\psi\rangle$$

となるので

$$\sum_{n=1}^{\infty} |\phi_n\rangle \langle\phi_n| = 1$$

もしくは

$$\langle\phi|\psi\rangle = \sum_{n=1}^{\infty} \langle\phi|\phi_n\rangle \langle\phi_n|\psi\rangle, \quad \langle\psi|\psi\rangle = \sum_{n=1}^{\infty} \langle\psi|\phi_n\rangle \langle\phi_n|\psi\rangle = \sum_{n=1}^{\infty} |\langle\phi_n|\psi\rangle|^2$$

という形で書けます ($|\phi\rangle$ は任意です)。これらの関係も完全性と呼ばれ、右側のはパーセヴァル (Parseval) の等式と呼ばれます。

- 線形演算子

量子力学で出てくる線形演算子 (linear operator, 線形変換、線形作用素) はブラケットか関数に作用して、別のブラケットか関数にするものです。これによって量子力学での観測の性質を表現します。

線形演算子をハットをつけて \hat{T} とすれば、ケット $|\psi\rangle$ と関数 ψ へは

$$\hat{T}|\psi\rangle = |\phi\rangle, \quad \hat{T}\psi = \phi$$

として、別のケット $|\phi\rangle$ と関数 ϕ にします。線形とついているのは

$$\hat{T}(\alpha_1|\psi_1\rangle + \alpha_2|\psi_2\rangle) = \alpha_1\hat{T}|\psi_1\rangle + \alpha_2\hat{T}|\psi_2\rangle$$

$$\hat{T}(\alpha_1\psi_1 + \alpha_2\psi_2) = \alpha_1\hat{T}\psi_1 + \alpha_2\hat{T}\psi_2$$

として、線形性を持たせているからです (α_1, α_2 はスカラー)。線形演算子はベクトルに作用するものなので、スカラーとは交換します ($\hat{T}\alpha|\phi\rangle = \alpha\hat{T}|\phi\rangle$)。線形でない演算子を使うことはないので、演算子と言っていきます。

$|\psi\rangle$ に対して

$$\hat{T}|\psi\rangle = a|\phi\rangle$$

もしくは

$$\hat{T}|\psi\rangle = |\phi'\rangle$$

としたとき、ある状態 $|\psi\rangle$ に T という観測をすることで測定値 a を得て状態 $|\psi\rangle$ は状態 $|\phi\rangle$ へ変化、もしくはある状態 $|\psi\rangle$ に T という観測をすることで別の状態 $|\phi'\rangle$ になることを意味します。ブラに対しても

$$\langle\psi'|\hat{S} = \langle\phi'|b$$

となり、演算子はブラとケットの両方に作用することができます。

表記上問題になるのは、 $\langle\phi|\hat{T}|\psi\rangle$ のようにブラとケットで挟まれているときです。ここでは

$$\langle\phi|\hat{T}|\psi\rangle = (\langle\phi|\hat{T})|\psi\rangle = \langle\phi|(\hat{T}|\psi\rangle)$$

として、積の結合法則を定義します。これに対して、演算子がどちらに作用しているかをはっきりさせるために、 $\langle\phi|\hat{T}\psi\rangle$ や $\langle\hat{T}\phi|\psi\rangle$ のようにブラケットの中に演算子を入れる表記も使われます。しかし、この書き方は分かりやすいように見えて混乱を起こしやすいので、使わない方がいいです。

演算子は常に交換するとは限らなく、一般的には

$$\hat{T}\hat{S}|\phi\rangle \neq \hat{S}\hat{T}|\phi\rangle$$

となります。このため演算子の交換関係が必要になります。そして、等号でないことから、 T, S の観測順序を替えたら同じ結果が得られないことを表しています。

演算子を具体的に行列にするとはっきりします。 $N \times N$ 行列 M とベクトル $v(N \times 1$ 行列) の積は

$$Mv = w \quad \left(\sum_{j=1}^N M_{ij} v_j = w_i \right)$$

となっているので、行列 M は v から w へ変化させる演算子です。具体的には、例えば

$$\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$$

なので、これをブラケットに対応させれば

$$\hat{T} \Leftrightarrow \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad |\psi\rangle \Leftrightarrow \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}, \quad |\phi\rangle \Leftrightarrow \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$$

