〈量子力学における演算子〉

§ 演算子

$\hat{A}$ 演算子（作用素） operator

☞ 状態を別の状態にうつす

$$\varphi(x) \longrightarrow \hat{A}\varphi(x) \quad (1)$$

$$|\varphi\rangle \longrightarrow \hat{A}|\varphi\rangle \quad (2)$$

☞ 線形性をみたす

$$\hat{A}\{\alpha|\varphi\rangle + \beta|\psi\rangle\} = \alpha\hat{A}|\varphi\rangle + \beta\hat{A}|\psi\rangle \quad (3)$$

なお $\hat{A} = \hat{B}$ とは

任意の $|\varphi\rangle$ について $\hat{A}|\varphi\rangle = \hat{B}|\varphi\rangle$ (4)

ということ

- $\alpha\hat{A}+\beta\hat{B}$ という演算子を

$$(\alpha\hat{A}+\beta\hat{B})|\varphi\rangle = \alpha\hat{A}|\varphi\rangle+\beta\hat{B}|\varphi\rangle \quad (1)$$

($|\varphi\rangle$は任意)　　で定ぎ

- $\hat{A}\hat{B}$ という演算子を

$$(\hat{A}\hat{B})|\varphi\rangle = \hat{A}(\hat{B}|\varphi\rangle) \quad (2)$$

($|\varphi\rangle$は任意)　　で定ぎ

ブラ状態への作用

$|\varphi\rangle$ と $\hat{A}|\psi\rangle$の 内積 $\langle\varphi|\hat{A}|\psi\rangle$

これを $\langle\varphi|\hat{A}$ と $|\psi\rangle$ を並べたもの

と見てもいいように $\langle\varphi|\hat{A}$ が

定ぎできる

演算子の行列要素

正規直交完全系 $\{|\psi_j\rangle\}_{j=1,2,\cdots}$

演算子 $\hat{A}$

$$a_{j,k} = \langle\psi_j|\hat{A}|\psi_k\rangle \in \mathbb{C} \qquad (1)$$

→ $\hat{A}$の行列要素

$j,k = 1,2,\cdots$

演算子は無限次元の行列!

§交換子

行列でもそうだった

$\hat{A}\hat{B}$ と $\hat{B}\hat{A}$ は一般に異なる

交換子 $[\hat{A}, \hat{B}] := \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}$ (1)

$[\hat{A}, \hat{B}] = 0$ なら $\begin{cases} \hat{A} \text{ と } \hat{B} \text{ は可換} \\ \hat{A} \text{ と } \hat{B} \text{ は交換する.} \end{cases}$ という

$$[\hat{A}, \hat{B}] = -[\hat{B}, \hat{A}] \quad (2)$$

線形性

$$[\hat{A}, \beta\hat{B} + \gamma\hat{C}] = \beta[\hat{A}, \hat{B}] + \gamma[\hat{A}, \hat{C}] \quad (3)$$

積との交換子

$$[\hat{A}, \hat{B}\hat{C}] = [\hat{A}, \hat{B}]\hat{C} + \hat{B}[\hat{A}, \hat{C}] \quad (1)$$

意外と便利

$$左辺 = \hat{A}\hat{B}\hat{C} - \hat{B}\hat{C}\hat{A} \quad (2)$$

$$右辺 = (\hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A})\hat{C} + \hat{B}(\hat{A}\hat{C} - \hat{C}\hat{A})$$

$$= \hat{A}\hat{B}\hat{C} - \hat{B}\hat{A}\hat{C} + \hat{B}\hat{A}\hat{C} - \hat{B}\hat{C}\hat{A} = 左辺. \quad (3)$$

一般化できる.

$$[\hat{A}, \hat{B}\hat{C}\hat{D}]$$

$$= [\hat{A}, \hat{B}]\hat{C}\hat{D} + \hat{B}[\hat{A}, \hat{C}]\hat{D} + \hat{B}\hat{C}[\hat{A}, \hat{D}] \quad (4)$$

(田 8.1.2 a を見よ)

§演算子の例

◎恒等演算子 $\hat{1}$

なにもかえない.

$$\hat{1}\varphi(\vec{r}) = \varphi(\vec{r}) \quad (1)$$

$$\hat{1}|\varphi\rangle = |\varphi\rangle \quad (2)$$

◎位置演算子 $\hat{x}$

$\varphi(x,y,z)$ を $x\varphi(x,y,z)$ にうつす.

