４．５　量子力学演算子の固有関数は直交する

演算子 $\hat{A}$ と固有関数 ψ_n とは複素数でもよいが、固有値 a_n は観測値と対比して実数でなければならない。

$$\hat{A}\,\psi_n = a_n\,\psi_n \tag{4.23}$$

異なる固有値の固有関数は直交する。

$$\int_{-\infty}^{\infty} \psi_n^*\,\psi_m\,dx = 0 \qquad (n \neq m) \tag{4.24}$$

箱の中の粒子で見てみよう。一次元の波動関数は次の通り。

$$\psi_n(x) = (2/a)^{1/2} \sin(n\pi x/a) \qquad n = 1, 2, \cdots \tag{4.25}$$

（4.25）式を（4.24）式に入れて

$$\int_{-\infty}^{\infty} \psi_n^*\,\psi_m\,dx = \frac{2}{a}\int_0^a \sin\frac{n\pi x}{a}\sin\frac{m\pi x}{a}\,dx$$

ここで　$\sin\alpha\sin\beta = \frac{1}{2}\cos(\alpha-\beta) - \frac{1}{2}\cos(\alpha+\beta)$ の関係を使うと

$$= \frac{2}{a}\int_0^a \frac{1}{2}\left\{\cos\frac{(n-m)\pi x}{a} - \cos\frac{(n+m)\pi x}{a}\right\}dx \tag{4.26}$$

となる。ｎ≠ｍの場合は

$$= \frac{1}{a}\left[\frac{a}{(n-m)\pi}\sin\frac{(n-m)\pi x}{a}\right]_0^a$$

$$- \frac{1}{a}\left[\frac{a}{(n+m)\pi}\sin\frac{(n+m)\pi x}{a}\right]_0^a = 0 \qquad n \neq m \tag{4.27}$$

となり、ｎ＝ｍの場合には

$$= \frac{1}{a}\left[x - \frac{a}{2n\pi}\sin\frac{2n\pi x}{a}\right]_0^a = 1 \quad n = m \tag{4.28}$$

となる。

規格直交系は次のように書くことができる。

$$\int_{-\infty}^{\infty} \psi_n^*\,\psi_m\,dx = \delta_{nm} \tag{4.29}$$

$$\delta_{nm} = \begin{cases} 1 & n = m \\ 0 & n \neq m \end{cases} \tag{4.30}$$

ここに δ_{nm} はクロネッカーのデルタと言われる。

波動関数 $\Psi(x,t)$ のノルム

$$\int_{-\infty}^{\infty} \left|\Psi(x,t)\right|^2 dx = \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^*(x,t)\,\Psi(x,t)\;dx = N^2 \tag{1}$$

N を波動関数 $\Psi(x,t)$ のノルムという　$\|\Psi\| = N$ と書かれる。

$\Psi(x,t)$ は $x \to \pm\infty$ で $\Psi(x,t) \to 0$

$N = 1$ ととることが $\Psi(x,t)$ の規格化条件

エルミート演算子

エルミート内積を次のように書く。

$$(f(x), g(x)) = \int_{-\infty}^{\infty} f^*(x)\, g(x)\, dx \qquad (2)$$

エルミート対称性（順序交換は複素共役に等しい）

$$(f(x), g(x)) = (g(x), f(x))^* \qquad (3)$$

$\hat{A}$ がエルミート演算子なら次の関係を満足する。

$$(f(x), \hat{A}\, g(x)) = (\hat{A}\, f(x), g(x)) \qquad (4)$$

$\hat{A}$ として運動量演算子 $\hat{p}_x = -i\hbar \dfrac{\partial}{\partial x}$ を調べてみよう

$$(f(x), \hat{p}_x g(x)) = \int_{-\infty}^{\infty} f^*(x)\ \hat{p}_x g(x)\, dx$$

$$= \int_{-\infty}^{\infty} f^*(x) \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x}\right) g(x)\, dx$$

部分積分を行うと

$$= -i\hbar \left\{ [f^*(x)\, g(x)]_{-\infty}^{\infty} - \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\partial f^*(x)}{\partial x} g(x)\, dx \right\}$$

第一項はゼロ（規格化できるためには $x \to \pm\infty$ で波動関数はゼロでなければならない）

$$= \int_{-\infty}^{\infty} i\hbar \frac{\partial}{\partial x} f^*(x)\, g(x)\, dx = \int_{-\infty}^{\infty} \hat{p}_x^{\,*} f^*(x)\, g(x)\, dx$$

$$= (\hat{p}_x f(x), g(x))$$

が得られる。運動量演算子はエルミート演算子である。

教科書の表現（4.31）について調べてみると

$$\int_{-\infty}^{\infty} f^*(x)\ \hat{A} g(x)\, dx = \int_{-\infty}^{\infty} g(x)\ \hat{A}^* f^*(x)\, dx \qquad (4.31)$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} f^*(x)\ \hat{A} g(x)\, dx = (f(x), \hat{A}\, g(x))$$

