ポアソン括弧式

F, Gを任意の力学変数として

$$[F, G] = \frac{\partial F}{\partial q}\frac{\partial G}{\partial p} - \frac{\partial G}{\partial q}\frac{\partial F}{\partial p}$$

をポアソン括弧式という。但し、F, Gはp, qを独立変数とする関数である。

演算子

演算子は状態ベクトルにだけ作用するもの

演算子$\hat{A}$は、何かの関数$f(x)$に作用して、これを別の関数$g(x)$に変えるはたらきをもつ。このことを、

$$g = \hat{A} f$$

と書く。f, gが波動関数ならば上式は演算子$\hat{A}$が状態fに作用して、それを別の状態gに変える、というふうに読みとる。
位置演算子$\hat{x}$、運動量演算子$\hat{p}$の場合、

$$\hat{x} f(x) = x f(x)$$

$$\hat{p} f(x) = -i\hbar \frac{df(x)}{dx}$$

関数f, gに対して内積(スカラー積)を

$$(f, g) \equiv \int f(x)^* g(x)\, dx$$

と定義する。このように定義した内積は

$$(g, f) = (f, g)^*$$

という性質をもつ。即ち内積の左右の波動関数を入れかえるのと複素共役をとるのは同じ結果を与える。

演算子$\hat{A}$, $\hat{B}$が任意の関数f, gに対して

$$(\hat{A}f, g) = (f, \hat{B}g)$$

をみたすとき、$\hat{B}$が$\hat{A}$にエルミート共役であると言い、

$$\hat{B} = \hat{A}^\dagger \qquad (\because\ (\hat{A}f, g) = (f, \hat{A}^\dagger g))$$

と書く。特に、$\hat{A}^\dagger = \hat{A}$ $\quad ((\hat{A}f, g) = (f, \hat{A}g))$
が成り立つとき$\hat{A}$をエルミート演算子という。

固有値、固有関数

(a倍)

演算子$\hat{A}$を関数fに作用させた結果がfの定数倍になるとき、
すなわち

$$\hat{A}f = af$$

$\hat{A}$の　　　　$\hat{A}$の固有値を与える

の関係が成り立つとき、定数aを固有値、fを固有関数という。

(状態)

特に$\hat{A}$がエルミート演算子の場合には、その固有値aは実数である。
また、エルミート演算子$\hat{A}$の固有値をa_n、固有関数をu_nとするとき
異なる固有値（$a_m, a_n, \cdots$）に属する固有関数u_m, u_nは
正規直交性

$$(u_m, u_n) = \delta_{mn} \qquad \begin{pmatrix} m=n & \cdots & 1 \\ m\neq n & \cdots & 0 \end{pmatrix}$$

を有する。

演算子の交換関係

2個の演算子$\hat{A}$、$\hat{B}$の間に

$$\hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A} = 0$$

が成り立つとき、$\hat{A}$と$\hat{B}$は交換可能（または可換）であるという。
右辺がゼロでないときには非交換可能（または非可換）であるという。