物質情報学5（量子力学），担当 谷村省吾，講義ノート3

# 物理量を表す演算子

量子力学では系の状態はヒルベルト空間のベクトルで表され，系の物理量は**ヒルベルト空間上の演算子**で表される．とくにエルミート演算子は，固有値が実数であり，異なる固有値に属する固有ベクトルが直交し，固有ベクトル全部を集めたものが基底（完全系）になるという著しい性質を持ち，そのおかげで物理的な意味付けができる．

## 演算子

ヒルベルト空間 $\mathscr{H}$ に対して任意のベクトル $|\psi\rangle \in \mathscr{H}$ をベクトル $\hat{A}|\psi\rangle \in \mathscr{H}$ に移す写像 $A : \mathscr{H} \to \mathscr{H}$ が任意の $|\psi_1\rangle, |\psi_2\rangle, |\psi\rangle \in \mathscr{H}$ と任意の $c \in \mathbb{C}$ に対して

$$\hat{A}(|\psi_1\rangle + |\psi_2\rangle) = \hat{A}|\psi_1\rangle + \hat{A}|\psi_2\rangle \quad (1)$$

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

を満たしているとき，$\hat{A}$ を $\mathscr{H}$ 上の線形演算子あるいはたんに**演算子** (operator) という．

とくに任意のベクトル $|\psi\rangle \in \mathscr{H}$ に対して

$$\hat{I}|\psi\rangle := |\psi\rangle \quad (3)$$

で定められる写像 $\hat{I} : \mathscr{H} \to \mathscr{H}$ を**恒等演算子** (identity operator) または**単位演算子** (unit operator) という．

演算子同士の和 $\hat{A}+\hat{B}$ や，演算子のスカラー倍 $c\hat{A}$，演算子同士の積 $\hat{A}\hat{B}$ が定義できる．しかし，一般に $\hat{A}\hat{B}$ と $\hat{B}\hat{A}$ は等しくない．$\hat{A}\hat{B}$ と $\hat{B}\hat{A}$ の「等しくない度合い」を測るものとして

$$[\hat{A}, \hat{B}] := \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A} \quad (4)$$

を定め，$[\hat{A}, \hat{B}]$ を $\hat{A}$ と $\hat{B}$ の**交換子** (commutator) という．また，

$$\{\hat{A}, \hat{B}\} := \hat{A}\hat{B} + \hat{B}\hat{A} \quad (5)$$

を $\hat{A}$ と $\hat{B}$ の**反交換子** (anti-commutator) という．

例．$n$ 行 $n$ 列の複素数行列は，ヒルベルト空間 $\mathscr{H} = \mathbb{C}^n$ 上の演算子である．この場合，演算子の和・スカラー倍・積は，行列の和・スカラー倍・積に他ならない．

例．実数値関数 $V(x)$ が与えられれば，関数空間 $L^2(\mathbb{R})$ において関数 $V(x)$ による**掛け算演算子** (multiplicative operator) $\hat{V}$ が

$$\hat{V}\psi(x) := V(x)\psi(x) \quad (6)$$

で定められる．とくに $x$ 座標の値を掛け算する演算子 $\hat{X}$ が

$$\hat{X}\psi(x) := x \cdot \psi(x) \quad (7)$$

で定まるが，この $X$ を**位置演算子** (position operator) という．

例．関数空間 $L^2(\mathbb{R})$ において**運動量演算子** (momentum operator) $\hat{P}$ を

$$\hat{P}\psi(x) := -i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial x} \quad (8)$$

で定める．ここで $\hbar$ は**プランク定数** (Planck constant) と呼ばれる定数で，その値は

$$\hbar = \frac{h}{2\pi} \quad (9)$$

$$h = 6.63 \times 10^{-34} \mathrm{m}^2 \cdot \mathrm{kg} \cdot \mathrm{s}^{-1} \quad (10)$$

