量子力学の基礎
北野正雄 (京都大学大学院工学研究科)
kitano@kuee.kyoto-u.ac.jp　2007 年 10 月 16 日
この内容は京都大学工学部電気電子工学科における授業「電気電子工学のための量子論」の補助的資料として準備されたものです．個人使用以外の目的で利用される場合には著者の許諾を得てください．

第 9 章
連続スペクトルと波動関数

これまでは, 有限次元の状態空間を扱ってきたが, 量子論では無限次元の空間も重要な働きをする．次元が無限の場合には収束や演算子の定義域など数学的な問題を気にする必要が生じるが, ここでは有限次元からの素朴な延長で理解できる範囲でやりくりすることにする．無限次元では, 演算子のスペクトルが連続値をとる場合が出てくる．そこで, 本章では連続スペクトルの場合の状態ベクトル, 演算子の表記を導入する．ブラケット記法は連続の場合に自然に拡張できるという点で優れた記法である．ただし, ケットを正規化するためにデルタ関数を導入する必要がある．

記法の練習も兼ねて, 正準交換関係 $[\hat{q},\hat{p}] = \mathrm{i}\hbar\hat{1}$ を位置表示することで, 運動量演算子 $\hat{p}$ が必然的に微分演算子として表されることを示そう[*1)]．連続スペクトルの具体例は次章以降に述べることにして, ここでは数式の形式的な扱いに重点をおく．

9.1　デルタ関数

ディラックのデルタ関数 $\delta(x)$ は任意のなめらかな関数 $f(x)$ に対して,

*1)　q と $(\hbar/\mathrm{i})(\mathrm{d}/\mathrm{d}q)$ が交換関係を満たすことを調べるのは易しいが, 逆はそれほど自明ではない．

$$\int_{-\infty}^{\infty} \delta(x) f(x) \mathrm{d}x = f(0) \tag{9.1}$$

を与えるものとして定義されている．しかし, 厳密にはこれは関数ではなく, 数学的には超関数とよばれるものに属する．ここでは, 通常の関数の極限としてデルタ関数を捉えることにする．

まず, 面積が 1 の関数 $\phi(\xi)$ を導入する:

$$\int_{-\infty}^{\infty} \phi(\xi) \mathrm{d}\xi = 1. \tag{9.2}$$

必要に応じて適当な滑らかさを備えているとする．また, $\phi(\pm\infty) = 0$ であるとする．$a > 0$ でパラメータづけされた, x の関数

$$g_a(x) = \frac{1}{a}\phi\left(\frac{x}{a}\right) \tag{9.3}$$

を導入する．x と a は同じ次元をもつ量であるとする．すると, a によらず,

$$\int_{-\infty}^{\infty} g_a(x) \mathrm{d}x = 1 \tag{9.4}$$

が成り立つ．a を小さくしてゆくと, $g_a(x)$ の幅はそれに応じて小さくなり, 高さは a に反比例して大きくなる．

さて原点で連続な任意の関数 $f(x)$ に対して

$$\begin{aligned}\int_{-\infty}^{\infty} g_a(x) f(x) \mathrm{d}x &= \int_{-\infty}^{\infty} \phi(\xi) f(a\xi) \mathrm{d}\xi \\ &\to f(0) \int_{-\infty}^{\infty} \phi(\xi) \mathrm{d}\xi = f(0) \quad (a \to 0)\end{aligned} \tag{9.5}$$

が成り立つ．このことから,

$$g_a(x) \to \delta(x) \quad (a \to 0) \tag{9.6}$$

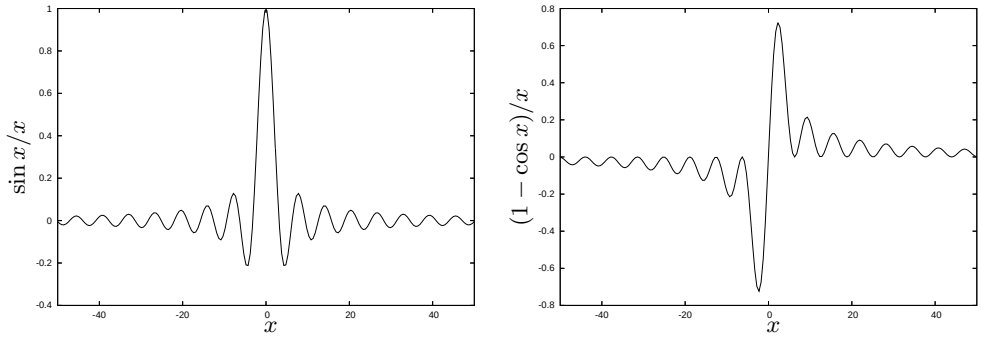
と考えることができる．関数の各点 x における値が収束するというのではなく, 任意の連続関数 $f(x)$ との積分値が収束するという意味である．

