第２回：１０月１４日（金）

## 2.2　演算子

量子力学では、演算子を用いた計算を多用する。ここで演算子の基本的な事柄についてまとめておこう。

演算子とは、関数に作用してそれを別の関数に変化させるものである。しばしばハット付きの記号を用いて表わされる。関数 $f(x)$ にある演算子 $\widehat{A}$ を作用させて $g(x)$ が得られるということを

$$g = \widehat{A} f \tag{39}$$

のように表す。二つの演算子 $\widehat{A}$ と $\widehat{B}$ があり、任意の関数に作用させたときにこれらが同じ結果を与えるなら、これら二つの演算子は等しいといい、次のように表わす。

$$\widehat{A} = \widehat{B} \tag{40}$$

**線形演算子** 線形演算子とは、次の性質を満足する演算子のことをいう。

$$\widehat{A}(c\psi + c'\psi') = c\widehat{A}\psi + c'\widehat{A}\psi', \quad c, c' \in \mathbf{C}. \tag{41}$$

ただし $\psi$ と $\psi'$ は任意の関数、$c$ と $c'$ は任意の複素数である。量子力学において用いられる演算子は全て線形演算子である。

$\psi$ と $\psi'$ をベクトル、$\widehat{A}$ を行列だとしても同じ関係が成り立つ。演算子と行列のこのような類似は以下でもしばしば現れる。演算子の性質を理解する際に、「行列ではどうなるか？」と考えるのも教育的である。

**固有関数・固有値** ある関数 $\psi(x)$ に対して線形演算子 $\widehat{A}$ を作用させて得られる関数 $\widehat{A}\psi(x)$ がもとの関数の定数倍になっているとき、すなわち

$$\widehat{A}\psi(x) = a\psi(x) \tag{42}$$

であるとき、$\psi(x)$ は線形演算子 $\widehat{A}$ の固有関数であるといい、定数 $a$ のことを固有値と呼ぶ。

簡単な演算子の例をいくつか表１に与える。

**問題 2.1** 表 *1* の中で、線形演算子はどれか？

**問題 2.2** 表 *1* の演算子のうち、線形であるものに注目し、それぞれに対して、固有関数の例を一つずつ与えよ。また、その固有関数に属する固有値を求めよ。

表 1: （線形とは限らない）演算子の例。ここでは変数 $x$ だけの関数に作用するものに限った。名称や記号は一般的ではないものも含む。

| | | |
|---|---|---|
| 微分演算子 | $d/dx$ | $f(x) \to df(x)/dx$ |
| 並進演算子 | $\widehat{T}$ | $f(x) \to f(x-1)$ |
| 鏡映演算子 | $\widehat{R}$ | $f(x) \to f(-x)$ |
| 2 乗演算子 | $\widehat{\mathrm{sq}}$ | $f(x) \to f(x)^2$ |
| たす 1 演算子 | $\widehat{\mathrm{inc}}$ | $f(x) \to f(x)+1$ |
| 恒等演算子 | $\widehat{1}$ | $f(x) \to f(x)$ |

**問題 2.3** 関数 $f=0$ に任意の線形演算子を作用させると 0 になることを示せ。

量子力学において用いられる演算子は全て線形演算子である。以下では、特に強調する場合を除き、線形演算子のことを単に演算子と呼ぶ。

シュレーディンガー方程式 $\widehat{H}\psi = \widehat{E}\psi$ に現れる演算子 $\widehat{E}$ と $\widehat{H}$ がどちらも線形演算子であることから、$\psi(x,t)$ がシュレーディンガー方程式の解であったとき、その定数倍 $c\psi(x,t)$ もやはり解である。また、シュレーディンガー方程式の二つの解 $\psi_1(x,t)$ と $\psi_2(x,t)$ が与えられたとき、それらの任意の線形結合

$$\psi(x,t) = c_1\psi_1(x,t) + c_2\psi_2(x,t) \quad c_1, c_2 \in \mathbf{C} \tag{43}$$

もやはりシュレーディンガー方程式の解である。

線形演算子の演算について簡単にまとめておこう。演算子を用いた計算は、それが作用する関数をあらわに書いておくとわかりやすくなる。

**演算子の和** 二つの演算子 $\widehat{A}$ と $\widehat{B}$ があるとき、その和 $\widehat{A}+\widehat{B}$ を次の式によって定義する。

$$(\widehat{A}+\widehat{B})f = \widehat{A}f + \widehat{B}f. \tag{44}$$

**演算子の定数倍** ある演算子 $\widehat{A}$ の定数倍 $c\widehat{A}$ は次の式によって定義される。

$$(c\widehat{A})f = c(\widehat{A}f) \tag{45}$$

**符号および差** マイナスと差は次のように定義される。

$$(-\widehat{A})f = -(\widehat{A})f, \quad \widehat{A} - \widehat{B} = \widehat{A} + (-\widehat{B}). \tag{46}$$