**問 1**．プランク定数の次元は（質量×速度×長さ）の次元と一致することを確認せよ．また，（エネルギー×時間）の次元とも一致することを確認せよ．

**問 2**. $\hat{X}$ と $\hat{P}$ の交換子が

$$[\hat{X}, \hat{P}] = i\hbar\hat{I} \tag{11}$$

となることを証明せよ．この関係式 (11) を**正準交換関係** (canonical commutation relation) という．

## エルミート演算子

任意のベクトル $|\chi\rangle, |\psi\rangle \in \mathscr{H}$ に対して

$$\langle\chi|\hat{A}^\dagger|\psi\rangle = \langle\psi|\hat{A}|\chi\rangle^* \tag{12}$$

を満たすような演算子 $\hat{A}^\dagger$ を $\hat{A}$ の**エルミート共役** (Hermite conjugate) という．

例．ヒルベルト空間 $\mathscr{H} = \mathbb{C}^n$ 上の演算子のエルミート共役は，行列のエルミート共役，すなわち転置行列の複素共役である．

$\hat{A}^\dagger = \hat{A}$ を満たすような演算子 $\hat{A}$ を**自己共役演算子** (self-adjoint operator) あるいは**エルミート演算子** (Hermite operator, Hermitian) という．言い換えると，自己共役演算子とは，任意のベクトル $|\chi\rangle, |\psi\rangle \in \mathscr{H}$ に対して

$$\langle\chi|\hat{A}|\psi\rangle = \langle\psi|\hat{A}|\chi\rangle^* \tag{13}$$

が成り立つような演算子 $\hat{A}$ のことである．

$\hat{A}^\dagger = -\hat{A}$ を満たすような演算子 $\hat{A}$ を**反自己共役演算子** (anti-self-adjoint operator) あるいは**反エルミート演算子** (anti-Hermite operator) という．

**問 3**. エルミート共役の性質

$$(\hat{A} + \hat{B})^\dagger = \hat{A}^\dagger + \hat{B}^\dagger \tag{14}$$

$$(c\hat{A})^\dagger = c^*\hat{A}^\dagger \tag{15}$$

$$(\hat{A}\hat{B})^\dagger = \hat{B}^\dagger\hat{A}^\dagger \tag{16}$$

$$[\hat{A}, \hat{B}]^\dagger = -[\hat{A}^\dagger, \hat{B}^\dagger] \tag{17}$$

$$(\hat{A}^\dagger)^\dagger = \hat{A} \tag{18}$$

を証明せよ．

**問 4**. $\mathbb{C}^n$ 上の行列 $\hat{A}$ の転置行列の複素共役を $\hat{A}^\dagger$ とすると性質 (12) が成立することを確認せよ．

**問 5**. 運動量演算子 $\hat{P}$ が自己共役演算子であることを確認せよ．すなわち，任意の波動関数 $\psi_1(x), \psi_2(x)$ に対して

$$\langle\psi_1|\hat{P}|\psi_2\rangle = -i\hbar\int_{-\infty}^{\infty}\psi_1^*(x)\frac{\partial\psi_2(x)}{\partial x}\,dx \tag{19}$$

とおいたとき，

$$\langle\psi_2|\hat{P}|\psi_1\rangle = \langle\psi_1|\hat{P}|\psi_2\rangle^* \tag{20}$$

が成立することを示せ．

## 演算子の固有値

演算子 $\hat{A}$ に対して

$$\hat{A}|v\rangle = \lambda|v\rangle \tag{21}$$

を満たすようなベクトル $|v\rangle \in \mathscr{H}$ $(|v\rangle \neq 0)$ と複素数 $\lambda \in \mathbb{C}$ があった場合，$\lambda$ を演算子 $\hat{A}$ の**固有値** (eigenvalue) といい，$|v\rangle$ を固有値 $\lambda$ に属する**固有ベクトル** (eigenvector) という．