エルミート演算子の性質（4）式と（3）式とから

$$= (\hat{A}\, f(x), g(x)) = (g(x), \hat{A}\, f(x))^*$$

$$= \left(\int_{-\infty}^{\infty} g^*(x)\ \hat{A}\, f(x)\, dx\right)^* = \int_{-\infty}^{\infty} g(x)\ \hat{A}^* f^*(x)\, dx$$

となって（4.31）式も エルーミート演算子の性質を示すことが確認できた

$\hat{A}$ がエルミートならその期待値は

$$< \hat{A} > = \frac{(\psi, \hat{A}\psi)}{\|\psi(x)\|^2} = \frac{(\hat{A}\psi, \psi)}{\|\psi(x)\|^2} = \frac{(\psi, \hat{A}\psi)^*}{\|\psi(x)\|^2} = < \hat{A} >^* \tag{5}$$

となるので $a = a^*$ となる。従ってエルミート演算子の固有値は実数である。

仮説２は量子力学では観測値（物理量）に対応するエルミート演算子が存在する。

４．６　可換な演算子に対応した物理量は任意精度で同時に測定できる

演算子 $\hat{A}$ と $\hat{B}$ が次式を満足するなら、 $\hat{A}$ と $\hat{B}$ は可換であると言う。

$$\hat{A}\,\hat{B} f(x) = \hat{B}\,\hat{A}\, f(x) \qquad \text{（交換可能）} \tag{4.32}$$

一般には次のように可換ではない。

$$\hat{A}\,\hat{B} f(x) \neq \hat{B}\,\hat{A}\, f(x) \qquad \text{（非可換）} \tag{4.33}$$

例１　運動エネルギー演算子と運動量演算子は可換である

$\hat{A} = \hat{K}_x$, $\hat{B} = \hat{p}_x$ と置く

$$\hat{K}_x\ \hat{p}_x \psi(x) = (-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2})\,(-i\hbar\frac{d\psi(x)}{dx}) = \frac{i\hbar^3}{2m}\frac{d^3}{dx^3}\psi(x)$$

$$\hat{p}_x \hat{K}_x \psi(x) = (-i\hbar\frac{d}{dx})\,(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi(x)}{dx^2}) = \frac{i\hbar^3}{2m}\frac{d^3}{dx^3}\psi(x)$$

となるので

$$\hat{K}_x\ \hat{p}_x \psi(x) = \hat{p}_x \hat{K}_x \psi(x) \tag{4.34}$$

これは次のように書ける

$$\hat{K}_x\ \hat{p}_x \psi(x) - \hat{p}_x \hat{K}_x \psi(x) = 0$$

ゼロ演算子 $\hat{0}$ （ゼロを掛ける）で明示すると

$$(\hat{K}_x\ \hat{p}_x - \hat{p}_x \hat{K}_x)\,\psi(x) = \hat{0}\,\psi(x) \tag{4.35}$$

演算子方程式は

$$\hat{K}_x\ \hat{p}_x - \hat{p}_x \hat{K}_x = \hat{0} \tag{4.36}$$

となる。この式の左辺を$\hat{K}_x$ と $\hat{p}_x$ の交換子と言い

$$[\hat{K}_x,\ \hat{p}_x] = \hat{K}_x\ \hat{p}_x - \hat{p}_x \hat{K}_x \tag{4.37}$$

のように書く。これはまた

$$[\hat{K}_x,\ \hat{p}_x] = \hat{0} \tag{4.38}$$

と書ける。可換な演算子の交換子はゼロ演算子である。

例２　運動量演算子と位置演算子は可換ではない

$\hat{A} = \hat{p}_x$,　$\hat{B} = \hat{X}$ と置く

$$\hat{p}_x\ \hat{X}\psi(x) = (-i\hbar\frac{d}{dx})\,(x\,\psi(x)) = -i\hbar\,(\psi(x) + x\frac{d\psi(x)}{dx})$$

$$\hat{X}\ \hat{p}_x \psi(x) = x\,(-i\hbar \frac{d}{dx}\psi(x)) = -i\hbar\, x \frac{d\,\psi(x)}{dx}$$

となるので $\hat{p}_x$ と $\hat{X}$ は可換ではない。

$$\hat{p}_x\ \hat{X}\,\psi(x) \neq \hat{X}\ \hat{p}_x \psi(x) \qquad (4.39)$$

書き改めると

$$(\hat{p}_x\ \hat{X} - \hat{X}\ \hat{p}_x)\,\psi(x) = -i\hbar\,\psi(x) = -i\hbar\,\hat{I}\,\psi(x) \qquad (4.40)$$