というわけで、演算子とブラケットを行列のように思っていると計算規則が受け入れやすいです。例えば、行列は一般的には交換しないので交換関係が自然と入ってきます。

演算子の具体例として行列としましたが、線形代数で出てくるように、演算子は行列で書くことが出来ます。これをブラケット表記で行います。 $\hat{T}|v\rangle = |w\rangle$ とします。 $|v\rangle, |w\rangle$ を完全正規直交系 $|\phi_n\rangle$ で展開して

$$|v\rangle = \sum_{n=1}^{\infty} v_n |\phi_n\rangle, \quad |w\rangle = \sum_{n=1}^{\infty} w_n |\phi_n\rangle$$

v_n, w_n は

$$v_n = \langle \phi_n | v \rangle, \quad w_n = \langle \phi_n | w \rangle$$

そうすると、 $\hat{T}|v\rangle$ は

$$\hat{T}|v\rangle = \hat{T} \left(\sum_{n=1}^{\infty} v_n |\phi_n\rangle \right)$$

線形性から和を外に出せて

$$\hat{T}|v\rangle = \sum_{n=1}^{\infty} v_n \hat{T}|\phi_n\rangle$$

$\hat{T}|\phi_n\rangle = |\psi_n\rangle$ として、 $|\psi_n\rangle$ を $|\phi_m\rangle$ で展開すれば

$$\hat{T}|\phi_n\rangle = |\psi_n\rangle = \sum_{m=1}^{\infty} a_{mn} |\phi_m\rangle$$

c_{mn} は m, n で指定される係数です。これを入れなおして

$$|w\rangle = \hat{T}|v\rangle = \sum_{n=1}^{\infty} v_n \hat{T}|\phi_n\rangle = \sum_{n=1}^{\infty} a_{mn} v_n |\phi_m\rangle$$

$|w\rangle$ の展開と比べれば

$$w_m = \sum_{n=1}^{\infty} a_{mn} v_n$$

これは行列とベクトルの積です。そして、 a_{mn} は

$$\begin{aligned} \hat{T}|\phi_n\rangle &= \sum_{m=1}^{\infty} a_{mn} |\phi_m\rangle \\ \langle\phi_j|\hat{T}|\phi_n\rangle &= \sum_{m=1}^{\infty} a_{mn} \langle\phi_j|\phi_m\rangle \\ &= \sum_{m=1}^{\infty} a_{mn} \delta_{jm} \\ &= a_{jn} \end{aligned}$$

なので、

$$\begin{aligned} w_m &= \sum_{n=1}^{\infty} a_{mn} v_n \\ \langle\phi_m|w\rangle &= \sum_{n=1}^{\infty} \langle\phi_m|\hat{T}|\phi_n\rangle \langle\phi_n|v\rangle \end{aligned}$$

となっています。つまり、 $|\phi_n\rangle$ を基底とし、 a_{mn} を成分とする行列が演算子 \hat{T} に対応する行列 (表現行列) です。 w_m が $|w\rangle$ に対応するベクトル成分、 v_n が $|v\rangle$ に対応するベクトル成分です。例えば、 $N \times 1$ 行列なら

$$|v\rangle = \begin{pmatrix} \langle\phi_1|v\rangle \\ \langle\phi_2|v\rangle \\ \vdots \\ \langle\phi_N|v\rangle \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} v_1 \\ v_2 \\ \vdots \\ v_N \end{pmatrix}$$

となり、ケットでは

$$\langle\psi| = (v_1^* \ v_2^* \ \dots \ v_N^*)$$

となります。ブラケットの項で行列にすると矢印を使っていたのは今見てきたように、 v_n は基底 $|\phi_n\rangle$ に依存しているからです。

- 交換関係、反交換関係

一般的な演算子は交換しないために交換関係の計算がよく出てきます。交換関係 (commutation relation) は

$$[\hat{T}_1, \hat{T}_2] = \hat{T}_1 \hat{T}_2 - \hat{T}_2 \hat{T}_1$$

と表記されます。また、量子力学ではほぼ出てきませんが、反交換関係というものもあり

$$\{\hat{T}_1, \hat{T}_2\} = \hat{T}_1 \hat{T}_2 + \hat{T}_2 \hat{T}_1$$

と表記されます。他にも $[\]_-$ 、 $[\]_+$ のように区別することもあります。交換関係が

$$[\hat{T}_1, \hat{T}_2] = 0$$

になる場合、 \hat{T}_1 と \hat{T}_2 は可換 (commutable) といいます。

交換関係の基本的な公式は (ハットを省いていますが T_1, T_2, T_3, T_4 は演算子)

