量子力学:Diracのブラケット記法、エルミート演算子の性質

千葉　敏、平成24年5月17日

1　Diracのブラケット記法

シュレーディンガー方程式

$$\hat{H}\phi_n(x) = E_n\phi_n(x) \tag{1}$$

の固有関数 $\phi_n(x)$ を以下のように書くことにする。

$$\phi_n(x) =< x|\phi_n >=< x|n > \tag{2}$$

これをDiracのブラケット記法と言う（ブラケットは括弧という意味）。$< ..|$ をブラベクトル、$|.. >$ をケットベクトルと言う。また、この複素共役をブラとケットを交換して

$$\phi_n(x)^* =< x|\phi_n >^*=< \phi_n|x >=< n|x > \tag{3}$$

と書くものと決める。すると、二つの波動関数 $\phi_n(x)$、$\phi_m(x)$ の内積 I_{mn}

$$I_{mn} \equiv (\phi_m^*, \phi_n) \equiv \int \phi_m(x)^*\phi_n(x)dx \tag{4}$$

は、

$$I_{mn} = \int < m|x >< x|n > dx \tag{5}$$

となるが、これをさらに

$$I_{mn} = \int < m|x >< x|n > dx =< m|n > \tag{6}$$

と略して書くことにする。この書き方によると、

$$I_{mn}^* =< n|m >= I_{nm} \tag{7}$$

となる。内積がゼロになる場合、二つの関数は**直交する**と言う。自分自身との内積を**ノルム**と言い、波動関数が規格化されている場合、それは1に等しくなる：

$$I_{nn} =< n|n >= 1(\text{規格化されている場合}) \tag{8}$$

我々は波動関数の絶対値の二乗（上のノルムのこと）が確率分布を表すと解釈して来たので、波動関数はこのように規格化されるべきである。

同様に、物理量の期待値は

$$< \hat{A} >\equiv \int \phi_n(x)^*\hat{A}\phi_n(x)dx \tag{9}$$

と決められていたが、これも

$$< \hat{A} >=< n|\hat{A}|n > \tag{10}$$

のように略して書けるものとする。また、$\hat{A}|n >$ は $|n >$ とは異なるケットベクトルであり、それを $|\hat{A}n >$ のように書く：

$$\hat{A}|n >= |\hat{A}n > \tag{11}$$

2　エルミート共役とエルミート演算子

任意の演算子 $\hat{A}$ のエルミート共役演算子 $\hat{A}^\dagger$ は

$$< n|\hat{A}^\dagger|m >\equiv \Big(< m|\hat{A}|n >\Big)^* = \Big(< m|\hat{A}n >\Big)^* =< \hat{A}n|m > \tag{12}$$

と定義される。これが任意の $|m >$ について成り立つことから、$< n|\hat{A}^\dagger =< \hat{A}n|$ が成り立つ。これより定数演算子のエルミート共役は複素共役となる。

エルミート演算子はエルミート共役が自分自身に等しい演算子のことである。すなわち $\hat{A}^\dagger = \hat{A}$ であり、

$$< n|\hat{A}^\dagger|m >\equiv \Big(< m|\hat{A}|n >\Big)^* =< \hat{A}n|m >=< n|\hat{A}|m > \tag{13}$$

もし $|n >$ がエルミート演算子 $\hat{A}$ の規格化された固有関数の場合 ($\hat{A}|n >= A_n|n >$、$< n|n >= 1$)、

$$< n|\hat{A}|n >= A_n < n|n >= A_n =< n|\hat{A}|n >^* = A_n^* \tag{14}$$

となり、**エルミート演算子の固有値は実数である**ことが言える。

$|m >$、$|n >$ をエルミート演算子 $\hat{A}$ の規格化された固有関数とすると、

$$\begin{aligned} \hat{A}|n > &= A_n|n > & (15) \\ \hat{A}|m > &= A_m|m > & (16) \end{aligned}$$