$g_a(x)$ の物理的次元は, その引数 x の物理的次元の逆数である．$\delta(x)$ も同様である．たとえば, x が長さのとき, $\delta(x)$ は長さの逆の次元をもつ．

$\phi(\xi)$ の選び方には自由度がある．$a \to 0$ の極限では, 関数の形は見えなくなり, 面積が 1 という性質だけが残るからである．もっとも簡単には

$$\phi(\xi) = \begin{cases} 1 & (|\xi| \le 1/2) \\ 0 & (|\xi| > 1/2) \end{cases} \tag{9.7}$$

が用いられる．微分する必要がある場合には, $\phi(\xi) = \exp(-\xi^2)/\sqrt{\pi}$ などを用いればよい．



(a) (b)

図 9.1 (a) $\sin x/x$, (b) $(1-\cos x)/x$

問題 9.1 フーリェ変換に関連しては, $\phi(\xi) = \sin\xi/\pi\xi$ がよく登場する. 面積が 1 であることを確かめよ. また, 図を描いて, $g_a(x) = \sin(x/a)/x$ が a が小さい場合に, デルタ関数として機能することを確かめよ. [図 9.1(a) 参照]

9.2 デルタ関数の公式

デルタ関数の微分を導入する. 原点で微分可能な関数 $f(x)$ に対して

$$\begin{aligned}\int_{-\infty}^{\infty} g_a'(x)f(x)\mathrm{d}x &= g_a(x)f(x)|_{-\infty}^{\infty} - \int_{-\infty}^{\infty} g_a(x)f'(x)\mathrm{d}x \\ &= -f'(0) \quad (a \to 0)\end{aligned} \tag{9.8}$$

がいえる. ただし, $g_a(x)$ も原点で微分可能であるとした. また, $g_a(\pm\infty) = 0$ を用いた. これによって, $g_a'(x) \to \delta'(x)$ を

$$\int_{-\infty}^{\infty} \delta'(x)f(x)\mathrm{d}x = -f'(0) \tag{9.9}$$

という作用を持つものと考えることができる. さらに高階の微分 $\delta^{(n)}(x)$ の作用も,

$$\int_{-\infty}^{\infty} \delta^{(n)}(x)f(x)\mathrm{d}x = (-1)^n f^{(n)}(x) \tag{9.10}$$

と定義することができる.

デルタ関数で, 通常の関数 f を畳み込むと

$$\int_{-\infty}^{\infty} \delta(x-y)f(y)\mathrm{d}y = f(x) \tag{9.11}$$

のようにもとの関数になる. デルタ関数の微分で畳み込むと

$$\int_{-\infty}^{\infty} \delta'(x-y)f(y)\mathrm{d}y = -\int_{-\infty}^{\infty} \delta'(y-x)f(y)\mathrm{d}y = f'(x) \tag{9.12}$$

のように微分が得られる. 微分を積分で表せていることに注意する.

任意のなめらかな関数 $f(x)$ に対して,

$$\int_{-\infty}^{\infty}(x\delta'(x))f(x)\mathrm{d}x = -\left.\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}(xf(x))\right|_{x=0} = -\left[f(x)+xf'(x)\right]_{x=0}$$
$$= -f(0) = \int_{-\infty}^{\infty}\delta(x)f(x)\mathrm{d}x \tag{9.13}$$

が成り立つことから, 公式

$$x\delta'(x) = -\delta(x) \tag{9.14}$$

が得られる.

