

量子力学の基本性質

シャンチー

2005.3.4

1 物理量とエルミート演算子

1.1 エルミート演算子

ある演算子 A がありこの演算子が物理量を表しているとする、その期待値は当然実数でないとならない。時刻 t における状態 $\psi(\mathbf{r}, t)$ での A の期待値は

$$\langle A \rangle = \int d^3r \psi^* A \psi$$

のように与えられたから、その複素共役は

$$\langle A \rangle^* = \int d^3r (A\psi)^* \psi$$

とかける。 $\langle A \rangle$ が実数であるための条件は、 $\langle A \rangle = \langle A \rangle^*$ であるから、演算子 A に対して

$$\int d^3r \psi^* A \psi = \int d^3r (A\psi)^* \psi$$

が成立しなければならない。この式を満たす演算子をエルミート演算子という。

実際、位置の演算子や運動量の演算子など物理量を表す演算子はこれを満たしていることが確かめられる。

参考のために p がエルミートであることを示そう

$$\begin{aligned} \int d^3r \psi^* \mathbf{p} \psi &= \frac{\hbar}{i} \int d^3r \psi^* \nabla \psi \\ &= -\frac{\hbar}{i} \int d^3r (\nabla \psi^*) \psi = \int d^3r \left(\frac{\hbar}{i} \nabla \psi\right)^* \psi = \int d^3r (\mathbf{p}\psi)^* \psi \end{aligned} \quad (1)$$

ここでの計算では部分積分と ψ が無限遠方で 0 になることを用いた、
以上より、エルミート演算子であることが言えた。

1.2 エルミート共役な演算子

エルミート演算子を定義する上でもう少し一般的な形のものを導入し
ておこう。

今、 ψ を以下のような形の関数とする

$$\psi = \psi_1 + \lambda\psi_2$$

$\langle A \rangle$ が実数であるという条件に代入して考えると

$$\int d^3r \psi^* A \psi = \int d^3r (A\psi)^* \psi$$

展開して $\langle A \rangle$ が実数である条件

$$\int d^3r \psi_i A \psi_i = \int d^3r (A\psi_i)^* \psi_i \quad (i = 1, 2)$$

を用いて、 λ と λ^* の係数が 0 になることより、以下の式が導ける。

$$\int d^3r \psi_2^* A \psi_1 = \int d^3r (A\psi_2)^* \psi_1$$

この式が、エルミート演算子を定義する関係式として用いられる。
少し言葉の説明が続くが、ある演算子 A, B があって A と B の間に以下の
ような関係式があるとき $B = A^\dagger$ と書き、 B は A に対するエルミート共
役な演算子という。

$$\int d^3r \psi_2^* B \psi_1 = \int d^3r (A\psi_2)^* \psi_1$$

また、上式で $B = A$ つまり、 $A^\dagger = A$ のとき A をエルミート演算子とい
う。

少し紛らわしい言い方だが、区別して使えるようにしたい。