(線形性

$$x\{\alpha\varphi(x,y,z)+\beta\psi(x,y,z)\}$$
$$=\alpha x\varphi(x,y,z)+\beta x\psi(x,y,z)$$)

(3)

演算子であることを強調して $\hat{x}$ と書く

$$|\varphi\rangle \longrightarrow \hat{x}|\varphi\rangle \quad (4)$$

($\hat{x}=x$ と思ってよい)

$$\varphi(x,y,z) \qquad x\varphi(x,y,z)$$

$\hat{y}, \hat{z}$ も同じ. まとめて $\hat{\vec{r}}=(\hat{x},\hat{y},\hat{z})$

▷かけ算演算子

$f(\boldsymbol{x})$：位置 $\boldsymbol{x}$ の関数（波動関数ではなく、何らかの与えられた関数）

$\hat{f}(\boldsymbol{x})$：$\varphi(\boldsymbol{x})$ を $f(\boldsymbol{x})\varphi(\boldsymbol{x})$ にうつす演算子

$$\varphi(\boldsymbol{x}) \to |\varphi\rangle \qquad f(\boldsymbol{x})\varphi(\boldsymbol{x}) \to \hat{f}(\boldsymbol{x})|\varphi\rangle$$

▷微分演算子

$\hat{D}_x$：$\varphi(\boldsymbol{x})$ を $\frac{\partial}{\partial x}\varphi(\boldsymbol{x})$ にうつす。

$$\varphi(\boldsymbol{x}) \to |\varphi\rangle \qquad \frac{\partial}{\partial x}\varphi(\boldsymbol{x}) \to \hat{D}_x|\varphi\rangle$$

$\hat{D}_x = \frac{\partial}{\partial x}$ と思っていい。

$\hat{D}_y$, $\hat{D}_z$ も同様

運動量演算子

$$\hat{\boldsymbol{p}} = (\hat{p}_x, \hat{p}_y, \hat{p}_z) \quad (1)$$

$$\hat{p}_x = -i\hbar\hat{D}_x, \quad \hat{p}_y = -i\hbar\hat{D}_y, \quad \hat{p}_z = -i\hbar\hat{D}_z \quad (2)$$

▷ 演算子の定義域について

実は $|\varphi\rangle$ が状態でも $\hat{A}|\varphi\rangle$ が状態になるとは限らない.

例 $\varphi(x)$ が $|x| \gg 1$ で $\varphi(x) \sim \dfrac{(\text{定数})}{x}$ (1)

R上の状態

$x\varphi(x) \sim$ 定数 (2)

よって $\displaystyle\int_{-\infty}^{\infty} dx\, |x\varphi(x)|^2 = \infty$ (3)

二乗可積分でない!

厳密な扱い → 教科書 付録A

演算子を定ぎするときは, 定義域をセットにして定める.

演算子は定義域の中の状態のみに作用.