となる定数 A_n、A_m(固有値) が存在するので、

$$\begin{aligned} < m|\hat{A}|n > &= A_n < m|n > & (17) \\ < n|\hat{A}|m > &= A_m < n|m > & (18) \end{aligned}$$

(??) 式の複素共役をとり、$\hat{A}$ がエルミート演算子であることと A_m が実数であることを考慮すると、

$$< m|\hat{A}|n >=< m|\hat{A}^\dagger|n >=< n|\hat{A}|m >^* = A_m < m|n > \tag{19}$$

これを (??) 式から引き算すると

$$(A_n - A_m) < m|n >= 0 \tag{20}$$

となる。これは $A_n \neq A_m$ の場合、$< m|n >= 0$ となること、すなわち**エルミート演算子の異なる固有値に対する固有関数は直交する** (内積がゼロになる）ことを意味する。従って、固有関数は

$$< n|m >= \delta_{nm} \tag{21}$$

すなわち正規直交系にすることができる。このような関数の組 $\{|n >\}$ を用いると任意の関数を展開することが可能である（フーリエ級数と同じ意味で）。つまり、任意の関数 $f(x)$ を Dirac の記号を用いて $|f >$ と書くと、

$$|f >= \sum_n a_n|n > \tag{22}$$

と展開可能である。この意味で関数の組 $\{|n >\}$ を完全系、または**正規直交完全系**と言う。

3　オブザーバブル

量子力学では、**観測可能量に対応する演算子をオブザーバブルと呼ぶ**。観測量は全て実数であるので、**オブザーバブルはエルミート演算子で表される**。エルミート演算子の固有関数系は完全系を為すので、それを正規直交系完全系にすることも可能で、それにより任意の関数を展開できる：

$$|f>=\sum_n a_n|n> \tag{23}$$

展開係数 a_n は、左から $<m|$ を掛けると（つまり、内積を取ると）

$$<m|f>=\sum_n a_n<m|n>=\sum_n a_n\delta_{mn}=a_m \tag{24}$$

すなわち

$$a_n=<n|f> \tag{25}$$

であり、これを (??) 式に代入すると、

$$|f>=\sum_n<n|f>|n>=\sum_n|n><n|f> \tag{26}$$

となる。これが任意の $|f>$ について言えることから

$$\sum_n|n><n|=1 \tag{27}$$

となる。これが関数系 $\{|n>\}$ が正規直交完全系を為すことの数学的表現で、**完備性**と言う。

位置の固有関数は $|x>$ と書かれる。位置はオブザーバブルなので、その固有関数の組は正規直交完全系を為す。ただし位置 x は連続変数なので、上の和は積分で置き換えられる。すなわち

$$\int|x><x|dx=1 \tag{28}$$

これに右から $|n>$、左から $<m|$ を掛けると

$$\int<m|x><x|n>dx=<m|n> \tag{29}$$

となる。これが (??) 式のように、内積で出てくる $\int|x><x|dx$ を省略していいことの理由である。同様に運動量の固有関数系 $\{|p>\}$ も完全系を為すので

$$\int|p><p|dp=1 \tag{30}$$

と置いて良いことになる。すなわち、(??)、(??)、(??) **式のような正規直交完全系の和（または積分）は常に 1 と置いて良い**。従って式変形の途中で好きな場所に挿入したり、逆に省略することができる。

4　演習問題

以下の各問に答えよ。

1. $\hat{A}|n>$ の複素共役は $<n|\hat{A}^\dagger$ であることを示せ。

$$(\hat{A}|n>)^* = |\hat{A}n>^* = <\hat{A}n| = <n|\hat{A}^\dagger. \tag{31}$$

2. $(\hat{A}\hat{B})^\dagger = \hat{B}^\dagger\hat{A}^\dagger$ を証明せよ

   任意の波動関数を $|n>$、$|m>$ として、

$$<n|(\hat{A}\hat{B})^\dagger|m> = <\hat{A}\hat{B}n|m> = <\hat{B}n|\hat{A}^\dagger|m> = <n|\hat{B}^\dagger\hat{A}^\dagger|m>. \tag{32}$$