問題 9.2 デルタ関数に幅を持たせて

$$g_a(x) = \exp(-x^2/a^2)/\sqrt{\pi} \tag{9.15}$$

とおいて, この公式に対応する等式が成り立つことを確認せよ. (Hint: 二こぶ駱駝のデルタ関数)

ここからは, フーリェ変換に関連する公式を調べておく. $\mathrm{e}^{\mathrm{i}kx}$ を $-L$ から L まで積分すると,

$$\int_{-L}^{L}\mathrm{e}^{\mathrm{i}kx}\mathrm{d}x = \frac{1}{\mathrm{i}k}\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}kx}\Big|_{-L}^{L} = 2\frac{\sin kL}{k} \tag{9.16}$$

となる.

$$g_\kappa(k) = 2\pi\frac{1}{\kappa}\frac{\sin(k/\kappa)}{k/\kappa} \to 2\pi\delta(k) \quad (\kappa = 1/L \to 0) \tag{9.17}$$

と表せるので,

$$\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{e}^{\mathrm{i}kx}\mathrm{d}x = 2\pi\delta(k) \tag{9.18}$$

が得られる. 積分区間を 0 から L にすると,

$$\int_{0}^{L}\mathrm{e}^{\mathrm{i}kx}\mathrm{d}x = \frac{1}{\mathrm{i}k}\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}kx}\Big|_{0}^{L} = \frac{\sin kL}{k} + \mathrm{i}\frac{1-\cos kL}{k} \tag{9.19}$$

$L \to \infty$ とすると,

$$\int_{0}^{\infty}\mathrm{e}^{\mathrm{i}kx}\mathrm{d}x = \pi\delta(k) + \mathrm{i}\mathcal{P}\frac{1}{k} \tag{9.20}$$

$\mathcal{P}/k$ は主値とよばれるもので, 原点で連続な関数 $f(k)$ に対して

$$\int_{-\infty}^{\infty}\mathcal{P}\frac{1}{k}f(k)\mathrm{d}k = \lim_{\epsilon\to 0}\left(\int_{-\infty}^{-\epsilon}\frac{f(k)}{k} + \int_{\epsilon}^{\infty}\frac{f(k)}{k}\right) \tag{9.21}$$

を与える超関数である. さらに,

$$\delta_-(k) = \frac{1}{2\pi}\int_0^\infty \mathrm{e}^{\mathrm{i}kx}\mathrm{d}x = \frac{1}{2}\delta(k) - \frac{1}{2\pi\mathrm{i}}\mathcal{P}\frac{1}{k}$$
$$\delta_+(k) = \frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^0 \mathrm{e}^{\mathrm{i}kx}\mathrm{d}x = \frac{1}{2}\delta(k) + \frac{1}{2\pi\mathrm{i}}\mathcal{P}\frac{1}{k} \tag{9.22}$$

という超関数もよく用いられる．関係

$$\delta(k) = \delta_+(k) + \delta_-(k), \quad \mathcal{P}\frac{1}{k} = \pi\mathrm{i}(\delta_+(k) - \delta_-(k)) \tag{9.23}$$

が成り立つことに注意する．また, $\delta_+(-k) = \delta_-(k)$ である．

問題 9.3 $(1-\cos kL)/k$ をグラフに描くことで $\mathcal{P}(1/k)$ の超関数としての機能を確認せよ．[図 9.1(b) 参照]

9.3 位置表示

9.3.1 位置表示

1 次元粒子に対する位置の演算子を $\hat{q}$ とする．その固有ベクトルを $|q\rangle$ と表す;

$$\hat{q}|q\rangle = q|q\rangle. \tag{9.24}$$

後に示すように, q は連続的な値をとりうる．

固有ベクトル $|q\rangle$ は規格化条件

$$\langle q'|q\rangle = \delta(q'-q), \tag{9.25}$$

と完全性条件

$$\int_{-\infty}^\infty \mathrm{d}q\,|q\rangle\langle q| = \hat{1}. \tag{9.26}$$

を満たしているものとする; これらは, 離散的な場合の, $\langle e_i|e_j\rangle = \delta_{ij}$, $\sum_{i=1}^n |e_i\rangle\langle e_i| = \hat{1}$ に相当する．

状態ベクトル $|\psi\rangle$ は,

$$|\psi\rangle = \hat{1}|\psi\rangle = \int_{-\infty}^\infty \mathrm{d}q\,|q\rangle\langle q|\psi\rangle = \int_{-\infty}^\infty \mathrm{d}q\,\psi(q)|q\rangle \tag{9.27}$$