- $D_{\hat{x}} = \left\{ |\varphi\rangle \,\middle|\, \displaystyle\int_{-\infty}^{\infty} dx\, |x\varphi(x)|^2 < \infty \right\}$ (4)

- 有限区間の系では, 境界条件が演算子の定義域を決める (Schr. 方程式の場合は $\hat{H}$)

▷位置と運動量の交換関係

任意の $\varphi(x,y,z)$ について

$$(\hat{x}\hat{p}_x - \hat{p}_x\hat{x})\varphi(x,y,z)$$

$$= -i\hbar\, x\frac{\partial}{\partial x}\varphi(x,y,z) + i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\{x\varphi(x,y,z)\}$$

$$= i\hbar\,\varphi(x,y,z) \quad (1)$$

これを $[\hat{x},\hat{p}_x] = i\hbar\,\underbrace{\hat{1}}_{\text{省略}}$ と書く (2)

一般に

$$\boxed{\begin{array}{lll} [\hat{x},\hat{p}_x] = i\hbar & [\hat{x},\hat{p}_y] = 0 & [\hat{x},\hat{p}_z] = 0 \\ [\hat{y},\hat{p}_x] = 0 & [\hat{y},\hat{p}_y] = i\hbar & [\hat{y},\hat{p}_z] = 0 \\ [\hat{z},\hat{p}_x] = 0 & [\hat{z},\hat{p}_y] = 0 & [\hat{z},\hat{p}_z] = i\hbar \end{array}}$$

(3)

$|\xi\rangle\langle\eta|$ という演算子

$|\xi\rangle, |\eta\rangle$ を(規格化された)状態

$|\xi\rangle\langle\eta|$ は $|\psi\rangle$ を $|\xi\rangle\underbrace{\langle\eta|\psi\rangle}_{\text{内積}}$ にうつす

正規直交完全系 $\{|\psi_j\rangle\}_{j=1,2,\cdots}$ は

$$\sum_{j=1}^{\infty}|\psi_j\rangle\langle\psi_j| = \hat{1} \qquad (1)$$

をみたす!

part2-p8-(4)

よって任意の演算子 $\hat{A}$

$$\hat{A} = \hat{1}\hat{A}\hat{1} = \left(\sum_j|\psi_j\rangle\langle\psi_j|\right)\hat{A}\left(\sum_k|\psi_k\rangle\langle\psi_k|\right)$$

$$= \sum_{j,k=1}^{\infty}|\psi_j\rangle\langle\psi_j|\hat{A}|\psi_k\rangle\langle\psi_k|$$

$\langle\psi_j|\hat{A}|\psi_k\rangle = a_{j,k}$ (行列要素)

$$= \sum_{j,k=1}^{\infty} a_{j,k}|\psi_j\rangle\langle\psi_k| \qquad (2)$$

§演算子の共役

$\hat{A}$：演算子

ある演算子 $\hat{A}^\dagger$ があって

任意の $|\varphi\rangle, |\psi\rangle$ に対して

$$\langle\varphi|\hat{A}|\psi\rangle^* = \langle\psi|\hat{A}^\dagger|\varphi\rangle \qquad (1)$$

となるとき $\hat{A}^\dagger$ を $\hat{A}$ の共役、という

明らかに

$$(\hat{A}^\dagger)^\dagger = \hat{A} \qquad (2)$$

$$(\alpha\hat{A} + \beta\hat{B})^\dagger = \alpha^*\hat{A}^\dagger + \beta^*\hat{B}^\dagger \qquad (3)$$

また

$$(\hat{A}\hat{B})^\dagger = \hat{B}^\dagger\hat{A}^\dagger \qquad (4)$$

も成り立つ（次のページで示す）

$|\xi\rangle = \hat{A}|\psi\rangle$ とする. (1)

$$\langle\varphi|\hat{A}|\psi\rangle^* = \langle\varphi|\xi\rangle^* = \langle\xi|\varphi\rangle \quad (2)$$

また

$$\langle\varphi|\hat{A}|\psi\rangle^* = \langle\psi|\hat{A}^\dagger|\varphi\rangle \quad (3)$$

よって $\langle\xi| = \langle\psi|\hat{A}^\dagger$ (4)

$\langle\xi| = (|\xi\rangle)^\dagger$ だから

$$\boxed{(\hat{A}|\psi\rangle)^\dagger = \langle\psi|\hat{A}^\dagger} \quad (5)$$