となる。ここに $\hat{I}$ は１を掛ける演算子で恒等演算子という。

$$[\ \hat{p}_x,\ \hat{X}] = \hat{p}_x\ \hat{X} - \hat{X}\ \hat{p}_x = -i\hbar\,\hat{I} \qquad (4.42)$$

と書ける。

不確定性原理と交換子

シュワルツの不等式は次のように書かれる。

$$\left|\int \psi^*\,\psi\,dx\right| \cdot \left|\int \varphi^*\,\varphi\,dx\right| \geq \left|\int \psi^*\,\varphi\,dx\right|^2 = \left|\frac{1}{2}\left\{\int \psi^*\,\varphi\,dx + \int \varphi^*\,\psi\,dx\right\}\right|^2$$

(4.43)

演算子 $\hat{A}$ と $\hat{B}$ の平均値 $\overline{a}$ と $\overline{b}$ を用いて

$\psi = (\hat{A} - \overline{a})\,\phi$， $\varphi = i\,(\hat{B} - \overline{b})\,\phi$ と置く

これを（4.43）式に入れて

$$左辺 = \int (\hat{A} - \overline{a})^*\phi^*\,(\hat{A} - \overline{a})\,\phi\,dx \int (-i)\,(\hat{B} - \overline{b})^*\phi^*\,i\,(\hat{B} - \overline{b})\,\phi\,dx$$

$$= \int \phi^*\,(\hat{A} - \overline{a})^2\,\phi\,dx \int \phi^*\,(\hat{B} - \overline{b})^2\,\phi\,dx$$

$$= (<\hat{A}^2> - <\hat{A}>^2)\,(<\hat{B}^2> - <\hat{B}>^2) = \sigma_a^2 \cdot \sigma_b^2$$

$$右辺 = \frac{1}{4}\left[\int (\hat{A} - \overline{a})^*\phi^*\,i\,(\hat{B} - \overline{b})\,\phi\,dx + \int (-i)\,(\hat{B} - \overline{b})^*\phi^*\,(\hat{A} - \overline{a})\,\phi\,dx\right]^2$$

$$= -\frac{1}{4}\left[\int \phi^*\,(\hat{A} - \overline{a})\,(\hat{B} - \overline{b})\,\phi\,dx - \int \phi^*\,(\hat{B} - \overline{b})\,(\hat{A} - \overline{a})\,\phi\,dx\right]^2$$

$$= -\frac{1}{4}\left[\int \phi^*\,(\hat{A}\hat{B} - \overline{a}\,\hat{B} - \hat{A}\,\overline{b} + \overline{a}\,\overline{b})\,\phi\,dx\right.$$

$$\left. - \int \phi^*\,(\hat{B}\hat{A} - \hat{B}\,\overline{a} - \overline{b}\,\hat{A} + \overline{b}\,\overline{a})\,\phi\,dx\right]^2$$

$$= -\frac{1}{4}\left[\int \phi^*\,(\hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A})\,\phi\,dx\right]^2$$

$$= -\frac{1}{4}\left[\int \phi^*\,[\hat{A}, \hat{B}]\,\phi\,dx\right]^2$$

$$\sigma_a^2 \cdot \sigma_b^2 \geq -\frac{1}{4}\left[\int \phi^*\,[\hat{A}, \hat{B}]\,\phi\,dx\right]^2 \qquad (4.44)$$

演算子 $\hat{A}$ と $\hat{B}$ が可換なら右辺はゼロとなるので σ_a, σ_b あるいは両方とも同時にゼロ

になりうる。可換でない時は右辺はゼロにならないのでσ_a とσ_b とは反比例の関係にあり、 a と b の両方を同時に任意精度で測定できない。

運動量演算子と位置演算子について見てみると

$$\sigma_a^2 \cdot \sigma_b^2 \geq -\frac{1}{4}\left[\int \phi^* [\hat{A}, \hat{B}] \phi \, dx\right]^2$$

$$= -\frac{1}{4}\left[\int \phi^* [\hat{p}_x, \hat{X}] \phi \, dx\right]^2 = -\frac{1}{4}\left[\int \phi^* (-i\hbar) \phi \, dx\right]^2$$

$$= -\frac{1}{4}(-\hbar^2) = \frac{\hbar^2}{4}$$

より次の関係を得る。

$$\sigma_{p_x} \cdot \sigma_x \geq \frac{\hbar}{2} \tag{4.45}$$

この式は運動量と位置とに関する不確定性原理を表す。