3. 従って $(\hat{A}\hat{B}\hat{C}...\hat{X})^\dagger = \hat{X}^\dagger...\hat{C}^\dagger\hat{B}^\dagger\hat{A}^\dagger$

   $\hat{a} = \hat{B}\hat{C}...\hat{X}$ とすると、$(\hat{A}\hat{B}\hat{C}...\hat{X})^\dagger = (\hat{A}\hat{a})^\dagger = \hat{a}^\dagger\hat{A}^\dagger$。今度は $\hat{b} = \hat{C}...\hat{X}$ として $\hat{a} = \hat{B}\hat{b}$ とすると $\hat{a}^\dagger = \hat{b}^\dagger\hat{B}^\dagger$ となり、次々と繰り返していけば目的の式となる。

4. 二つのエルミート演算子に対しては $(\hat{A}\hat{B})^\dagger = \hat{B}\hat{A}$ であることを示せ。

$$(\hat{A}\hat{B})^\dagger = \hat{B}^\dagger\hat{A}^\dagger = \hat{B}\hat{A}. \tag{33}$$

5. 二つのエルミート演算子 $\hat{A}$、$\hat{B}$ が交換する場合は積 $\hat{A}\hat{B}$ もエルミート演算子であることを示せ。

   上の結果より

$$(\hat{A}\hat{B})^\dagger = \hat{B}\hat{A} = \hat{A}\hat{B}. \tag{34}$$

6. 二つのエルミート演算子 $\hat{A}$、$\hat{B}$ が交換する場合、波動関数を両方の固有関数にすることが可能であることを証明せよ。

   前提より

$$\hat{A}\hat{B} = \hat{B}\hat{A} \tag{35}$$

   である。$\{|A_n>\}(n = 1, 2, ...)$ を演算子 $\hat{A}$ の固有関数完備系とする。すると

$$\hat{A}\hat{B}|A_n> = \hat{B}\hat{A}|A_n> = \hat{B}A_n|A_n> = A_n\hat{B}|A_n> \tag{36}$$

   従ってケット $\hat{B}|A_n>$ は演算子 $\hat{A}$ の固有値 A_n を持つ固有関数である。つまり $\hat{B}|A_n> = B_m|A_n>$。これより $|A_n>$ は演算子 $\hat{B}$ の固有値 B_m を持つ固有関数でもある。これをはっきりさせるために $|A_n>$ を $|A_n, B_m>$ と書くことにする。

7. 二つのエルミート演算子 $\hat{A}$、$\hat{B}$ が交換する場合、それぞれに対応する物理量を誤差なく確定することが可能であることを証明せよ。

   前問の結果より

$$\begin{align} \hat{A}|A_n, B_m> &= A_n|A_n, B_m> \tag{37} \\ \hat{B}|A_n, B_m> &= B_m|A_n, B_m> \tag{38} \end{align}$$

$$\begin{align} \hat{A}^2|A_n, B_m> &= A_n^2|A_n, B_m> \tag{39} \\ \hat{B}^2|A_n, B_m> &= B_m^2|A_n, B_m> \tag{40} \end{align}$$

従って固有関数 $|A_n, B_m>$ に対して、分散は

$$\Delta A^2 \equiv <A^2> - <A>^2 = A_n^2 - A_n^2 = 0 \tag{41}$$
$$\Delta B^2 \equiv <B^2> - <B>^2 = B_m^2 - B_m^2 = 0 \tag{42}$$