すごく自然

ここから $\|\hat{A}|\psi\rangle\|^2 = \langle\psi|\hat{A}^\dagger\hat{A}|\psi\rangle$ (6)

よく使う

また

$|\eta\rangle = \hat{B}|\psi\rangle$

$$\langle\varphi|\hat{A}\hat{B}|\psi\rangle^* = \langle\varphi|\hat{A}|\eta\rangle^* = \langle\eta|\hat{A}^\dagger|\varphi\rangle$$

$$= \langle\psi|\hat{B}^\dagger\hat{A}^\dagger|\varphi\rangle \quad (7)$$

よって $(\hat{A}\hat{B})^\dagger = \hat{B}^\dagger\hat{A}^\dagger$ (8)

▷ 演算子の共役の基本的な例

定ぎ $\langle \varphi | \hat{A} | \psi \rangle^* = \langle \psi | \hat{A}^\dagger | \varphi \rangle$ (1)

▷ 位置演算子

任意の $|\varphi\rangle$ と $|\psi\rangle$ について

$$\langle \varphi | \hat{x} | \psi \rangle = \int d^3r \, (\varphi(r))^* (x \, \psi(r)) \quad (2)$$

$$\langle \varphi | \hat{x} | \psi \rangle^* = \int d^3r \, \varphi(r) \, x \, (\psi(r))^*$$

$$= \int d^3r \, (\psi(r))^* (x \, \varphi(r))$$

$$= \langle \psi | \hat{x} | \varphi \rangle \quad (3)$$

つまり $\hat{x}^\dagger = \hat{x}$ (4)

◁ 微分演算子

任意の$|\varphi\rangle$と$|\psi\rangle$について

$$\langle\varphi|\hat{D}_x|\psi\rangle = \int d^3r\,(\varphi(r))^* \frac{\partial}{\partial x}\psi(r)$$

$$= -\int d^3r \left(\frac{\partial\varphi(r)}{\partial x}\right)^* \psi(r) \quad (1)$$

∴

$$\langle\varphi|\hat{D}_x|\psi\rangle^* = -\int d^3r\,(\psi(r))^* \frac{\partial\varphi(r)}{\partial x}$$

$$= -\langle\psi|\hat{D}_x|\varphi\rangle \quad (2)$$

よって $\hat{D}_x^\dagger = -\hat{D}_x$ (3)

◁ 背中合わせのやつ

$$\left(|\xi\rangle\langle\eta|\right)^\dagger = |\eta\rangle\langle\xi| \quad (4)$$

§自己共役演算子

$\hat{A} = \hat{A}^\dagger$ を満たす演算子

厳密な定義は付録A

(エルミート行列に対応)

例 $\hat{x} = \hat{x}^\dagger$ (1)

$\hat{p}_x = -i\hbar\hat{D}_x$ (2)

$(\alpha\hat{A})^\dagger = \alpha^*\hat{A}^\dagger$ (3)

$(\hat{p}_x)^\dagger = -(i\hbar)^*\hat{D}_x^\dagger = -i\hbar\hat{D}_x = \hat{p}_x$ (4)

同様に $\hat{x}, \hat{y}, \hat{z}, \hat{p}_x, \hat{p}_y, \hat{p}_z$ は自己共役

$f(\boldsymbol{r})$ が実関数なら $f(\hat{\boldsymbol{r}})$ も自己共役

また $\hat{A}, \hat{B}$ が自己共役なら $a, b \in \mathbb{R}$

$a\hat{A} + b\hat{B}$, $\hat{A}^n$ は自己共役 (5)

ポテンシャル $V(\boldsymbol{r})$ に対応するハミルトニアン

$$\hat{H} = \frac{\hat{\boldsymbol{p}}^2}{2m} + V(\hat{\boldsymbol{r}}) \quad (6)$$

も自己共役(ただし定義域をちゃんと決める)

