

## 7 波動関数と Hermite 演算子

### [7.A] 波動関数の内積・ブラとケット

波動関数  $\psi_i(x), \psi_j(x)$  の内積は次の様に定義される。

$$\langle \psi_i | \psi_j \rangle \equiv \int_{-\infty}^{\infty} dx \psi_i^*(x) \psi_j(x) = \langle \psi_j | \psi_i \rangle^* \quad (7.1)$$

ここで、ケット  $|\psi_j\rangle$ 、ブラ  $\langle \psi_i|$  は状態の抽象的な表示である。(ベクトルの成分表示  $(a_1, a_2, \dots, a_n)^\dagger$  をまとめて示すもの ( $\mathbf{a}$  や  $\mathbf{a}^\dagger$ ) と考えればよい。)

### [7.B] 演算子の Hermite 共役、Hermite 演算子

演算子  $\hat{A}$  の Hermite 共役な演算子  $\hat{A}^\dagger$  は、任意の波動関数  $\psi_i(x), \psi_j(x)$  に対して、

$$\langle \psi_j | \hat{A}^\dagger \psi_i \rangle \equiv \left( \langle \psi_i | \hat{A} \psi_j \rangle \right)^* = \langle \hat{A} \psi_j | \psi_i \rangle \quad (7.2)$$

の関係を要求することによって定義される。これより、演算子の「行列要素」を

$$\langle \psi_i | \hat{A} | \psi_j \rangle \equiv \langle \psi_i | \hat{A} \psi_j \rangle \equiv \langle \hat{A}^\dagger \psi_i | \psi_j \rangle \quad (7.3)$$

と定義できる。

行列の場合と同様に、 $\hat{A}^\dagger = \hat{A}$  のとき  $\hat{A}$  は Hermite 演算子と呼ばれる。

### [7.C] 波動関数の確率解釈 (Born)

量子力学における状態と観測量の解釈は次のように与えられる。

- 粒子のある時刻の状態は、波動関数  $\psi(x, y, z)$  によって記述され、
- 粒子が  $(x, y, z)$  に存在する確率は  $|\psi(x, y, z)|^2$  に比例する、
- 観測可能な物理量  $A$  は Hermite 演算子  $\hat{A}$  で記述され、その期待値は

$$\langle A \rangle = \frac{\langle \psi | \hat{A} | \psi \rangle}{\langle \psi | \psi \rangle} \quad (7.4)$$

で与えられる。(  $\langle \psi | \psi \rangle = \int \int \int dx dy dz |\psi|^2 = 1$  を満たすように波動関数を 1 に規格化しておけば、分母は不要になる。)

### [7.D] エネルギー、運動量演算子 (一般化された de Broglie の関係式)

物質波の波動関数が  $\psi(x)$  で与えられている場合、古典的なエネルギー、運動量は量子論では波動関数に作用する**演算子**で置き換えられる。

$$E \rightarrow i\hbar \frac{\partial}{\partial t}, \quad \mathbf{p} \rightarrow -i\hbar \nabla. \quad (7.5)$$

**7. 例題** (波束の速度と運動量演算子, 学生による解答可、ただし丁寧なやること)

一次元空間における自由粒子の波動関数は Schrödinger 方程式 (6.1)  $i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2}$  を満たす。このとき粒子の位置の期待値

$$\langle x \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dx \psi^*(x, t) x \psi(x, t) \quad (7.6)$$

の時間変化は

$$\frac{d\langle x \rangle}{dt} = -\frac{i\hbar}{m} \int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(x, t) \frac{\partial}{\partial x} \psi(x, t) dx = \frac{\langle p \rangle}{m} \quad (7.7)$$

$$\langle p \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dx \psi^*(x, t) \left( -i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \right) \psi(x, t) \quad (7.8)$$

となることを示せ。ただし、波動関数としては、 $x \rightarrow \pm\infty$  で、 $|\psi|^2$  が十分速く 0 になるものを考える。また、上の式では波動関数は 1 に規格化してあるものとする。このことから、運動量  $p$  を表すには、演算子

$$\hat{p} \equiv -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}$$

を用いればよいことが分かる。

[7.1] (エネルギー、運動量演算子 (一般化された de Broglie の関係式))

式 (7.5) で置き換えられたエネルギー、運動量の演算子を平面波  $\exp(ikx - i\omega t)$  に作用させると、 $E, p, \omega, k$  の間にどのような関係式がえられるか?