と表すことができる．展開係数

$$\psi(q) := \langle q|\psi\rangle \tag{9.28}$$

は q-表示の波動関数と呼ばれる複素値をとる関数である．これは離散的な場合の, $|\psi\rangle = \sum_{i=1}^n \xi_i|e_i\rangle$, $\xi_i = \langle e_i|\psi\rangle$ に相当する式である．

基底が $\{|q\rangle\}$ であるという了解の下では, 波動関数は $\psi(q)$ は状態 $|\psi\rangle$ に関する情報をすべて含んでおり, 離散の場合のベクトル (ξ_i) と同じ役割を果たし

ている. 波動関数は通常の関数であり, 状態ベクトルに比べて, より具体的であるので, よく利用される. しかし, あくまでも状態ベクトルの表現の一方法にすぎないので注意が必要である.

9.3.2 演算子の座標表示

任意の演算子 $\hat{A}$ は

$$\begin{aligned}\hat{A} = \hat{1}\hat{A}\hat{1} &= \left(\int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}q' |q'\rangle\langle q'|\right) \hat{A} \left(\int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}q |q\rangle\langle q|\right) \\ &= \int_{-\infty}^{\infty}\int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}q' \mathrm{d}q A(q', q) |q'\rangle\langle q| \end{aligned} \tag{9.29}$$

と積分の形で表すことができる. ただし, $A(q', q) := \langle q'|\hat{A}|q\rangle$ である. つぎに,

$$|\phi\rangle = \hat{A}|\psi\rangle \tag{9.30}$$

の両辺に $\langle q|$ を左から作用させると,

$$\begin{aligned}\langle q|\phi\rangle = \langle q|\hat{A}|\psi\rangle = \langle q|\hat{A}\hat{1}|\psi\rangle &= \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}q' \langle q|\hat{A}|q'\rangle\langle q'|\psi\rangle \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}q' A(q, q')\langle q'|\psi\rangle \end{aligned} \tag{9.31}$$

これを, $\psi(q) := \langle q|\psi\rangle$, $\phi(q) := \langle q|\phi\rangle$ を用いて表すと,

$$\phi(q) = \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}q' A(q, q')\psi(q') =: (\hat{A}\psi)(q) \tag{9.32}$$

となる. これが, q-表示の波動関数に関する演算子の作用を一般的に表したものである. 離散の場合の $\xi'_i = \sum_j A_{ij}\xi_j$ に相当する式である.

$\hat{A}$ が, q-表示で対角的な場合, すなわち

$$\hat{A}|q\rangle = a(q)|q\rangle \tag{9.33}$$

であれば,

$$\langle q'|\hat{A}|q\rangle = a(q)\langle q'|q\rangle = a(q)\delta(q' - q) \tag{9.34}$$

であり, 積分 (9.29) は簡単になる :

$$\hat{A} = \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}q\, a(q)|q\rangle\langle q| \tag{9.35}$$

特に, $\hat{q}|q\rangle = q|q\rangle$ なので,

$$\hat{q} = \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}q\, q|q\rangle\langle q|. \tag{9.36}$$

式 (9.32) に代入すると, それぞれ

$$(\hat{A}\psi)(q) = a(q)\psi(q), \quad (\hat{q}\psi)(q) = q\psi(q). \tag{9.37}$$

q-表示の波動関数 $\psi(q)$ に対して, これらの演算子の作用はそれぞれ

$$\hat{A} \to a(q)\times, \quad \hat{q} \to q\times \tag{9.38}$$

のように掛算として表すことができる.