$$[T_1, T_2 \pm T_3] = [T_1, T_2] \pm [T_1, T_3]$$

$$[T_1 + T_2, T_3 + T_4] = [T_1, T_3] + [T_2, T_3] + [T_1, T_4] + [T_2, T_4]$$

$$[T_1 - T_2, T_3 - T_4] = [T_1, T_3] - [T_2, T_3] - [T_1, T_4] + [T_2, T_4]$$

$$[T_1, T_2 T_3] = T_2 [T_1, T_3] + [T_1, T_2] T_3$$

$$[T_1, T_2 T_3] = \{T_1, T_2\} T_3 - T_2 \{T_1, T_3\}$$

$$[T_1, [T_2, T_3]] + [T_2, [T_3, T_1]] + [T_3, [T_1, T_2]] = 0$$

最後のはヤコビの恒等式と呼ばれます。例えば $[T_1, T_2 \pm T_3]$ は

$$\begin{aligned} [T_1, T_2 \pm T_3] &= T_1 T_2 \pm T_1 T_3 - (T_2 T_1 \pm T_3 T_1) = T_1 T_2 \pm T_1 T_3 - T_2 T_1 \mp T_3 T_1 \\ &= [T_1, T_2] \pm (T_1 T_3 - T_3 T_1) \\ &= [T_1, T_2] \pm [T_1, T_3] \end{aligned}$$

として確かめられます。

演算子が交換しないことが同時観測できない現象を表現します。可換であれば同時観測できることを意味します。

演算子の交換関係では

$$\left[\frac{\partial}{\partial x}, x \right]$$

のように、微分演算子による場合が多く出てきます。このとき注意すべきなのは、演算子は関数 (ベクトル) に作用すると定義されているために、関数に交換関係が作用しているとして計算されることです。なので、この場合は

$$\begin{aligned} \left[\frac{\partial}{\partial x}, x\right]\psi(x) &= \frac{\partial}{\partial x}(x\psi(x)) - x\frac{\partial}{\partial x}\psi(x) = \psi(x) + x\frac{\partial}{\partial x}\psi(x) - x\frac{\partial}{\partial x}\psi(x) = \psi(x) \\ \Rightarrow \left[\frac{\partial}{\partial x}, x\right] &= 1 \end{aligned}$$

となります。

- c 数、q 数

c 数は通常の数 (複素数) を指して、q 数は演算子や行列を指します。また、古典論や古典的という単語は量子論でないことを言っています。

- 固有値、固有状態

演算子とケット (ブラ) が

$$\hat{T}|\phi_n\rangle = a_n|\phi_n\rangle$$

このような関係になっているとします。このとき、 a_n を \hat{T} の固有値、 $|\phi_n\rangle$ を \hat{T} の固有状態 (固有ケット) と呼びます。これは行列での固有値、固有ベクトルと同じです。なので、 $|\phi_n\rangle$ を固有ベクトルとも呼びます。この方程式を解いて、固有値、固有状態が求まるか (固有値問題) が重要になっています。

\hat{T} を何かしらの観測に対応する演算子とします。そうすると、固有状態 $|\phi_n\rangle$ は観測 T を行っても状態が変わらないことを表わし、これは何度測定しても同じ測定値 a_n が出ることを言っています。このようにして、観測量に対応する固有値を導入し、測定値は固有値のどれかと仮定されます。現実の測定値は実数なので、固有値を実数とするためにエルミート演算子と制限され、仮定 (ii) となります。

同じ固有値に対して複数の線形独立な固有状態 (線形独立なベクトルと同じ意味) があることを縮退と呼びます。例えば、 $|\phi_1\rangle$ と $|\phi_2\rangle$ が線形独立で

$$\hat{T}|\phi_1\rangle = a|\phi_1\rangle, \hat{T}|\phi_2\rangle = a|\phi_2\rangle$$

となっているなら、二重に縮退していると言います。

同時固有状態と呼ばれるものがあり、これは複数の演算子に対して同時に固有状態になる場合です。同時固有状態が存在するためには、その演算子が交換する必要があります。演算子として、 \hat{T}, \hat{S} を用意し、これらに対する固有状態を $|\phi\rangle$ とします。そうすると、それぞれの固有値を a, b として

$$\hat{T}|\phi\rangle = a|\phi\rangle, \hat{S}|\phi\rangle = b|\phi\rangle$$

\hat{T} のほうに \hat{S} を作用させると、 a はスカラーなので演算子と交換することから

$$\hat{S}\hat{T}|\phi\rangle = a\hat{S}|\phi\rangle = ab|\phi\rangle$$

同じように \hat{S} のほうに \hat{T} を作用させると

$$\hat{T}\hat{S}|\phi\rangle = b\hat{T}|\phi\rangle = ba|\phi\rangle = ab|\phi\rangle$$