これより、二つの演算子の分散を同時にゼロにすることができる。これらの演算子がオブザーバブルであれば、対応する物理量を誤差なしに確定することが可能である。

5 交換するオブザーバブルの集合

ハミルトニアンを含めてお互いに交換する全てのオブザーバブル組 $\hat{H}, \hat{A}, \hat{B}, \hat{C}...$ は特に重要である。なぜかと言うと、シュレーディンガー方程式の解はハミルトニアンの固有状態であるが、それはさらに演算子 $\hat{A}, \hat{B}, \hat{C}...$ の固有状態でもある。つまり

$$\hat{H}|i> = E_i|i> \tag{43}$$

の解 $|i>$ は、実際には他のオブザーバブルの固有値も明示すると

$$|i> = |E_i, A_j, B_k, C_\ell, ...> \tag{44}$$

と書くべきものである。同じ E_i を持つ状態でも、他の演算子（$\hat{A}$ 等）の異なる固有値に対する固有関数は直交する (なぜならばエルミート演算子の異なる固有値に対する固有状態は直交する)、すなわち異なる量子状態を表す。言い換えると量子状態はハミルトニアンの固有値 E_i を示す量子数 i だけで決定されるものではなく、お互いに交換する他の全てのオブザーバブルに対する量子数を書いて初めて明確に状態を区別することができる。この意味でハミルトニアンを含めてお互いに交換する全てのオブザーバブルとその固有状態を見つけることは特に重要である。

6 位置の固有関数：デルタ関数

位置を表す演算子 $\hat{x}$ の固有値 x に対応する固有関数を考える：

$$\hat{x}|x> = x|x> \quad \rightarrow \quad (\hat{x} - x)|x> = 0 \tag{45}$$

この関係を常に満たす関数はデルタ関数と呼ばれる。

$$(\hat{x} - x)\delta(\hat{x} - x) = 0 \tag{46}$$

つまり、位置の固有関数を座標表示したものはデルタ関数である：

$$<x'|x> = \delta(x' - x) \tag{47}$$

デルタ関数は面積が 1 で、ある点のみで値を持つ特殊な関数である。普通の意味での関数とは異なり、積分された時にのみ意味を持つ。この意味で超関数と呼ばれるものの一種。具体的表式はいくつかあり、平面波を用いると

$$\delta(x - x') = \frac{1}{2\pi}\int e^{ik(x-x')}dk \tag{48}$$

となる。また、**四角形の面積を 1 に保ったまま、底辺の長さを 0 に、高さを無限大に近づけたものもデルタ関数である。**

主な性質は以下の通り。

$$\int_{-\infty}^{\infty}\delta(x)dx = 1 \tag{49}$$

$$\int_{-\infty}^{\infty}f(x)\delta(x)dx = f(0) \tag{50}$$

$$\int_{-\infty}^{\infty}f(x)\delta(x-a)dx = f(a) \tag{51}$$

以下は積分記号の中で用いられることを念頭に置いた時に成り立つ式。

$$\delta(x-a)\delta(x-b) = \delta(a-b) \tag{52}$$

$$\delta(f(x)) = \sum_{x_i(f(x_i)=0)}\frac{1}{|f'(x_i)|}\delta(x-x_i) \tag{53}$$

$$\delta(ax) = \frac{1}{|a|}\delta(x) \tag{54}$$

$$\delta(x^2-a^2) = \frac{1}{2|a|}\left[\delta(x-a)+\delta(x+a)\right] \tag{55}$$

$$\delta((x-a)(x-b)) = \frac{1}{|a-b|}\left[\delta(x-a)+\delta(x-b)\right] \tag{56}$$

$$f(x)\delta'(x-a) = -f'(a) \tag{57}$$

7 運動量の固有関数

平面波

$$\phi_k(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}e^{ikx} \tag{58}$$

は運動量の固有関数である：

$$\hat{p}\phi_k(x) = -i\hbar\frac{d}{dt}\phi_k(x) = \hbar k\phi_k(x) \equiv p\phi_k(x) \tag{59}$$

しかし、(??) 式の中に現れているのは波数 k であり、これは波数を量子数とする固有関数を座標表示したものと解釈されるべきものである：

$$< x|k >= \frac{1}{\sqrt{2\pi}}e^{ikx} \tag{60}$$

そうすると、

$$\int < x|k >< k|x' > dk = \frac{1}{2\pi}\int e^{ik(x-x')}dk = \delta(x-x') =< x|x' > \tag{61}$$