9.3.3 正準交換関係

位置の演算子 $\hat{q}$ と運動量の演算子 $\hat{q}$ の間の交換関係 $[\hat{q},\hat{p}] = \mathrm{i}\hbar\hat{1}$ の座標表示

$$\langle q'|\hat{q}\hat{p}|q\rangle - \langle q'|\hat{p}\hat{q}|q\rangle = \mathrm{i}\hbar\langle q'|q\rangle \tag{9.39}$$

より

$$(q'-q)\langle q'|\hat{p}|q\rangle = \mathrm{i}\hbar\delta(q'-q) \tag{9.40}$$

が得られる. これをデルタ関数の公式 (9.14)

$$x\delta'(x) = -\delta(x) \tag{9.41}$$

と比較すると,

$$\langle q'|\hat{p}|q\rangle = \frac{\hbar}{\mathrm{i}}\delta'(q'-q) \tag{9.42}$$

であることが分かる. これより,

$$\hat{p} = \frac{\hbar}{\mathrm{i}}\int_{-\infty}^{\infty}\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{d}q'\mathrm{d}q\delta'(q'-q)|q'\rangle\langle q| \tag{9.43}$$

そして,

$$(\hat{p}\psi)(q) = \langle q|\hat{p}|\psi\rangle = \int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{d}q'\frac{\hbar}{\mathrm{i}}\delta'(q-q')\psi(q') = \frac{\hbar}{\mathrm{i}}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}q}\psi(q) \tag{9.44}$$

となるので, $\hat{p}$ は座標表示では

$$\hat{p} \quad \to \quad \frac{\hbar}{\mathrm{i}}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}q} \tag{9.45}$$

のような働きをする.

問題 9.4 式 (9.43) から $\hat{p}$ がエルミートであることを示せ.

問題 9.5 1 粒子に対するハミルトニアン $\hat{H} = \hat{p}^2/(2m) + V(\hat{q})$ の座標表示を求めよ. また, 運動方程式 $\mathrm{i}\hbar(\mathrm{d}/\mathrm{d}t)|\psi\rangle = \hat{H}|\psi\rangle$ を座標表示せよ.

問題 9.6 演算子

$$\widehat{\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}q}} = \int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{d}q'\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{d}q''\delta'(q'-q'')|q'\rangle\langle q''| = -\mathrm{i}\hat{K} \tag{9.46}$$

を $|q\rangle$, $\langle q|$ にそれぞれ作用させてみよ. 反エルミートであることを確かめよ.

表 9.1　q-表示, p-表示での演算子の表現

演算子	q-表示	p-表示
$\hat{q}$	q	$-\dfrac{\hbar}{\mathrm{i}}\dfrac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}p}$
$\hat{p}$	$\dfrac{\hbar}{\mathrm{i}}\dfrac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}q}$	p
$f(\hat{q},\hat{p})$	$f\left(q, \dfrac{\hbar}{\mathrm{i}}\dfrac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}q}\right)$	$f\left(-\dfrac{\hbar}{\mathrm{i}}\dfrac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}p}, p\right)$

9.4　運動量表示

運動量演算子を $\hat{p}$ とする. その固有ベクトルを $|p\rangle$ と表す;

$$\hat{p}|p\rangle = p|p\rangle. \tag{9.47}$$

基底 $\{|p\rangle\}$ は, 規格化条件と完全性条件を満たしているとする：

$$\langle p'|p\rangle = \delta(p'-p), \tag{9.48}$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}p|p\rangle\langle p| = \hat{1}. \tag{9.49}$$

一般のケット $|\psi\rangle$ は

$$|\psi\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}p\langle p|\psi\rangle|p\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}p\psi_p(p)|p\rangle, \tag{9.50}$$

と表される. ここで展開係数

$$\psi_p(p) = \langle p|\psi\rangle \tag{9.51}$$

は p-表示の波動関数とよばれている. q-表示, p-表示における演算子を表 9.1 に示す.

9.4.1　変換

q-表示と p-表示の間の変換則を調べよう. そのために, $\langle q|p\rangle$ が満たす条件をもとめる. 固有方程式 $\hat{p}|p\rangle = p|p\rangle$ を q-表示すると

$$\frac{\hbar}{\mathrm{i}}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}q}\langle q|p\rangle = p\langle q|p\rangle \tag{9.52}$$

となるが, これを $\langle q|p\rangle$ に対する微分方程式と考えて, 解くと

$$\langle q|p\rangle = C\mathrm{e}^{\mathrm{i}pq/\hbar} \tag{9.53}$$

が得られる. 定数 C は, $|p\rangle$ の規格化条件から求めることができる;

$$\langle p'|p\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}q \langle p'|q\rangle\langle q|p\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}q |C|^2 \mathrm{e}^{-\mathrm{i}(p'-p)q/\hbar} \tag{9.54}$$

$$= 2\pi\hbar|C|^2\delta(p'-p). \tag{9.55}$$

ここで, C を実数に選ぶことにすると, $C = 1/\sqrt{2\pi\hbar}$ と決定される. 結局,

$$\langle q|p\rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\mathrm{e}^{\mathrm{i}pq/\hbar} \tag{9.56}$$