となり、右辺が同じになります。よって $\hat{T}\hat{S} = \hat{S}\hat{T}$ になるので、同時固有状態を持つとき演算子 \hat{T}, \hat{S} は交換することになります。

これは \hat{T}, \hat{S} が交換するとしても同じように同時固有状態が存在することが示せます。 $\hat{T}|\phi\rangle = a|\phi\rangle$ に \hat{S} を作用させて、 \hat{T}, \hat{S} が交換するとすれば

$$\hat{S}\hat{T}|\phi\rangle = a\hat{S}|\phi\rangle$$

$$\hat{T}\hat{S}|\phi\rangle = a\hat{S}|\phi\rangle$$

$$\hat{T}|\phi'\rangle = a|\phi'\rangle \quad (\hat{S}|\phi\rangle = |\phi'\rangle)$$

縮退がないなら、固有値 a に対応する固有状態は 1 つしかないので、 $b|\phi\rangle = |\phi'\rangle$ です。そうすると、 $|\phi\rangle$ に \hat{S} が作用しても $|\phi\rangle$ のままでなくてはならないので、 $|\phi\rangle$ は \hat{S} の固有状態にもなっています。

● エルミート演算子

関係の導出は「エルミート演算子」で行っています。

エルミート共役 (hermite conjugate) と言ったとき記号で「 \dagger 」を使い、演算子 \hat{T} を \hat{T}^\dagger とし、 \hat{T}^\dagger を演算子 \hat{T} のエルミート共役演算子と呼びます。エルミート共役演算子は

$$\langle\psi|\hat{T}^\dagger|\phi\rangle = \langle\phi|\hat{T}|\psi\rangle^*$$

を満たすものとして定義されます。そして、

$$\hat{T}^\dagger = \hat{T}$$

となっているとき、 \hat{T} をエルミート演算子 (hermite operator) と呼びます。エルミート共役演算子の定義で $\hat{T}^\dagger = \hat{T}$ としてエルミート演算子にすれば

$$\langle\psi|\hat{T}|\phi\rangle = \langle\phi|\hat{T}|\psi\rangle^*$$

となります。

エルミート共役「 \dagger 」は

- 「 \dagger 」はブラとケットを入れ替える： $|\phi\rangle^\dagger = \langle\phi|$, $\langle\phi|^\dagger = |\phi\rangle$, $(\hat{T}|\phi\rangle)^\dagger = \langle\phi|\hat{T}^\dagger$, $(\langle\phi|\hat{T})^\dagger = \hat{T}^\dagger|\phi\rangle$
- エルミート共役のエルミート共役は元に戻る： $(\hat{T}^\dagger)^\dagger = \hat{T}$
- 複数の演算子のエルミート共役は順序を逆にする： $(\hat{T}_1\hat{T}_2\cdots\hat{T}_n)^\dagger = \hat{T}_n^\dagger\cdots\hat{T}_2^\dagger\hat{T}_1^\dagger$
- 和のエルミート共役は個別に取る： $(T_1 + T_2 + \cdots + T_n)^\dagger = T_1^\dagger + T_2^\dagger + \cdots + T_n^\dagger$
- 複素数 α の「 \dagger 」は複素共役と同じ： $\alpha^\dagger = \alpha^*$

という性質を持ちます。このようなエルミート共役「 \dagger 」は行列では転置して複素共役を取れになります。複数の演算子の順序が逆になるのも転置の性質に対応しています。

エルミート演算子の重要な性質は、固有値は必ず実数になる、異なる固有値を持つ固有状態は直交する (内積が 0)、というものです。仮定 (ii) で観測とエルミート演算子に対応させているのは固有値が必ず実数だからです。なので、仮定 (ii) は、エルミート演算子 \hat{A} の固有値を a 、固有状態を $|\phi\rangle$ として

$$\hat{A}|\phi\rangle = a|\phi\rangle$$

となることは、固有状態 $|\phi\rangle$ に対して観測 A を行った結果は固有値 a になると言えます。

エルミート演算子の異なる固有値 a_n ($n = 1, 2, \dots$) を持つ固有状態 $|\phi_n\rangle$ は直交することから

$$\langle \phi_m | \phi_n \rangle = \delta_{mn}$$

となり (状態は単位ベクトルなので、ノルムは 1 に規格化している)、エルミート演算子の固有状態は正規直交系を構成します。加えて、完全性も持たせて、任意の状態 $|\psi\rangle$ はエルミート演算子の固有状態 $|\phi_n\rangle$ によって

$$|\psi\rangle = \sum_{n=1}^{\infty} c_n |\phi_n\rangle$$

と展開できると仮定されています (和の範囲は有限でも同様)。これは任意の状態は、エルミート演算子の固有状態の無限和による重ね合わせで書けるという仮定です。言い換えれば、ヒルベルト空間の完全正規直交系として、エルミート演算子の固有状態が使えるという仮定です。このため、量子力学で状態 $|\phi_n\rangle$ ($n = 1, 2, \dots$) と書かれたものは、完全正規直交系と暗黙の内に設定されていることが多いです。ただし、これは仮定というよりそうならいいに近しいものなので (量子力学では気にする問題が表面上はないから)、仮定の中を含めませんでした。