例題:固有値問題の解き方を実演しよう．行列

$$\hat{A} = \begin{pmatrix} 3 & -1 \\ 2 & 6 \end{pmatrix} \tag{22}$$

は自己共役か否か判定し，の固有値と固有ベクトルをすべて求める．$\hat{A}$ のエルミート共役

$$\hat{A}^\dagger = \begin{pmatrix} 3 & 2 \\ -1 & 6 \end{pmatrix} \tag{23}$$

は $\hat{A}$ に等しくないので，$\hat{A}$ は自己共役ではない．$\lambda$ を未知変数として

$$\lambda\hat{I} - \hat{A} = \begin{pmatrix} \lambda - 3 & 1 \\ -2 & \lambda - 6 \end{pmatrix} \tag{24}$$

という行列を作り，これの行列式が零になることを要請して固有値方程式を立てて解く：

$$\begin{aligned}\det(\lambda\hat{I}-\hat{A}) &= (\lambda-3)(\lambda-6)-1\cdot(-2)\\ &= \lambda^2-9\lambda+18+2\\ &= \lambda^2-9\lambda+20\\ &= (\lambda-4)(\lambda-5) \;=\; 0 \end{aligned}\tag{25}$$

この方程式の解 $\lambda=4,5$ が $\hat{A}$ の固有値である．固有値 $\lambda_1=4$ に対する固有ベクトル $|v_1\rangle$ は $\hat{A}|v_1\rangle=\lambda_1|v_1\rangle$ すなわち $(\lambda_1\hat{I}-\hat{A})|v_1\rangle=0$ を満たすことが要請される：

$$\begin{aligned}(\lambda_1\hat{I}-\hat{A})|v_1\rangle &= \begin{pmatrix}4-3 & 1\\ -2 & 4-6\end{pmatrix}|v_1\rangle\\ &= \begin{pmatrix}1 & 1\\ -2 & -2\end{pmatrix}|v_1\rangle \;=0.\end{aligned}\tag{26}$$

これを満たす $|v_1\rangle$ は

$$|v_1\rangle=c_1\begin{pmatrix}1\\-1\end{pmatrix}\tag{27}$$

である．ここで $c_1$ は任意の複素数である．同様に，固有値 $\lambda_2=5$ に対する固有ベクトル $|v_2\rangle$ は

$$\begin{aligned}(\lambda_2\hat{I}-\hat{A})|v_2\rangle &= \begin{pmatrix}5-3 & 1\\ -2 & 5-6\end{pmatrix}|v_2\rangle\\ &= \begin{pmatrix}2 & 1\\ -2 & -1\end{pmatrix}|v_2\rangle \;=0\end{aligned}\tag{28}$$

を満たすべきであり，これにあてはまる $|v_2\rangle$ は

$$|v_2\rangle=c_2\begin{pmatrix}1\\-2\end{pmatrix}\tag{29}$$

である．ここで $c_2$ は任意の複素数である．まとめると，(22) 式の行列 $\hat{A}$ の固有値・固有ベクトルは

$$\lambda_1=4,\quad |v_1\rangle=c_1\begin{pmatrix}1\\-1\end{pmatrix}\tag{30}$$

$$\lambda_2=5,\quad |v_2\rangle=c_2\begin{pmatrix}1\\-2\end{pmatrix}\tag{31}$$

である．念のため，固有ベクトルの内積を求めると

$$\begin{aligned}\langle v_1|v_1\rangle &= |c_1|^2\{|1|^2+|-1|^2\}=2\,|c_1|^2\\ \langle v_2|v_2\rangle &= |c_2|^2\{|1|^2+|-2|^2\}=5\,|c_2|^2\\ \langle v_1|v_2\rangle &= c_1^*c_2\{1^*\,1+(-1)^*(-2)\}=3\,c_1^*c_2\end{aligned}$$