境界条件

§ 射影演算子

$$\hat{P}^\dagger = \hat{P}, \quad \hat{P}^2 = \hat{P}$$ を満たす演算子 (1)

$|\psi\rangle$ 規格化された状態

状態 $|\psi\rangle$ への射影

(part 1-p10をみよ!)

$$\hat{P}_\psi = |\psi\rangle\langle\psi| \quad (2)$$

$$\hat{P}_\psi^\dagger = |\psi\rangle\langle\psi| \quad (3)$$

$$(\hat{P}_\psi)^2 = |\psi\rangle\langle\psi|\psi\rangle\langle\psi| = |\psi\rangle\langle\psi| = \hat{P}_\psi \quad (4)$$

互いに直交する n 個の規格化された状態の集まり

$$\{|\psi_1\rangle, \dots, |\psi_n\rangle\} \quad \langle\psi_j|\psi_k\rangle = \delta_{j,k} \quad (5)$$

$$\hat{P} = \sum_{j=1}^{n} |\psi_j\rangle\langle\psi_j| \quad (6)$$

$|\psi_1\rangle, \dots, |\psi_n\rangle$ の線形結合で書ける状態の空間への射影

§ユニタリー演算子

$$\hat{U}^\dagger \hat{U} = \hat{I} \quad (1), \qquad \hat{U}\hat{U}^\dagger = \hat{I} \quad (2)$$

の両方をみたす演算子。

(注: 行列の場合は $U^\dagger U = I$ なら自動的に
$UU^\dagger = I$ だったが、演算子ではそうならない!
→ 問8.2.1d)

任意の状態 $|\psi\rangle, |\varphi\rangle$

$$|\psi'\rangle = \hat{U}|\psi\rangle \quad (3), \qquad |\varphi'\rangle = \hat{U}|\varphi\rangle \quad (4)$$

よって

$$\langle\varphi'|\psi'\rangle = \langle\varphi|\hat{U}^\dagger \hat{U}|\psi\rangle$$

$$= \langle\varphi|\psi\rangle \quad (5)$$

ユニタリー演算子で変換すると内積(よってノルムも)は不変。

§自己共役演算子の固有値とスペクトル

「固有値っぽい量」

行列Aの固有値

d次方程式 $\det[A-\lambda I]=0$ (1) の解.

量子力学は $d=\infty$ に対応 det はない!!

自己共役演算子 $\hat{A}$ の固有値と固有状態

定義 $\lambda\in\mathbb{R}$ と状態 $|\psi\rangle$ について

$$\hat{A}|\psi\rangle=\lambda|\psi\rangle \quad (2)$$

なら $\begin{cases}\lambda \text{ は } \hat{A} \text{ の固有値} \\ |\psi\rangle \text{ は } \hat{A} \text{ の固有状態}\end{cases}$

行列とベクトルの場合と同じ

- 自己共役演算子の固有値はかならず実数

$$\lambda\langle\psi|\psi\rangle=\langle\psi|\hat{A}|\psi\rangle=\langle\psi|\hat{A}^\dagger|\psi\rangle^*=\langle\psi|\hat{A}|\psi\rangle^*=\lambda^*\langle\psi|\psi\rangle$$

- 自己共役演算子の異なる固有値に対応する固有状態は直交する

$$\hat{A}|\psi\rangle=\lambda|\psi\rangle,\ \hat{A}|\psi'\rangle=\lambda'|\psi'\rangle \quad \lambda\neq\lambda'$$

$$\langle\psi|\hat{A}|\psi'\rangle=\langle\psi'|\hat{A}|\psi\rangle^*=\lambda\langle\psi'|\psi\rangle^*=\lambda\langle\psi|\psi'\rangle$$

$$\langle\psi|\hat{A}|\psi'\rangle=\lambda'\langle\psi|\psi'\rangle \longrightarrow (\lambda-\lambda')\langle\psi|\psi'\rangle=0$$