また、無限和が必要になる理由も分かります。例えば、エルミート演算子を運動量に対応するとすれば、運動量の値はいくらでも取れるので固有状態は有限個に収まらず、無限和が必要となります。

というわけで、今見てきたヒルベルト空間の数学が (i),(ii) です。次に、実験結果を説明するために必要な仮定である (iii),(iv) を見ていきます。

- 確率

確率の分野において、ある離散的な量 x_n が確率 P_n で現れるとしたとき、その期待値 (expectation value) (確率を使った平均) $\langle x \rangle$ は

$$\langle x \rangle = \sum_n x_n P_n$$

と一般的に与えられます。 n は対象に合わせた範囲です。確率 P_n は

$$\sum_n P_n = 1$$

と規格化されている必要があります。

観測量に対応するエルミート演算子の固有値を a_n 、固有状態を $|\phi_n\rangle$ とします。固有状態を完全正規直交系として、任意の状態 $|\psi\rangle$ を

$$|\psi\rangle = \sum_{n=1}^{\infty} c_n |\phi_n\rangle \quad (c_n = \langle \phi_n | \psi \rangle)$$

と展開したときの係数 c_n から、 a_n が観測される確率は $|c_n|^2$ で与えられると仮定します。これが仮定 (iii) で、仮定 (i),(ii) を量子力学の解釈に結びつけるものです。確率と解釈できるのは、完全性と任意の状態 $|\psi\rangle$ は単位ベクトルであることから

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

となり、 $|c_n|^2$ を全て足せば 1 になるからです。

任意の状態 $|\psi\rangle$ にエルミート演算子 \hat{A} を作用させると

$$\hat{A}|\psi\rangle = \sum_{n=1}^{\infty} c_n \hat{A}|\phi_n\rangle = \sum_{n=1}^{\infty} a_n c_n |\phi_n\rangle$$

となりますが、これは \hat{A} に対応する観測量としての \hat{A} の固有値を出してくれません ($|\psi\rangle$ は \hat{A} の固有状態でない)。これに対する解釈が仮定 (iii) です (仮定 (ii) は固有状態に対してのみの仮定)。つまり、任意の状態は観測量に対応するエルミート演算子の固有状態の重ね合わせになっていて、任意の状態を観測するとその中から 1 つの固有値 a_n が確率 $|c_n|^2$ で観測されるとします。そして、固有値 a_n が取り出されることから、観測後には状態 $|\psi\rangle$ は固有状態 $|\phi_n\rangle$ になるとされます。

確率で固有値が与えられるために、期待値を求めることができます。 $\langle\psi|\hat{A}|\psi\rangle$ を変形すると、

$$\langle\psi|\hat{A}|\psi\rangle = \sum_{n=1}^{\infty} \langle\psi|\hat{A}|\phi_n\rangle \langle\phi_n|\psi\rangle = \sum_{n=1}^{\infty} a_n \langle\psi|\phi_n\rangle \langle\phi_n|\psi\rangle = \sum_{n=1}^{\infty} a_n |\langle\phi_n|\psi\rangle|^2 = \sum_{n=1}^{\infty} a_n |c_n|^2$$

$|c_n|^2$ は a_n が観測される確率なので、 a_n の期待値を求める式になっています。なので、これを \hat{A} の期待値 $\langle A \rangle = \langle\psi|\hat{A}|\psi\rangle$ とします。

$c_n = \langle\phi_n|\psi\rangle$ から、状態 $|\phi\rangle$ から状態 $|\phi_n\rangle$ へ移る確率と解釈すれば、状態 $|\phi\rangle$ から別の状態 $|\phi_n\rangle$ へ移る確率全てを足せば 1 になるとも言えます。また、期待値の式は、ある状態 $|\psi\rangle$ に観測 A を行うことで測定値 a_n を取り出し、その観測の固有状態 $|\phi_n\rangle$ を経由して最後の状態へ行くとも見ることができます。これは、状態 $|\psi\rangle$ から観測 A を経由して状態 $|\psi\rangle$ へ行くことは確率としてしか与えられないことを言っています。