となる．この $\hat{A}$ は自己共役ではないので，異なる固有値に対する固有ベクトル $v_1,v_2$ は直交しない．

**問 6**. $\mathbb{C}^n$ 上の行列 $\hat{A}$ に対して，

$$\det(\lambda\hat{I}-\hat{A})=0\tag{32}$$

は複素数 $\lambda$ が演算子 $\hat{A}$ の固有値であるための必要十分条件であることを証明せよ．

**問 7**. 次の行列は自己共役かそうでないか，判定せよ．また，各行列の固有値と固有ベクトルをすべて求めよ．各行列の固有ベクトルを $|v_j\rangle$ $(j=1,2,\cdots)$ としたとき，内積 $\langle v_j|v_k\rangle$ を求めよ．

$$\hat{A}=\begin{pmatrix}2 & 3-4i\\ 3+4i & 2\end{pmatrix}\tag{33}$$

$$\hat{B}=\begin{pmatrix}-1 & 1\\ -6 & 4\end{pmatrix}\tag{34}$$

$$\hat{C}=\begin{pmatrix}-9+8i & 36-24i\\ -3+2i & 12-6i\end{pmatrix}\tag{35}$$

$$\hat{D}=\begin{pmatrix}-1 & 8\\ -2 & 7\end{pmatrix}\tag{36}$$

$$\hat{E}=\begin{pmatrix}-4 & -1 & -7\\ 2 & 2 & 2\\ 4 & 1 & 7\end{pmatrix}\tag{37}$$

$$\hat{F}=\begin{pmatrix}2 & -1 & 2\\ -1 & 2 & 2\\ 2 & 2 & -1\end{pmatrix}\tag{38}$$

$$\hat{G}=\begin{pmatrix}2 & 1 & 0 & 1\\ 1 & 2 & 1 & 0\\ 0 & 1 & 2 & 1\\ 1 & 0 & 1 & 2\end{pmatrix}\tag{39}$$

自己共役演算子には次のような著しい性質がある．(i) **自己共役演算子の固有値はすべて実数である．**(ii) **異なる固有値に属する固有ベクトルは直交する．**(iii) **固有ベクトルの集合で $\mathscr{H}$ の基底を作ることができる．**逆に，これら (i), (ii), (iii) の性質を備えた演算子は自己共役演算子になる．

**問** 8．上に述べた自己共役演算子の性質 (i), (ii) を証明せよ．

自己共役演算子 $\hat{A}$ の固有値 $\lambda$ に属する固有ベクトルとは $\hat{A}|v\rangle = \lambda|v\rangle$ を満たすベクトル $|v\rangle$ のことだが，同一の固有値 $\lambda$ に対する固有ベクトルが $\{|v_\lambda^{(1)}\rangle, \cdots, |v_\lambda^{(k)}\rangle\}$ のように複数個あることもある．そのような場合も

$$\langle v_\lambda^{(r)}|v_\lambda^{(s)}\rangle = \delta_{rs} \tag{40}$$

となるように固有ベクトルを選ぶことができる．一つの固有値 $\lambda$ に属する一次独立な固有ベクトルが $k$ 個あり，$k+1$ 個はない場合，固有値 $\lambda$ は $k$ 重に**縮退** (degenerate) しているという．

上の (iii) で述べたように，自己共役作用素の固有ベクトルを集めたものはヒルベルト空間の基底をなす．つまり，任意のベクトル $|\psi\rangle \in \mathscr{H}$ に対して

$$|\psi\rangle = \sum_\lambda \sum_{r=1}^{k} c_\lambda^{(r)} |v_\lambda^{(r)}\rangle \tag{41}$$