が得られた.

q-表示と p-表示の関係は

$$\psi_q(q) = \langle q|\psi\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}p \langle q|p\rangle\langle p|\psi\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \psi_p(p)\mathrm{e}^{\mathrm{i}pq/\hbar}\mathrm{d}p \tag{9.57}$$

$$\psi_p(p) = \langle p|\psi\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}q \langle p|q\rangle\langle q|\psi\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \psi_q(q)\mathrm{e}^{-\mathrm{i}qp/\hbar}\mathrm{d}q \tag{9.58}$$

である. $\psi_q(q)$ と $\psi_p(p)$ は次のような関係にある. すなわち,

$$\psi_p(p) = (\mathcal{F}\psi_q)(p/\hbar), \quad \psi_q(q) = (\mathcal{F}^{-1}\psi_p)(q/\hbar) \tag{9.59}$$

である. ただし, $\mathcal{F}$, $\mathcal{F}^{-1}$ はそれぞれフーリエ変換, 逆フーリエ変換を表す:

$$(\mathcal{F}f)(\omega) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int_{-\infty}^{\infty} f(t)\mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega t}\mathrm{d}t,$$
$$(\mathcal{F}^{-1}g)(t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int_{-\infty}^{\infty} g(\omega)\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega t}\mathrm{d}t. \tag{9.60}$$

9.5 基底ケットの成分表示

基底系 $\{|x\rangle\}$, $\{|p\rangle\}$ を構成するケットの成分表示を整理しておこう. q-表示では,

$$|q\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}q'|q'\rangle\langle q'|q\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}q'\delta(q'-q)|q'\rangle$$
$$|p\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}q'|q'\rangle\langle q'|p\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}q'\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\mathrm{e}^{\mathrm{i}pq'/\hbar}|q'\rangle \tag{9.61}$$

p-表示では,

$$|q\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}p'|p'\rangle\langle p'|q\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}p'\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}qp'/\hbar}|p'\rangle$$
$$|p\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}p'|p'\rangle\langle p'|p\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}p'\delta(p'-p)|p'\rangle \tag{9.62}$$

となる. これらの成分はいずれも 2 乗積分が発散していることに注意する.

9.6 次元

連続スペクトルの場合は, 特にに波動関数やブラ, ケットの次元が重要となるので, 次元のチェックを行っておく. 位置 (長さ) の次元は $q \overset{\mathrm{D}}{\sim} \mathrm{m}$, 運動量の次元は $p \overset{\mathrm{D}}{\sim} \mathrm{Js/m}$ である.

状態ベクトルの内積

$$\langle\psi|\psi\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}q \langle\psi|q\rangle\langle q|\psi\rangle \quad (=1) \tag{9.63}$$

を次元の視点からみると, $\langle\psi|\psi\rangle \overset{\mathrm{D}}{\sim} 1$, $\mathrm{d}q \overset{\mathrm{D}}{\sim} q$ より,

$$\langle\psi|q\rangle \overset{\mathrm{D}}{\sim} \langle q|\psi\rangle \overset{\mathrm{D}}{\sim} q^{-1/2} \tag{9.64}$$

となる. さらに, 状態ベクトルの展開

$$|\psi\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}q \psi(q)|q\rangle \tag{9.65}$$

の次元を調べると $|\psi\rangle \overset{\mathrm{D}}{\sim} 1$, $\mathrm{d}q \overset{\mathrm{D}}{\sim} q$ より

$$\psi(q) = \langle q|\psi\rangle \overset{\mathrm{D}}{\sim} q^{-1/2}, \quad |q\rangle \overset{\mathrm{D}}{\sim} q^{-1/2} \tag{9.66}$$

となる. つまり, $\psi(q)$, $|\psi\rangle$ の次元は $\overset{\mathrm{D}}{\sim} \mathrm{m}^{-1/2}$. 同様な議論によって

$$\psi(p) = \langle p|\psi\rangle \overset{\mathrm{D}}{\sim} p^{-1/2}, \quad |p\rangle \overset{\mathrm{D}}{\sim} p^{-1/2}. \tag{9.67}$$