自己共役演算子のスペクトル

定義 $\lambda \in \mathbb{R}$ と状態の列

$|\eta_1\rangle, |\eta_2\rangle, \ldots$ (ただし $\| \eta_n \| = 1$) があって

$$\lim_{n \uparrow \infty} \| (\hat{A} - \lambda) |\eta_n\rangle \| = 0 \quad (1)$$

のとき λ を $\hat{A}$ の $\boxed{\text{スペクトル}}$ という

▷ $\hat{A}$ の固有値 λ は必ずスペクトル

(すべての n について $|\eta_n\rangle = |\psi\rangle$ とする)

スペクトル $\begin{cases} \text{固有値 (離散スペクトル)} \\ \text{連続スペクトル} \end{cases}$

連続スペクトル: $\lim_{n \uparrow \infty} |\eta_n\rangle$ は存在しない

連続スペクトル: 「固有値っぽい」量

▷ $\hat{A}$ のスペクトルとは「$\hat{A}$ がとりうる値」

スペクトル集合 $\mathrm{spec}(\hat{A}) \subset \mathbb{R}$

$\mathrm{spec}(\hat{A})$: $\hat{A}$ のスペクトルすべての集合

▷具体例

例1: 無限の1次元での位置演算子 $\hat{x}$

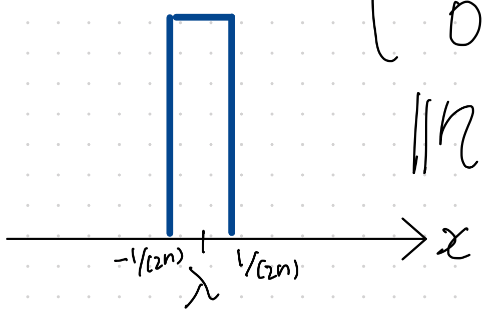
$\mathbb{R}$

$\mathrm{Spec}(\hat{x}) = \mathbb{R}$　すべての $\lambda \in \mathbb{R}$ が連続スペクトル

なぜか? 任意の λ に対して

$$\eta_n(x) = \begin{cases} \sqrt{n} & |x-\lambda| \leq \frac{1}{2n} \\ 0 & \text{それ以外} \end{cases} \qquad (1)$$

$\|\eta_n\| = 1$ をみたす.



$$\|\hat{A}|\varphi\rangle\|^2 = \langle\varphi|\hat{A}^\dagger\hat{A}|\varphi\rangle \qquad (2)$$

$$\|(\hat{x}-\lambda)|\eta_n\rangle\|^2 = \langle\eta_n|(\hat{x}-\lambda)^2|\eta_n\rangle$$

$$= \int_{-\infty}^{\infty} dx\,(x-\lambda)^2(\eta_n(x))^2 = n\int_{-\frac{1}{2n}}^{\frac{1}{2n}} dy\; y^2$$

$$= n\,\frac{y^3}{3}\Big|_{-1/(2n)}^{1/(2n)} = \frac{1}{12n^2} \xrightarrow[n\uparrow\infty]{} 0 \qquad (3)$$

よって λ は $\hat{x}$ のスペクトル

しかし λ は固有値ではない

- $\lim_{n\to\infty} \eta_n(x)$ は状態ではない.

- $\hat{x}|\psi\rangle = \lambda|\psi\rangle$ (1) なら

$$x\,\psi(x) = \lambda\,\psi(x) \quad (2)$$

$$(x-\lambda)\,\psi(x) = 0 \quad (3)$$

$$x \neq \lambda \text{ なら } \psi(x) = 0 \quad (4)$$

$\downarrow$

$\psi(x)$ が $\int dx\,|\psi(x)|^2 < \infty$ をみたすなら

すべての x について $\psi(x) = 0$ (5)

(と実質的に同じ)

(注　デルタ関数は「まともな関数」ではないし, $\int dx\,|\psi(x)|^2 = 1$ (6) ともならない)