[7.2] (Hermite 演算子の固有関数)

行列の場合と同様に、演算子  $\hat{A}$  に対して、

$$\hat{A}\psi = a\psi \quad (7.9)$$

となる波動関数を演算子  $\hat{A}$  の固有関数という。Hermite 演算子に対しては、Hermite 行列の場合と同様に、その固有値は実数である。

(1)  $\psi(x_1, x_2, x_3)$  に作用する次の演算子が Hermite 演算子であることを示せ。ただし、波動関数  $\psi$  は連続であり、無限遠で十分速く 0 となるとする。

$$\hat{x}_i, \quad \hat{p}_i = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x_i}, \quad \hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + V(\hat{x}_i), \quad \hat{L}_i = \sum_{j,k} \epsilon_{ijk} \hat{x}_j \hat{p}_k$$

(2) 次の演算子の固有関数を求めよ。

$$\hat{x} = x, \quad \hat{p} = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}, \quad \hat{H}_0 = \frac{\hat{p}^2}{2m} \quad (7.10)$$

[7.3] (運動量  $p$  をとる確率)

波動関数のフーリエ変換 (の定数倍ずれたもの) が次のように与えられているとする。

$$\psi(x) = \int \frac{dp}{\sqrt{2\pi\hbar}} \exp(ipx/\hbar) f(p)$$

(1) この状態での運動量の期待値  $\langle p \rangle$  を  $f(p)$  で表せ。

(2) この状態での運動量の 2 乗の期待値  $\langle p^2 \rangle$  を  $f(p)$  で表せ。

(3) 上の 2 つの問題から運動量  $p$  をとる確率 (より正確には運動量が  $p \sim p + dp$  の値をとる確率) が  $f(p)$  によりどのように与えられるか推測せよ。

[7.4] (量子的揺らぎ)

波動関数の Fourier 変換  $g(k)$  ( $k = p/\hbar$ ) が  $t = 0$  において Gauss 型、

$$g(k) = (a/\sqrt{\pi})^{1/2} \exp(-a^2(k - k_0)^2/2) \quad (7.11)$$

で与えられる場合について考える。

(1) 時刻  $t$  において

$$\begin{aligned}\langle x \rangle, \quad \Delta x &\equiv \sqrt{\langle (x - \langle x \rangle)^2 \rangle}, \\ \langle p \rangle, \quad \Delta p &\equiv \sqrt{\langle (p - \langle p \rangle)^2 \rangle}\end{aligned}$$

を求めよ. (その波動関数は問題 [5.4] で求められている。) また, その物理的な解釈を述べよ. ( $\hat{p}$  に関する量を計算するには,  $p$  表示が便利である.)

(2) 時刻  $t$  において, 不確定性関係が成り立っていることを示せ。

[7.5] (不確定性関係)

$\Delta x^2 = \langle (x - \langle x \rangle)^2 \rangle, \Delta p^2 = \langle (p - \langle p \rangle)^2 \rangle$  に対して, 不確定性関係

$$\Delta x \Delta p \geq \hbar/2 \quad (7.12)$$

を証明せよ. また, 等号の成立条件を求めよ.

(ヒント:  $\hat{A} = \hat{x} - \langle x \rangle, \hat{B} = \hat{p} - \langle p \rangle$  とおくと,  $[\hat{A}, \hat{B}] = i\hbar$  となる. このとき, 任意の  $t$  に対して,  $\langle (\hat{A} + it\hat{B})\psi | (\hat{A} + it\hat{B})\psi \rangle \geq 0$  (あるいは, Schwarz の不等式) を利用せよ.)

[7.6] (最小波束\*)

$\Delta x \Delta p$  の最小値を実現する波動関数 (最小波束) が一般に次の形に表されることを示せ.

$$\psi(x) = \left(\frac{\Delta^2}{\pi}\right)^{1/4} \exp\left[-\frac{\Delta^2}{2}(x - x_0)^2 + \frac{i}{\hbar} p_0 x\right] \quad (7.13)$$

[7.7] (角度の不確定性関係\*)

不確定性関係は角度と角運動量に対しては成り立たないことを示そう.  $0 \leq \theta < 2\pi$  で定義された関数  $f(\theta)$  に対して, 角運動量を  $\hat{L} = -i\hbar \frac{\partial}{\partial \theta}$  と定義する. ただし,  $f$  は規格化されており ( $\int_0^{2\pi} |f(\theta)|^2 d\theta = 1$ ), 周期境界条件  $f(0) = f(2\pi)$  を満たしているとする. このとき, 次のことを示せ.

(1) 次の関係を示せ。

$$\langle \theta f | \hat{L} f \rangle - \langle \hat{L} f | \theta f \rangle = \langle f | i\hbar | f \rangle - 2\pi i\hbar |f(0)|^2$$

(2) 上の関係を利用して, 次の角度と角運動量に対する不確定性関係を示せ。

$$(\Delta\theta)^2 (\Delta L)^2 \geq \frac{\hbar^2}{4} \left(1 - 2\pi |f(0)|^2\right)^2$$

[7.8] (箱により規格化された場合の運動量演算子のエルミート性\*)