**演算子の積** 二つの演算子 $\widehat{A}$ と $\widehat{B}$ の積 $\widehat{A}\widehat{B}$ は最初に $\widehat{B}$ を作用させてそのあとに $\widehat{A}$ を作用させる演算を表す。つまり

$$(\widehat{A}\widehat{B})f = \widehat{A}(\widehat{B}f) \tag{47}$$

一般に、$\widehat{A}\widehat{B}$ と $\widehat{B}\widehat{A}$ は異なることに注意しよう。

**例題 2.1** 3 つの演算子の積に対して結合律 $(\widehat{A}\widehat{B})\widehat{C} = \widehat{A}(\widehat{B}\widehat{C})$ が成り立つことを示せ。

**解答**: 任意の関数 $f$ に対して $((\widehat{A}\widehat{B})\widehat{C})f = (\widehat{A}(\widehat{B}\widehat{C}))f$ が成り立つことを示せばよい。これは演算子の積の定義を繰り返し用いることで次のように示すことができる。

$$((\widehat{A}\widehat{B})\widehat{C})f = (\widehat{A}\widehat{B})(\widehat{C}f) = \widehat{A}(\widehat{B}(\widehat{C}f)) = \widehat{A}((\widehat{B}\widehat{C})f) = (\widehat{A}(\widehat{B}\widehat{C}))f \tag{48}$$

**恒等演算子** 関数を変化させないような演算子を恒等演算子という。恒等演算子を $\widehat{1}$ によって表そう。定義より明らかに、任意の演算子 $\widehat{X}$ に対して

$$\widehat{X}\widehat{1} = \widehat{1}\widehat{X} = \widehat{X} \tag{49}$$

が成り立つ。

**逆演算子** ある演算子 $\widehat{A}$ に対して $\widehat{B}\widehat{A} = \widehat{A}\widehat{B} = \widehat{1}$ を満足する演算子 $\widehat{B}$ を $\widehat{A}$ の逆演算子と呼び、$\widehat{A}^{-1}$ と表す。

逆演算子は任意の演算子に対して存在するわけではない。(逆行列と同様)

**問題 2.4** 逆演算子が存在しない線形演算子の例を与え、それが逆演算子を持たないことを示せ。

**問題 2.5** 逆演算子は存在したとすればただ一つであること、すなわち、ある演算子 $\widehat{A}$ に対して

$$\widehat{A}\widehat{B} = \widehat{B}\widehat{A} = \widehat{1}, \quad \widehat{A}\widehat{C} = \widehat{C}\widehat{A} = \widehat{1} \tag{50}$$

が成り立つとすれば、$\widehat{B} = \widehat{C}$ であることを示せ。

## 2.3 確率解釈

量子力学において、波動関数は系の全ての情報を含んでいる。しかし、波動関数が与えられたとしても、系に対する全ての物理量が定まるわけではない。

たとえば、最も簡単な物理量の一つである位置について考えてみよう。二重スリットの実験が示すことは、波動関数は物質そのものを表わすのではなく、粒子が存在する確率（正確には確率密度）を与えるということである。存在確率密度は、ある区間 $x_1 \leq x \leq x_2$ に粒子が存在する確率を $P(x_1, x_2)$ とするとき、次の式によって定義される。

$$P(x_1, x_2) = \int_{x_1}^{x_2} \rho(x)dx \tag{51}$$

あるいは、関数 $\rho(x)$ がほとんど一定とみなせるような微小区間 $\Delta x$ を取れば、

$$P(x, x+\Delta x) = \rho(x)\Delta x \tag{52}$$

と書くこともできる。

$\psi(x,t)=0$ であるところには、粒子は存在せず、$\psi(x,t)$ が 0 から離れるほど存在する確率は大きくなる。確率密度 $\rho$ は 0 または正の実数で無ければならないから、波動関数 $\psi$ （一般には複素関数）をそのまま確率密度とみなすわけにはいかない。結論からいうと、確率密度 $\rho(x,t)$ は電磁波の強度に類似した次の式によって与えられる。