例2：無限の1次元での運動量演算子 $\hat{p}$

$\mathrm{spec}(\hat{p}) = \mathbb{R}$　すべての $\lambda \in \mathbb{R}$ が連続スペクトル

なぜか？　$n = 1, 2, \cdots$ について $f_n(x) \geq 0$ を

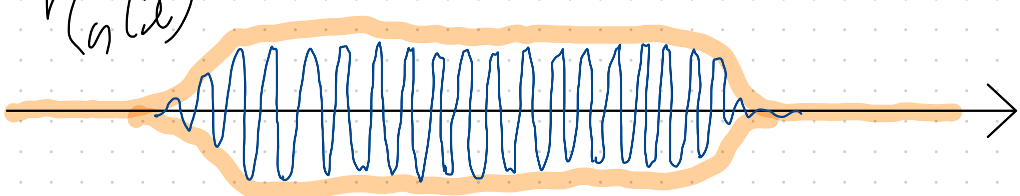
$$\int_{-\infty}^{\infty} dx \left(f_n(x)\right)^2 = 1 \quad (1)$$ と定ぎ

すると $\displaystyle\int_{-\infty}^{\infty} dx \left(f_n'(x)\right)^2 = O\left(\frac{1}{n}\right)$ (2) となる.

任意の λ について

$$\eta_n(x) = f_n(x)\, \underbrace{e^{i\frac{\lambda}{\hbar}x}}_{平面波} \quad (3)$$

ととる.



$$\|(\hat{p}-\lambda)|\eta_n\rangle\| = ? \quad (1)$$

まず$(\hat{p}-\lambda)|\eta_n\rangle$をみる.

$$\left(-i\hbar\frac{d}{dx}-\lambda\right)f_n(x)e^{i\frac{\lambda}{\hbar}x}$$
$$= -i\hbar f_n'(x)e^{i\frac{\lambda}{\hbar}x} \quad (2)$$

よって

$$\|(\hat{p}-\lambda)|\eta_n\rangle\|^2 = \hbar^2\int_{-\infty}^{\infty}dx\,|f_n'(x)|^2 = O\left(\frac{1}{n}\right) \quad (3)$$

つまり $\lim_{n\to\infty}\|(\hat{p}-\lambda)|\eta_n\rangle\| = 0 \quad (4)$

よって $\lambda \in \mathrm{spec}(\hat{p}) \quad (5)$

しかし λは固有値ではない

任意のxについて $\lim_{n\to\infty}\eta_n(x) = 0 \quad (6)$

例3：1次元周期境界での運動量演算子 $\hat{p}$

区間 $[0, L]$

周期境界条件 $\psi(0) = \psi(L)$ (1)

$$\hat{p}|\psi\rangle = \lambda|\psi\rangle \quad (2)$$

$$-i\hbar\psi'(x) = \lambda\psi(x) \quad (3)$$

$$\psi(x) = \frac{1}{\sqrt{L}} e^{i\frac{\lambda}{\hbar}x} \quad (4)$$

ただし $\frac{\lambda}{\hbar}L = 2\pi n \quad (n \in \mathbb{Z})$ (5)

$$\mathrm{spec}(\hat{p}) = \left\{ \frac{2\pi\hbar}{L} n \;\middle|\; n = 0, \pm 1, \pm 2, \cdots \right\} \quad (6)$$