つまり, $\psi(p)$, $|p\rangle$ の次元は $\overset{\mathrm{D}}{\sim} (\mathrm{J\,s/m})^{1/2}$. さらに,

$$\langle q|p\rangle \overset{\mathrm{D}}{\sim} \langle p|q\rangle \overset{\mathrm{D}}{\sim} p^{-1/2} q^{-1/2} \overset{\mathrm{D}}{\sim} \hbar^{-1/2} \tag{9.68}$$

が得られる.

9.7 無限行列

連続スペクトルの場合には演算子を $\langle q'|\hat{A}|q\rangle = A(q', q)$ のように一種の行列として表示できることが分かった. しかし, $\delta(q'-q)$ や $\delta'(q'-q)$ などの特異的な関数が現れるので注意が必要である. ここでは, $\hat{q}$, $\hat{p}$ の離散的な対応物を無限行列で表してみる*2). ただし, 無限に大きい行列の中央の 5×5 の部分のみを表すことにする.

*2) 歴史的には, 行列を無限次元に拡張することで, 作用素やヒルベルト空間の理論は発展してきた. しかし, 行列の利用は, 厳密な立場からは不都合がさまざま生じることが明らかになってきた. そのため, 行列を理論から完全に消し去る努力が行われた. このことは, 志賀「固有値問題 30 講」の最後に述べられている. ただし, 物理の立場からは, イメージの明確化のため, 時計の針を戻しても許されるだろう.

$$\hat{q} = q_0 \begin{pmatrix} 2 & & & & \\ & 1 & & & \\ & & 0 & & \\ & & & -1 & \\ & & & & -2 \end{pmatrix}, \quad \hat{p} = \frac{p_0}{2\mathrm{i}} \begin{pmatrix} 0 & -1 & & & \\ 1 & 0 & -1 & & \\ & 1 & 0 & -1 & \\ & & 1 & 0 & -1 \\ & & & 1 & 0 \end{pmatrix} \tag{9.69}$$

ここで, $\hat{p}$ はたてベクトル (c_n) $(n = \cdots, -1, 0, 1, \cdots)$ に作用させると, $p_0(c_{n+1} - c_{n-1})/2\mathrm{i}$ という差分が得られるので, 微分作用素に対応していることが分かる.

これらの行列の交換関係は

$$\begin{aligned} [\hat{q}, \hat{p}] &= \hat{q}\hat{p} - \hat{p}\hat{q} \\ &= \frac{p_0 q_0}{2\mathrm{i}} \left[\begin{pmatrix} 0 & -2 & & & \\ 1 & 0 & -1 & & \\ & 0 & 0 & 0 & \\ & & -1 & 0 & 1 \\ & & & -2 & 0 \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} 0 & -1 & & & \\ 2 & 0 & 0 & & \\ & 1 & 0 & 1 & \\ & & 0 & 0 & 2 \\ & & & -1 & 0 \end{pmatrix} \right] \\ &= \mathrm{i}\frac{p_0 q_0}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 & & & \\ 1 & 0 & 1 & & \\ & 1 & 0 & 1 & \\ & & 1 & 0 & 1 \\ & & & 1 & 0 \end{pmatrix} \end{aligned} \tag{9.70}$$

と計算できる.

最後の行列はベクトル (c_n) に作用させると, $\mathrm{i}p_0 q_0(c_{n+1} + c_{n-1})/2$ となる. c_n の n に対する変化が非常にゆるやかであれば, すなわち, $c_{n-1} \sim c_n \sim c_{n+1}$ が成り立てば, $\mathrm{i}p_0 q_0 c_n$ となって, 単位行列に比例していると考えてよい.

問題 9.7 対称性の悪い

$$\hat{p} = \frac{p_0}{\mathrm{i}} \begin{pmatrix} -1 & 0 & & & \\ 1 & -1 & 0 & & \\ & 1 & -1 & 0 & \\ & & 1 & -1 & 0 \\ & & & 1 & -1 \end{pmatrix} \tag{9.71}$$

を用いて同様の計算を行ってみよ.