$$\boxed{\rho(x,t) \propto |\psi(x,t)|^2. \tag{53}}$$

ただし、比例係数は $x$ や $t$ に依存しない定数である。

比例係数を求めるには、確率を全て合わせると 1 になることを用いればよい。比例係数を $N$ として次のように置こう。

$$\rho(x,t) = N|\psi(x,t)|^2 \tag{54}$$

確率は全てを合計すると 1 になるはずであるから、(54) の左辺は $x$ の全区間で積分したときに次の式が成り立つ。

$$1 = N\int_{-\infty}^{\infty} |\psi(x,t)|^2 dx \tag{55}$$

この式の積分はしばしば関数 $\psi$ の**ノルム**と呼ばれる。ここで**右辺の積分が収束したとすると**、この式から係数 $N$ が決まる。

$$N = \left(\int_{-\infty}^{\infty} |\psi(x,t)|^2 dx\right)^{-1} \tag{56}$$

（この定数が時間に依存しないことはあとで示す。）

$$N = |c|^2 \tag{57}$$

を満足する複素数 $c$ を用いて $\psi$ の代わりにそれを $c$ 倍した新しい波動関数 $\widetilde{\psi}$ を定義しよう。

$$\widetilde{\psi}(x,t) = c\psi(x,t) \tag{58}$$

これは規格化された波動関数といい、次の性質を満足する。

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\widetilde{\psi}(x,t)|^2 dx = 1. \tag{59}$$

規格化された波動関数が満足するこの式を規格化条件と呼ぶ。規格化された波動関数を用いると、粒子の存在確率密度の式は次のように簡単になって便利である。

$$\rho(x,t) = |\widetilde{\psi}(x,t)|^2. \tag{60}$$

関係式 (57) からは定数 $c$ の位相は定まらないことは重要である。つまり、規格化条件 (59) を課したとしても波動関数の位相を変化させる自由度は残っている。これに関して、次のことは重要である。

波動関数全体の位相の違いは物理的意味を持たない。

実は、このことは電荷の保存、あるいは確率の保存などと関係した深い物理的意味を持つが、ここでは触れない。

上で強調したように、規格化された波動関数を定義できるのは (55) の右辺の積分（波動関数のノルム）が収束する場合だけである。これは、ある有限の区間のみを粒子が運動することができ、その区間の外側では波動関数が急速に 0 に近づく場合である。通常我々が目にする系ではこの条件は成り立っている。たとえば、ある粒子の運動を調べる実験を実験室内で行ったとすれば、その粒子は確実に実験室内にいると考えられるから、波動関数が 0 でない領域は有限であり、積分は収束する。

しかし、計算を行う際には便宜上規格化できない波動関数を扱うことがしばしばある。たとえば一様に無限に広がる単色波のような理想化された状態である。無限に広がる単色波には無限に広い領域を運動する粒子が対応しており、有限の区間で検出される確率は無限に小さい。それでも、場所ごとの存在確率の相対的な比を議論することには意味がある。そのような場合には波動関数を無理に規格化せず、その相対的な大きさの比だけを問題にする。

## 2.4 位置演算子とディラックの $\delta$-関数

以前に、運動量 $p$、エネルギー $E$ を持つ自由粒子の波動関数が次の関係を満たすことを述べた。

- 運動量 $p$ を持つ粒子の波動関数は
$$\widehat{p}\psi = p\psi \quad (\widehat{p} = -i\hbar\frac{\partial}{\partial x}) \tag{61}$$
を満足する。
- エネルギー $E$ を持つ粒子の波動関数は
$$\widehat{E}\psi = E\psi \quad (\widehat{E} = i\hbar\frac{\partial}{\partial t}) \tag{62}$$
を満足する。

同様なことは、位置に対しても成り立つ。すなわち

- 位置 $x_0$ にある粒子の波動関数は

$$\hat{x}\psi = x_0\psi \tag{63}$$

を満足する。

ただし、**位置演算子** $\hat{x}$ は次のように定義される。

$$\hat{x}\psi(x) = x\psi(x), \quad \forall\psi(x) \tag{64}$$

すなわち、$\hat{x}$ は $x$ を掛けるという操作を表わす演算子である。((64) は $\hat{x}$ の固有値が $x$ と言っているのではないことに注意しよう。固有値は座標に依存しない定数でなければならない。)

(64) の定義からもわかるように、$\hat{x}$ と書いても $x$ と書いても実質的には同じことである。ハミルトニアン演算子を作る際に、運動量は $p$ から $\hat{p}$ に置き換えたのに対して $x$ はそのままにしていたが、実は $x$ に対しても演算子 $\hat{x}$ への置き換えを暗に行っていたと思ってもよい。

$$\widehat{H} = H(\hat{p}, x) = H(\hat{p}, \hat{x}). \tag{65}$$

位置が $x_0$ であるような状態の波動関数、すなわち、式

$$\hat{x}\psi(x) = x_0\psi(x) \tag{66}$$

を満足する位置演算子の固有関数がどのような形をしているかを考えてみよう。この式は、次のように書き換えることができる。

$$(x - x_0)\psi(x) = 0. \tag{67}$$

従って、$x \neq x_0$ においては $\psi(x) = 0$ である。つまり、波動関数 $\psi$ は $x = x_0$ においてのみ 0 でない値を取り、図 4 のような形をしている。この図からもわかる