また、今の話からははっきり分かりませんが、振動の話での振幅部分に対応することから、 $\langle\phi|\psi\rangle$ のように書かれたものを確率振幅や遷移振幅と呼びます。量子力学の目的の 1 つは確率振幅 (ある状態から別の状態になる確率) を求めることです。

このように確率を定義すると状態に任意性があることが分かります。 $|\phi\rangle$ そのものでなく $\langle\phi|\phi\rangle$ が物理的な意味を持つとされるため、 $\langle\phi|\phi\rangle$ の計算結果が変わらなければ $|\phi\rangle$ は変更してもいいと言えます。 $\langle\phi|\phi\rangle$ は $(|\phi\rangle)^\dagger |\phi\rangle$ なので、 θ を実数として

$$|\phi\rangle \Rightarrow e^{i\theta} |\phi\rangle$$

としても

$$(e^{i\theta} |\phi\rangle)^\dagger e^{i\theta} |\phi\rangle = \langle\phi| e^{-i\theta} e^{i\theta} |\phi\rangle = \langle\phi|\phi\rangle$$

となって、 $\langle\phi|\phi\rangle$ になります。なので、 $e^{i\theta}$ をかけても物理は変わりません。このように、 $|\phi\rangle$ には $e^{i\theta}$ の任意性が常にあります。 $e^{i\theta}$ を位相因子と呼びます。これは複素平面における角度 θ を位相とも呼ぶからです。位相因子は物理の結果に影響しないので自由に選んで、それによって計算しやすい形に出来たりします。また、 $e^{i\theta} |\phi\rangle$ の集まり (θ の全ての値による集まり) を射線 (ray) と言います。

• ユニタリー演算子

ユニタリー演算子 (unitary operator) \hat{U} は

$$\hat{U}^\dagger = \hat{U}^{-1}$$

として定義されます。 \hat{U}^{-1} は \hat{U} の逆です ($\hat{U}\hat{U}^{-1} = \hat{U}^{-1}\hat{U} = 1$)。ユニタリー演算子によって仮定 (iv) は作られます。

量子力学ではエルミート演算子 \hat{A} によるユニタリー演算子 $e^{i\hat{A}}$ がよく出てきます。ユニタリー演算子になるのは、 $U = e^{i\hat{A}}$ として、 \hat{U}^\dagger を行列と同じように展開すれば

$$\hat{U}^\dagger = (e^{i\hat{A}})^\dagger = (1 + i\hat{A} + \frac{1}{2}(i\hat{A})^2 + \cdots)^\dagger = 1 + (-i\hat{A}^\dagger) + \frac{1}{2}(-i\hat{A}^\dagger)^2 + \cdots = e^{-i\hat{A}^\dagger} = e^{-i\hat{A}}$$

から、 $U\hat{U}^\dagger = 1$ となるからです。

力学では第二法則として粒子の時間経過に対する仮定があるように、量子力学では状態の時間経過に対する仮定が必要になります。

位置 $x(t)$ から微小な時間経過した $x(t + \Delta t)$ は

$$x(t + \Delta t) = x(t) + \frac{dx}{dt}\Delta t + \cdots = (1 + \Delta t \frac{d}{dt} + \cdots)x(t) = Fx(t)$$

のように書いて、 F によって $x(t)$ から $x(t + \Delta t)$ に変換されています。これと同じように、時間 t に依存する状態 $|\phi; t\rangle$ が時間 t' での状態 $|\phi; t'\rangle$ になることを

$$|\phi; t'\rangle = \hat{U}(t', t)|\phi; t\rangle$$

として、演算子 $\hat{U}(t', t)$ によって書けるとし、 $\hat{U}(t', t)$ を時間発展演算子と呼びます。 $\hat{U}(t', t)$ はユニタリー演算子で、エネルギーを固有値とする演算子から作られると仮定します。エネルギーを固有値とする演算子はハミルトニアン演算子と呼ばれます。これが仮定 (iv) で、これを変形していくと、 \hat{H} をハミルトニアン演算子として

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\phi; t\rangle = \hat{H} |\phi; t\rangle$$

となり、これはシュレーディンガー方程式やシュレーディンガーの運動方程式と呼ばれます。なので、仮定 (iv) はシュレーディンガー方程式です。

ユニタリー演算子を使う理由は確率解釈を維持するためです。簡単に言えば、ユニタリー演算子だと $\hat{U}^{-1} = \hat{U}^\dagger$ なので、 $\langle \psi | \psi \rangle$ からユニタリー演算子が作用した状態 $|\psi'\rangle$ でも

$$1 = \langle \psi | \psi \rangle = \langle \psi | \hat{U}^{-1} \hat{U} | \psi \rangle = \langle \psi | \hat{U}^\dagger \hat{U} | \psi \rangle = \langle \psi' | \psi' \rangle \quad (|\psi'\rangle = \hat{U} |\psi\rangle)$$