となるような複素数 $c_\lambda^{(r)}$ が一意的に存在し，展開係数に関しては，正規直交基底による展開と同様に

$$c_\lambda^{(r)} = \langle v_\lambda^{(r)}|\psi\rangle \tag{42}$$

が成り立つ．

# 固有値と測定値の関係

前節で述べた自己共役演算子の性質は純粋に数学的な事実だが，量子力学ではさらに次のような解釈を加える．

**自己共役演算子 $\hat{A}$ で表される物理量が取り得る値（測定値）は，$\hat{A}$ の固有値のどれかである．**つまり，量子力学では，物理量は演算子で表され，物理量の値は演算子の固有値で表される．

**系の状態が規格化されたベクトル $|\psi\rangle \in \mathscr{H}$ で表されているとき，物理量 $\hat{A}$ を測ったときに測定値として $\lambda$ を得る確率は**

$$\mathrm{Prob}(\hat{A} = \lambda|\psi) \;=\; \sum_{r=1}^{k} \left|\langle v_\lambda^{(r)}|\psi\rangle\right|^2 \tag{43}$$

**に等しい．**この式を**ボルンの確率公式**という．ここで $\{v_\lambda^{(1)}, \cdots, v_\lambda^{(k)}\}$ は (40) 式のところで述べた規格直交固有ベクトルの組である．

したがって，系の状態ベクトルが $\hat{A}$ の固有値 $\lambda$ に属する固有ベクトルであれば，$\hat{A}$ を測ったとき 100 パーセント確実に測定値 $\lambda$ を得る．

しかし，**系の状態ベクトルが固有ベクトルではない場合は，同じ状態ベクトルの系を多数用意して物理量 $\hat{A}$ を測ると，$\hat{A}$ の固有値のいずれかが測定値として得られるが，測定値は一定ではなく，確率 (43) の頻度で測定値 $\lambda$ が現れる**．そのような測定を繰り返した場合，測定値の**平均値** (average) は

$$\langle\hat{A}\rangle \;:=\; \sum_\lambda \lambda \cdot \mathrm{Prob}(\hat{A} = \lambda|\psi) \tag{44}$$

で定義されるが，これは

$$\langle\hat{A}\rangle \;=\; \langle\psi|\hat{A}|\psi\rangle \tag{45}$$

と一致する（具体的な計算のしかたは (51) 式を参照）．この式 (45) を状態 $|\psi\rangle$ における物理量 $\hat{A}$ の**期待値** (expectation value) という．平均値と期待値は同義である．ただ，計算方法が (44) と (45) の 2 通りがある．

**問 9**．確率公式 (43) と平均値の定義式 (44) を用いて定められる $\langle \hat{A} \rangle$ と，(45) とが等しいことを証明せよ．

**問 10**．$\hat{A}^\dagger = \hat{A}$ ならば $\langle \psi | \hat{A} | \psi \rangle$ は実数になることを証明せよ．また，$\hat{A}^\dagger = -\hat{A}$ ならば $\langle \psi | \hat{A} | \psi \rangle$ は純虚数になることを証明せよ．

例題：行列

$$\hat{A} = \begin{pmatrix} 5 & 1 \\ 1 & 5 \end{pmatrix} \tag{46}$$

の固有値と規格化された固有ベクトルは

$$a_1 = 6, \quad |v_1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} \tag{47}$$

$$a_2 = 4, \quad |v_2\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix} \tag{48}$$

である．規格化された状態ベクトル

$$|\psi\rangle = \frac{1}{5} \begin{pmatrix} 3 \\ 4 \end{pmatrix} \tag{49}$$

において物理量 $\hat{A}$ を測ったときに測定値 $a_1 = 6$ を得る確率は，ボルンの確率公式 (43) より

$$\begin{aligned} \mathrm{Prob}(\hat{A} = 6|\psi) &= \left| \langle v_1 | \psi \rangle \right|^2 \\ &= \left| \frac{1}{5\sqrt{2}}(3+4) \right|^2 = \frac{49}{50} \end{aligned}$$