すべての要素が固有値．

同じ $\hat{p}$ でもスペクトル $\mathrm{spec}(\hat{p})$ は境界条件に依存する．

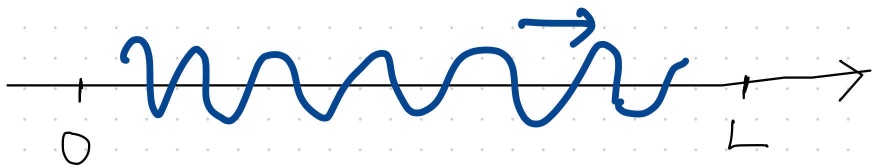
定義域

例4：1次元ゼロ境界での運動量演算子 $\hat{p}$

区間 $[0, L]$

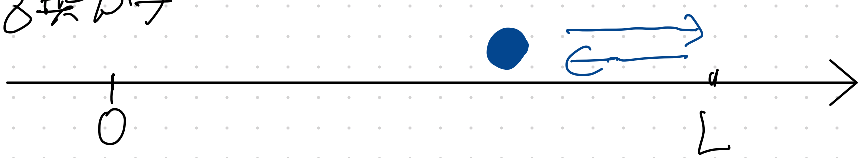
ゼロ境界条件 $\varphi(0)=0,\ \varphi(L)=0$ (1)

この場合は，$\mathrm{spec}(\hat{p}) = \phi$ ← 空集合!!



進んでいく平面波はつくれない！

古典力学



$\hat{p}$ が定まった値をとることはあり得ない！

（注意：この境界条件では $\hat{p}$ は
エルミートだが自己共役ではない。）
→ 付録A

§自己共役演算子の固有値・固有状態についての基本定理

定理 $\hat{A}$ 自己共役演算子

$\mathrm{spec}(\hat{A}) = \{a_1, a_2, \cdots\}$ の要素が全て固有値なら

$\{|\psi_j\rangle\}_{j=1,2,\cdots}$ が正規直交完全系になるように

固有状態 $|\psi_j\rangle$ (もちろん $\hat{A}|\psi_j\rangle = a_j|\psi_j\rangle$)

を選ぶことができる。

証明はガチ数学

きわめて一般的で多くの例で使える!

これまで知っていた例(と少し新しいもの)

- $\hat{p}$, 周期境界
- $\hat{H} = \dfrac{\hat{p}^2}{2m} + V(\hat{x})$ (1) $|V(x)| \le V_0$ をみたす 有限区間 周期境界, ゼロ境界
- $\hat{H} = \dfrac{\hat{p}^2}{2m} + \dfrac{m\omega^2}{2}\hat{x}^2$ (2) 1次元全体

自己共役演算子のスペクトル分解

$\hat{A}$ 自己共役, spec$(\hat{A})$の要素はすべて固有値

固有状態を集めた $\{|\psi_j\rangle\}_{j=1,2,\cdots}$ は

正規直交完全系.

$$\hat{1} = \sum_{j=1}^{\infty} |\psi_j\rangle\langle\psi_j| \qquad (1)$$

よって

$$\hat{A} = \hat{A}\hat{1} = \sum_{j=1}^{\infty} \hat{A}|\psi_j\rangle\langle\psi_j|$$

$\hat{A}|\psi_j\rangle = a_j|\psi_j\rangle$

a_j は $\hat{A}$ の固有値

$$= \sum_{j=1}^{\infty} a_j |\psi_j\rangle\langle\psi_j| \qquad (2)$$

$\hat{A}$ のスペクトル分解

(行列の対角化に相当)

参 p10-(2)

$$\hat{A} = \sum_{j,k=1}^{\infty} a_{j,k} |\psi_j\rangle\langle\psi_k| \qquad (3)$$

$a_{j,k}$: $\hat{A}$ の行列要素

$\{|\psi_j\rangle\}_{j=1,2\cdots}$ は任意の正規直交完全系

定理 $\hat{A}, \hat{B}$ 自己共役,

$[\hat{A}, \hat{B}] = 0$ (1)

$\mathrm{spec}(\hat{A}), \mathrm{spec}(\hat{B})$ の要素がすべて固有値なら

正規直交完全系 $\{|\psi_j\rangle\}_{j=1,2,\dots}$ があって

$$\hat{A}|\psi_j\rangle = a_j|\psi_j\rangle \quad (2)$$

$$\hat{B}|\psi_j\rangle = b_j|\psi_j\rangle \quad (3)$$

$|\psi_j\rangle$ は $\hat{A}$ と $\hat{B}$ の同時固有状態