となるために (単位ベクトルから単位ベクトルへの変換)、確率解釈が可能なままになるからです (時間発展で言えば、任意の時間で確率解釈ができる)。

もう1つ重要なのが、仮定 (ii) において意味を変えずに、ユニタリー演算子によって別の固有状態にできることです。これを見ておきます。

エルミート演算子 \hat{A} をユニタリー演算子 \hat{U} で $\hat{U}\hat{A}\hat{U}^\dagger$ としたとき、

$$(\hat{U}\hat{A}\hat{U}^\dagger)^\dagger = (\hat{U}^\dagger)^\dagger \hat{A}^\dagger \hat{U}^\dagger = \hat{U}\hat{A}\hat{U}^\dagger$$

なので、 $\hat{U}\hat{A}\hat{U}^\dagger$ はエルミート演算子です。 \hat{A} の固有値を a 、固有状態を $|a\rangle$ として、 $\hat{U}|a\rangle = |a'\rangle$ にこれを作用してみると

$$\hat{U}\hat{A}\hat{U}^\dagger|a'\rangle = \hat{U}\hat{A}\hat{U}^\dagger\hat{U}|a\rangle = \hat{U}\hat{A}|a\rangle = a\hat{U}|a\rangle = a|a'\rangle$$

となるので、 $\hat{U}\hat{A}\hat{U}^\dagger$ は a を固有値に持ちます。このため、 \hat{A} と $|a\rangle$ に対するユニタリー演算子による変換

$$\hat{U}\hat{A}\hat{U}^\dagger, \hat{U}|a\rangle = |a'\rangle$$

の後に取り出される固有値は変わらなくなっています。これをユニタリー変換と言い、ユニタリー演算子が重要になる理由です。仮定 (ii) はエルミート演算子による

$$\hat{A}|a\rangle = a|a\rangle$$

という式から固有値 a を取り出すことなので、今の結果から仮定 (ii) は意味を変えずにユニタリー変換によって

$$\hat{U}\hat{A}\hat{U}^\dagger|a'\rangle = a|a'\rangle \quad (|a'\rangle = \hat{U}|a\rangle)$$

と書けることになります。

● 波動関数

ヒルベルト空間のベクトルをブラケットによって与えてきましたが、関数はベクトルなので、関数を使うことができます。数学的に扱うのは非常に面倒なので、今までの話を関数に当てはめた場合を示すだけにします。位置を 1 次元としますが 3 次元でも同じです。

量子力学で使われるヒルベルト空間の関数 ψ を波動関数 (wave function) と呼びます。波動関数は基本的に位置を変数とします。波動関数は連続的とするので、連続的な場合の確率が使われます。なので、離散的からの変更を簡単にまとめておきます。

ある連続的な量 z があるとしたとき、 z の期待値は

$$\langle z \rangle = \int dz \, z P(z)$$

と与えられます。積分範囲は z の取れる範囲です。このときの $P(z)$ は確率密度と呼ばれ

$$\int dz \, P(z) = 1$$

と規格化されています。密度とついているように、 $P(z)$ は $1/z$ の次元を持っていることに注意してください (確率そのものでない)。

波動関数によって仮定 (iii),(iv) は

(iii) $|\psi(x)|^2 \Delta x$ を位置 x と $x + \Delta x$ の間に粒子を見つける確率とする

(iv) $i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(x, t) = \hat{H} \psi(x, t)$

と言い換えられます。 \hat{H} はハミルトニアン演算子です。(iii) から、 $|\psi(x)|^2$ が確率密度となり、 $\psi(x)$ は

$$\int_a^b dx \, |\psi(x)|^2 = 1$$

と規格化できるとされます。 $|\psi(x)|^2$ は確率密度、 $|c_n|^2$ は確率となっていることに注意して下さい。また、範囲が無限大のときでも

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx |\psi(x)|^2 = 1$$

とするために、 $\psi(x)$ は $x = \pm\infty$ に近づくとき十分早くに 0 になることが仮定されています。例えば

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx \frac{d}{dx} \psi(x) = [\psi(x)]_{-\infty}^{\infty} = 0$$