となる。最後から 2 番目の等号は (??) 式の、最後の等号は (??) 式の結果である。従って以前出てきた運動量の固有関数の完備性の式 (??) と同様

$$\int |k >< k|dk = 1 \tag{62}$$

が成り立つ。また確率の保存則 $|\phi_p(x)|^2dp = |\phi_k(x)|^2dk$ より

$$\phi_p(x) =< x|p >= \frac{1}{\sqrt{\hbar}} < x|k >= \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}e^{i\frac{p}{\hbar}x} \tag{63}$$

である。

8　演算子の時間変化

ポテンシャルが実数の場合、ハミルトニアンは実数であり、かつエルミートである。従って、シュレーディンガー方程式とその複素共役な方程式は以下のように書ける

$$
\begin{aligned}
i\hbar\frac{\partial\phi}{\partial t} &= \hat{H}\phi && (64)\\
i\hbar\frac{\partial\phi^*}{\partial t} &= -\hat{H}\phi^* && (65)
\end{aligned}
$$

任意の演算子 $\hat{A}$ の平均値の時間変化を考える：

$$
\begin{aligned}
\frac{d}{dt}\left\langle\hat{A}\right\rangle &= \frac{d}{dt}<\phi|\hat{A}|\phi>=<\frac{d}{dt}\phi|\hat{A}|\phi>+<\phi|\hat{A}|\frac{d}{dt}\phi>+<\phi|\frac{d}{dt}\hat{A}|\phi> && (66)\\
&= -\frac{1}{i\hbar}<\hat{H}\phi|\hat{A}|\phi>+\frac{1}{i\hbar}<\phi|\hat{A}|\hat{H}\phi>+\left\langle\frac{d}{dt}\hat{A}\right\rangle && (67)\\
&= -\frac{1}{i\hbar}<\phi|\hat{H}\hat{A}|\phi>+\frac{1}{i\hbar}<\phi|\hat{A}\hat{H}|\phi>+\left\langle\frac{d}{dt}\hat{A}\right\rangle && (68)\\
&= -\frac{1}{i\hbar}<\phi|\hat{H}\hat{A}-\hat{A}\hat{H}|\phi>+\left\langle\frac{d}{dt}\hat{A}\right\rangle && (69)\\
&= \frac{1}{i\hbar}<\phi|[\hat{A},\hat{H}]|\phi>+\left\langle\frac{d}{dt}\hat{A}\right\rangle && (70)
\end{aligned}
$$

従って、もし、物理量 A に対応する演算子がハミルトニアンと交換し、また時間を陽に含まないならば

$$
\frac{d}{dt}\left\langle\hat{A}\right\rangle = \frac{1}{i\hbar}<\phi|[\hat{A},\hat{H}]|\phi>=0 \qquad (71)
$$

となる。つまり、物理量 A の平均値は時間的に一定の保存量である。この時、古典力学との類推によって、A は運動の定数と呼ばれる。特に初期時刻における波動関数が、ハミルトニアンと交換する物理量 $\hat{A}$ の固有値 A_n に相当する固有関数 $|n>$ なら、この性質は時間が経過しても保たれる。この時 A_n を“ 良い量子数 ”であると言う。例えば、自由粒子の場合、運動量はハミルトニアンと交換するので一定に保たれる。これが量子力学的な運動量保存則の表現である。また、運動量は観測可能量なので対応する演算子 $-i\hbar\frac{d}{dx}$ はエルミート演算子である。