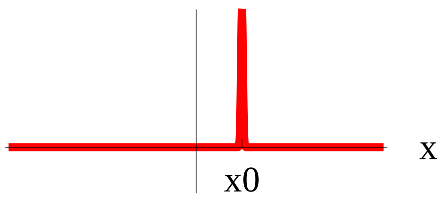


図 4: 位置演算子 $\hat{x}$ の固有状態の例

ように、粒子の存在確率が 0 で無いのは点 $x = x_0$ だけであり、粒子は確実にその点に存在しているということができる。

このような、ある点でのみ 0 でない関数を与えるために、**ディラックの $\delta$-関数**を用いる。ディラックの $\delta$-関数は次の二つの関係を満足するものとして定義される。

δ 関数の定義

- 任意の関数 $f$ に対して
$$\delta(x)f(x) = \delta(x)f(0) \tag{68}$$
が成り立つ。（これより、$x \neq 0$ において $\delta(x) = 0$ がいえる。）

- 全実数にわたり積分すると
$$\int_{-\infty}^{\infty} \delta(x)dx = 1 \tag{69}$$
が成り立つ。（$x \neq 0$ では $\delta(x) = 0$ なので、0 を含む区間であればどこで積分しても 1 になる。）これにより、$\delta(0)$ の大きさが決まる。

グラフにすると図 5 のようになる。厳密には $\delta$-関数は**関数ではない**ことに注意し

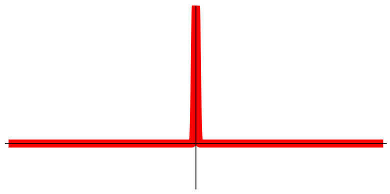


図 5: ディラックの $\delta$-関数

よう。（超関数と呼ばれるものの一種である。）$\delta(x)$ が全実数を定義域として定義された関数であれば、$\delta(x)$ は任意の $x$ において有限の値を持たなければならない。特に $\delta(0)$ も有限でなければならない。しかし、これでは (69) の積分は 0 になってしまい、条件を満足することができない。従って、$\delta(0)$ は有限の値ではなく、発散量であるとみなす必要がある。条件 (69) はこの発散の度合いを決める式であり、(68) は両辺において $x = 0$ における発散の度合いが同じであることを意味する式である。

このように、発散する量を直接扱うことを避けたければ、$\delta$ 関数は常に積分の中だけに現れるものとし、次の性質によって $\delta$ 関数を定義することもできる。

δ 関数の別の定義

- 任意の関数 $f$ に対して
$$\int_{-\infty}^{\infty} \delta(x)f(x)dx = f(0) \tag{70}$$
が成り立つ。

そして、$\delta$ 関数は常に積分の中だけで用いるというように約束をすることもできる。しかし、その利便性から、$\delta(x)$ はあたかも関数であるように扱うことが多い。

（この授業でもそのように扱う。）

$\delta$ 関数は次のように極限として定義するのもしばしば便利である。

$\delta$ 関数のさらに別の定義

$$\delta(x) = \lim_{\epsilon \to 0} \frac{1}{\epsilon} F\left(\frac{x}{\epsilon}\right) \tag{71}$$

ただし、$F(x)$ は次の条件を満足する関数。

$$\int F(x) dx = 1. \tag{72}$$

たとえば、$F(x)$ として次の関数を取ることができる。

$$F(x) = \begin{cases} 1 & (|x| \leq 1/2) \\ 0 & (|x| \geq 1/2) \end{cases} \tag{73}$$

**問題 2.6** *(71)* によって定義される $\delta$ 関数が *(70)* を満足することを示せ。ただし、極限と積分の順序の交換が可能であることなどは仮定してよい。

(68) において $x$ を $x - x_0$ で置き換え、$f(x - x_0)$ のことを $g(x)$ で置き換えることで得られる次の関係式は、$\delta$ 関数を使った計算においてよく用いられる。

$$\delta(x - x_0) g(x) = \delta(x - x_0) g(x_0) \tag{74}$$

この関係式を用いれば、次の波動関数が位置演算子 $\hat{x}$ の固有関数であり、その固有値が $x_0$ であることがわかる。

$$\psi(x) = \delta(x - x_0). \tag{75}$$

この波動関数は規格化条件 (59) によって規格化することはできないこと、つまりノルムが発散することを示しておこう。

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{\infty} |\delta(x - x_0)|^2 dx &= \int_{-\infty}^{\infty} \delta(x - x_0)\delta(x - x_0) dx \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} \delta(x - x_0)\delta(x_0 - x_0) dx \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} \delta(x - x_0)\delta(0) dx \\ &= \delta(0) \int_{-\infty}^{\infty} \delta(x - x_0) dx \\ &= \delta(0) \\ &= +\infty. \end{aligned} \tag{76}$$

二つ目の等号で公式 (74) を用いた。