となります。特に無限遠での面積分はよく出てきて、その項はこの要求から消えるとされます。

波動関数の確率解釈のためには常に規格化が可能でないといけません。常には、ユニタリー演算子の項でも触れたように、時間に関係なしにという意味です。これは「シュレーディンガー方程式とハイゼンベルク方程式」で触れます。

ブラケットと波動関数は、確率解釈において

$$\int_a^b dx |\psi(x)|^2 = 1 = \langle \psi | \psi \rangle$$

となっていることから

$$\langle \psi | \phi \rangle = \int_a^b dx \psi^*(x) \phi(x)$$

と対応しています。これは、位置の観測 (位置演算子) の固有状態を $|x\rangle$ としたとき、位置は連続的なので完全性は

$$\int_a^b dx |x\rangle \langle x| = 1$$

となることを使えば

$$\langle \psi | \phi \rangle = \int_a^b dx \langle \psi | x \rangle \langle x | \phi \rangle = \int_a^b dx \psi^*(x) \phi(x)$$

つまり、波動関数 $\phi(x)$ はブラケットの内積 $\langle x | \phi \rangle$ から作れます。このことから、ある観測量 A と、その固有状態 $|A\rangle$ 、そして任意の状態 $|\phi\rangle$ があつたとき、 $|A\rangle$ と $|\phi\rangle$ の内積 $\langle A | \phi \rangle$ によってできる関数 $\phi(A)$ が波動関数とすることができます。特に、位置の固有状態 $|x\rangle$ による $\phi(x) = \langle x | \phi \rangle$ のときは位置表示、運動量の固有状態 $|p\rangle$ による $\phi(p) = \langle p | \phi \rangle$ は運動量表示と呼ばれます。

任意の状態 $|\phi\rangle$ だけでは数値としての代数計算ができないために観測量と対応がとれる状態との内積を取ることで、その観測量を変数とする関数として波動関数は作られています。なので、 $\langle x | p \rangle$ のような両方とも連続的 (離散的でも) な観測量である場合は特殊で、波動関数と呼ばずに変換関数と言ったりします。実際に、 $\langle x | p \rangle$ は位置表示と運動量表示を変換するものになっていて、それは「シュレーディンガー方程式とハイゼンベルク方程式」で示します。

波動関数を使ったとき、直交関係は状態 $|\phi_n\rangle$ の直交性から

$$\langle \phi_m | \phi_n \rangle = \int_a^b dx \langle \phi_m | x \rangle \langle x | \phi_n \rangle = \int_a^b dx \phi_m^*(x) \phi_n(x) = \delta_{mn}$$

連続的な量で区別されているときは

$$\int_a^b dx \phi_{k'}^*(x) \phi_k(x) = \delta(k' - k)$$

\hat{T} のエルミート共役演算子は

$$\int_a^b dx \psi^*(x) \hat{T}^\dagger \phi(x) = \int_a^b dx (\phi^*(x) \hat{T} \psi(x))^*$$

右辺は \hat{T} は $\psi(x)$ に作用していることから、 $\hat{T}\psi(x)$ をセットにして複素共役を

$$\int_a^b dx (\phi^*(x) \hat{T} \psi(x))^* = \int_a^b dx (\hat{T} \psi(x))^* \phi(x)$$

と書くことができます。並びを変えてるのは複素共役を左側に置くのが慣習になっているからです。

\hat{A} がエルミート演算子なら

$$\int_a^b dx \psi^*(x) \hat{A}(x) \phi(x) = \int_a^b dx (\phi^*(x) \hat{A}(x) \psi(x))^*$$

演算子 \hat{T} の期待値は

$$\begin{aligned} \langle T \rangle &= \langle \psi | \hat{T} | \psi \rangle = \int_a^b dx' \int_a^b dx \langle \psi | x' \rangle \langle x' | \hat{T} | x \rangle \langle x | \psi \rangle \\ &= \int_a^b dx' \int_a^b dx \psi^*(x') \hat{T}(x', x) \psi(x) \quad (\langle x' | \hat{T} | x \rangle = \hat{T}(x', x)) \end{aligned}$$

$\hat{T}(x', x)$ は、変数 x', x が行列の成分を表していると見れば、演算子 \hat{T} の x', x の場合での行列と捉えられます。 x, x' は連続値なので T_{mn} のように書かないで関数の変数として書いています。 $\hat{T}(x', x)$ は $x = x'$ のみで値を持ち (行列で言えば対角成分のみを持つ)、デルタ関数によって $\hat{T}(x', x) = \delta(x' - x) \hat{T}(x)$ と書けるなら

$$\langle T \rangle = \int_a^b dx \psi^*(x) \hat{T}(x) \psi(x)$$

となります。