平面波は全空間を考えた場合には規格化できないため, まず, ある限られた空間 ( $0 \leq x < L$ ) において考えた後にこの空間の大きさを無限大とする考え方がしばしば用いられる (Box normalization). この場合にも運動量演算子がエルミートであることを示しておこう. ただし, 波動関数に関する境界条件を周期的にとるものとする。

$$\phi(L) = \phi(0), \quad \psi(L) = \psi(0),$$

(1) 上の条件のもとで, 次の関係式 ( $\hat{p}$  がエルミートであること) を示せ。

$$\langle \hat{p}\phi | \psi \rangle = \langle \phi | \hat{p}\psi \rangle$$

(2) 同じ条件のもとで, 次の関係式を示せ。

$$\langle \hat{x}\phi | \hat{p}\psi \rangle - \langle \hat{p}\phi | \hat{x}\psi \rangle = i\hbar \langle \phi | \psi \rangle - i\hbar L \phi^*(0) \psi(0)$$

- (3) 境界条件として  $x = 0, L$  で波動関数が 0 となる条件を課せば、交換関係  $[\hat{x}, \hat{p}] = i\hbar$  になりたつ。この場合に運動量の固有状態を作ることができるか?

[7.9] (固有関数による展開 — 連続固有値\*)

連続固有値をもつ観測量 (Hermite 演算子)  $\hat{A}$  の規格化された固有関数  $u_a(x)$  により、波動関数  $\psi(x)$  を次のように展開する.

$$\psi(x) = \int da f(a) u_a(x) \quad (7.14)$$

ただし、連続的な固有値において規格化されているとは

$$\langle u_a | u_b \rangle = \int dx u_a^*(x) u_b(x) = \delta(a - b) \quad (7.15)$$

を満たすことをいう. このとき  $\psi(x)$  全体と  $f(a)$  全体を 1 対 1 に対応させて、  
 **$f(a)$  を  $A$  表示における波動関数**

と呼ぶ.

- (1) 波動関数 (7.14) における演算子  $\hat{A}$  の期待値を  $f(a)$  で表せ. これより観測量の値が  $a \sim a + da$  となる確率を  $f(a)$  で表せ.
- (2) 運動量演算子  $\hat{p}$  の (上の意味で規格化された) 固有関数を求めよ. また、これを用いて波動関数  $\psi(x)$  の  $p$  表示が、 $\psi(x)$  のフーリエ変換となっていることを示せ.
- (3) 位置演算子  $x$  の固有関数はどのように表せるか? また、この  $p$  表示を求めよ (= フーリエ変換を求めよ).
- (4)  $\psi(x), \phi(x)$  の  $p$  表示をそれぞれ  $f(p), g(p)$  とするとき,

$$\int_{-\infty}^{\infty} \phi^*(x) \hat{p} \psi(x) dx = \int_{-\infty}^{\infty} g^*(p) p f(p) dp \quad (7.16)$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} \phi^*(x) \hat{x} \psi(x) dx = \int_{-\infty}^{\infty} g^*(p) i\hbar \frac{d}{dp} f(p) dp \quad (7.17)$$

を証明せよ. (このことから,  $p$  表示に於ける  $\hat{p}, \hat{x}$  演算子はそれぞれ  $p, i\hbar d/dp$  となることが分かる.)

補足: 同様にして, もっと一般に  $F(z)$  を  $z$  の多項式とすると,

$$\int_{-\infty}^{\infty} \phi^*(x) F(-i\hbar \frac{d}{dx}) \psi(x) dx = \int_{-\infty}^{\infty} g^*(p) F(p) f(p) dp \quad (7.18)$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} \phi^*(x) F(x) \psi(x) dx = \int_{-\infty}^{\infty} g^*(p) F(i\hbar \frac{d}{dp}) f(p) dp \quad (7.19)$$

が成立することが分かる. 各自 Check せよ.

## 量子力学レポート問題 7.

[R7.1] (不確定性関係によるエネルギーの見積り)  
不確定性関係  $\Delta x \Delta p \geq \hbar/2$  を用いて、

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{m\omega^2}{2}\hat{x}^2 \quad (7.20)$$

で記述される 1 次元調和振動子において、エネルギーの下限值をもとめてみよう。

(1) 一般に、分散が 2 乗平均と平均値から次のように求められることを示せ。

$$\langle X^2 \rangle = \langle X \rangle^2 + \sigma^2(X)$$

- (2) (1) の結果を使って、上記の Hamiltonian の期待値を位置、運動量の期待値と分散 (  $\langle x \rangle, \langle p \rangle, \sigma^2(x) = (\Delta x)^2, \sigma^2(p) = (\Delta p)^2$  ) を用いて表せ。
- (3) 不確定性関係のみを用いて、(2) の Hamiltonian 期待値の下限を定めよ。またこの下限値をとるには、「不確定性関係で等号が成立すること」に加えてどのような条件が必要か？
- (4) 問題 [7.6] に示されるように、不確定性関係で等号が成立するのは波動関数がガウス波束となる場合である。問題 [7.6] で与えられた波動関数に対して位置、運動量の期待値と分散をもとめ、(3) で求められた条件が満たせるかどうか議論せよ。また満たせる場合には、そのときの  $x_0, p_0, \Delta$  の値を定めよ。