9　不確定性原理の証明

一般の演算子 $\hat{Q}$ とそのエルミート共役演算子 $\hat{Q}^\dagger$ の積の平均値

$$
\begin{aligned}
\left\langle\hat{Q}^\dagger\hat{Q}\right\rangle &= <\phi|\hat{Q}^\dagger\hat{Q}|\phi>=<\phi|\hat{Q}^\dagger|\hat{Q}\phi>=\left(<\hat{Q}\phi|\hat{Q}|\phi>\right)^*=\left(<\hat{Q}\phi|\hat{Q}\phi>\right)^* && (72)\\
&= \left\langle\left|\hat{Q}|\phi>\right|^2\right\rangle\geq 0 && (73)
\end{aligned}
$$

すなわち、この積の平均値は常に正である。

位置演算子 x、運動量演算子 p のそれぞれの期待値を $<x>$、$<p>$、任意の実数を λ として、次のような演算子を定義する：

$$
\begin{aligned}
\hat{x}' &= x-<x> && (74)\\
\hat{p}' &= p-<p> && (75)
\end{aligned}
$$

$$\hat{Q} = \hat{x}' + i\lambda\hat{p}' \tag{76}$$
$$\hat{Q}^\dagger = \hat{x}' - i\lambda\hat{p}' \tag{77}$$

これらを用いると、(**??**) 式より

$$0 \leq \left\langle \hat{Q}^\dagger\hat{Q} \right\rangle = \langle(\hat{x}' - i\lambda\hat{p}')(\hat{x}' + i\lambda\hat{p}')\rangle = \left\langle \hat{x}'^2 \right\rangle + \lambda i \langle \hat{x}'\hat{p}' - \hat{p}'\hat{x}' \rangle + \lambda^2 \left\langle \hat{p}'^2 \right\rangle \tag{78}$$
$$= \left\langle \hat{x}'^2 \right\rangle + \lambda i \langle [\hat{x}', \hat{p}'] \rangle + \lambda^2 \left\langle \hat{p}'^2 \right\rangle = * \tag{79}$$

ただし $[a, b]$ は交換子、すなわち $[a, b] \equiv ab - ba$ である。ここで $i\langle[\hat{x}', \hat{p}']\rangle = C$ と置くと

$$* = \lambda^2 \left\langle \hat{p}'^2 \right\rangle + \lambda C + \left\langle \hat{x}'^2 \right\rangle = \lambda^2 (\Delta p)^2 + \lambda C + (\Delta x)^2 \geq 0 \tag{80}$$

となる。ただし

$$< \hat{x}'^2 >=< (x- < x >)^2 > \equiv (\Delta x)^2 \tag{81}$$
$$< \hat{p}'^2 >=< (p- < p >)^2 > \equiv (\Delta p)^2 \tag{82}$$

はそれぞれ位置、運動量の分散の意味である。

(**??**) 式の不等号が常に成り立つためには、λ の二次方程式の判別式が負でなければならないから

$$C^2 - 4(\Delta x)^2(\Delta p)^2 \leq 0 \quad \to \quad (\Delta x)^2(\Delta p)^2 \geq \frac{C^2}{4} \tag{83}$$

となるが、

$$C \equiv i\langle[\hat{x}', \hat{p}']\rangle = i\langle \hat{x}'\hat{p}' - \hat{p}'\hat{x}' \rangle = i\langle (x- < x >)(p- < p >) - (p- < p >)(x- < x >)\rangle \tag{84}$$
$$= i\langle [x, p] - [x, < p >] - [< x >, p] + [< x >, < p >]\rangle = i\langle [x, p]\rangle = i \cdot i\hbar = -\hbar \tag{85}$$

従って

$$(\Delta x)^2(\Delta p)^2 \geq \frac{C^2}{4} = \frac{\hbar^2}{4} \tag{86}$$

これより、位置と運動量の不確定性関係

$$\Delta x \cdot \Delta p \geq \frac{\hbar}{2} \tag{87}$$

が厳密に証明できた。この導出からわかるように、任意の二つの演算子の交換子がゼロでなければ同様の不確定性関係が成立する。すなわち、交換しない演算子に対応する物理量を同時に確定することは不可能であることが言える。