となる．同様に，状態ベクトル $|\psi\rangle$ において物理量 $\hat{A}$ を測ったときに測定値 $a_2 = 4$ を得る確率は，

$$\begin{aligned} \mathrm{Prob}(\hat{A} = 4|\psi) &= \left| \langle v_2 | \psi \rangle \right|^2 \\ &= \left| \frac{1}{5\sqrt{2}}(3-4) \right|^2 = \frac{1}{50} \end{aligned}$$

となる．これらより，$\hat{A}$ の平均値は

$$\begin{aligned} &\langle \hat{A} \rangle \\ =\ & 6 \times \mathrm{Prob}(\hat{A} = 6|\psi) + 4 \times \mathrm{Prob}(\hat{A} = 4|\psi) \\ =\ & 6 \times \frac{49}{50} + 4 \times \frac{1}{50} = \frac{298}{50} = \frac{149}{25} \end{aligned} \tag{50}$$

となる．また，

$$\begin{aligned} & |v_1\rangle\langle v_1|\psi\rangle + |v_2\rangle\langle v_2|\psi\rangle \\ =\ & \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} \cdot \frac{7}{5\sqrt{2}} + \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix} \cdot \frac{-1}{5\sqrt{2}} \\ =\ & \frac{7}{10} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} - \frac{1}{10} \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix} \\ =\ & \frac{1}{10} \begin{pmatrix} 6 \\ 8 \end{pmatrix} = \frac{1}{5} \begin{pmatrix} 3 \\ 4 \end{pmatrix} = |\psi\rangle \end{aligned}$$

となり，展開公式 (41), (42) が正しいことが確認できる．

また，(45) を定義どおり計算してみると，

$$\begin{aligned} \langle \psi | \hat{A} | \psi \rangle &= \frac{1}{5} \cdot \frac{1}{5} (3, 4) \begin{pmatrix} 5 & 1 \\ 1 & 5 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 3 \\ 4 \end{pmatrix} \\ &= \frac{1}{25} (3, 4) \begin{pmatrix} 15 + 4 \\ 3 + 20 \end{pmatrix} \\ &= \frac{1}{25} (3 \cdot 19 + 4 \cdot 23) \\ &= \frac{149}{25} \end{aligned} \tag{51}$$

となり，(50) で計算した結果と一致する．

また，行列

$$\hat{B} = \begin{pmatrix} 8 & -3i \\ 3i & 8 \end{pmatrix} \tag{52}$$

の固有値と規格化された固有ベクトルは

$$b_1 = 11, \quad |w_1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ i \end{pmatrix} \tag{53}$$

$$b_2 = 5, \quad |w_2\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ -i \end{pmatrix} \tag{54}$$

である．

**問 11**．上の例題の状態ベクトル $|\psi\rangle$ と行列 $\hat{B}$ に関して以下の問いに答えよ．

(1) $\mathrm{Prob}(\hat{B} = 11|\psi)$ と $\mathrm{Prob}(\hat{B} = 5|\psi)$ を求めよ．

(2) $\hat{B}$ の平均値を計算せよ．

(3) $\langle \psi | \hat{B} | \psi \rangle$ も求めよ．

(4) 物理量 $\hat{A}$ を測れば確率 1 で測定値 $a_1 = 6$ を得る状態において，物理量 $\hat{B}$ を測って測定値 $b_1 = 11$ を得る確率を求めよ．

**問 12**. 行列

$$\hat{C} = \begin{pmatrix} 3 & 1 & 0 \\ 1 & 3 & 0 \\ 0 & 0 & 4 \end{pmatrix} \tag{55}$$

の固有値と規格化された固有ベクトルを求めよ．また，状態ベクトル

$$|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{14}} \begin{pmatrix} 1 \\ 2 \\ 3 \end{pmatrix} \tag{56}$$

において物理量 $\hat{C}$ を測ったときに各固有値を得る確率を求めよ．さらに，この状態における $\hat{C}$ の期待値を求めよ．