位置演算子の固有状態と波動関数

式 (43) の位置演算子の固有状態 $|x\rangle$ と、ブラ・ケットと波動関数の対応 $\langle x|\psi\rangle = \psi(x,t)$ の説明。結論としては、$\langle x|\psi\rangle = \psi(x,t)$ は定義であり、このように定義することで状態ベクトルから始めて座標表示の結果が導出できる。

まず、位置演算子の固有値方程式

$$\hat{x}\,|x\rangle = x\,|x\rangle$$

の $|x\rangle$ の意味は、演算子 $\hat{x}$ に対して固有値 x を持つ固有状態である。$|x\rangle$ の具体形はわからないが、この式を満たす性質を持つ状態 $|x\rangle$ が存在すると考える。物理的な意味は以下のように与えられるが、脚注にあるように、位置の不定性が 0 になる極限をとった状態と考える必要がある。例えば固有値 x_0 を持つ状態 $|x_0\rangle$ の場合、固有値方程式は

$$\hat{x}\,|x_0\rangle = x_0\,|x_0\rangle$$

となる。状態 $|x_0\rangle$ で演算子 $\hat{x}$ の期待値（粒子の位置の期待値）を計算すると

$$\langle x\rangle = \frac{\langle x_0|\,\hat{x}\,|x_0\rangle}{\langle x_0|x_0\rangle} = \frac{\langle x_0|\,x_0\,|x_0\rangle}{\langle x_0|x_0\rangle} = \frac{x_0\,\langle x_0|x_0\rangle}{\langle x_0|x_0\rangle} = x_0$$

となる。つまり、粒子の位置が $x = x_0$ に局在した状態に対応する[2]。波動関数が $\langle x|\psi\rangle = \psi(x,t)$ で与えられることを認めて、状態 $|x_0\rangle$ の波動関数 $\psi_{x_0}(x,t)$ を求めると（x_0 は固定された定数、x は座標を表す変数）

$$\psi_{x_0}(x,t) = \langle x|x_0\rangle = \delta(x-x_0) \quad \leftarrow (44)$$

となり、確かに $x = x_0$ に局在した波動関数をしている。

2 次元ユークリッド（実ベクトル）空間のベクトル $\boldsymbol{r}$ は、直交座標では (x,y) で、極座標では (r,θ) で表される。どちらの座標を使っても、同じベクトル $\boldsymbol{r}$ を表現していることに変わりはなく、他の座標系を用いることも可能である。問題によって、使いやすい座標系を選んで計算して良い。座標系を選ぶことは、基底を選ぶことと等価である。式 (20) の基底 $\{\boldsymbol{e}_1,\boldsymbol{e}_2\}$ は、実ベクトル空間の基底にもなっていて、任意のベクトル $\boldsymbol{r}$ は

$$\boldsymbol{r} = x\boldsymbol{e}_1 + y\boldsymbol{e}_2$$

と展開できる。つまり、**直交座標での表現** (x,y) **は、ベクトル** $\boldsymbol{r}$ **を基底** $\{\boldsymbol{e}_1,\boldsymbol{e}_2\}$ **で展開したときの展開係数**である。このとき、展開係数 (x,y) は（ユークリッド空間の）内積を用いて

$$x = \boldsymbol{e}_1\cdot\boldsymbol{r}, \quad y = \boldsymbol{e}_2\cdot\boldsymbol{r}$$

[2] ただし分子分母の $\langle x_0|x_0\rangle$ は式 (44) から $\delta(0)\to\infty$ になることに注意。この発散は、物理的には不確定性関係より位置が 1 点に局在した状態は量子力学的に許されないこと、数学的には連続スペクトルを持つ波動関数が規格化できないことを表している。厳密には有限の不確定性を持った波束の極限と考える。

あるいはブラ・ケットで書いて

$$x = \langle e_1 | r \rangle\,, \quad y = \langle e_2 | r \rangle$$

と計算できる（ベクトル $\boldsymbol{r}$ を $|r\rangle$ と表記)。

抽象的な状態ベクトル $|\psi\rangle$ と波動関数 $\psi(x,t)$ は、それぞれベクトルを $\boldsymbol{r}$ および (x,y) と表記することに対応する。

$$\begin{aligned} |\psi\rangle &\leftrightarrow \boldsymbol{r} \\ \psi(x,t) &\leftrightarrow (x,y) \end{aligned}$$

波動関数がベクトル空間を作ること、$|x\rangle$ がその基底になることを認めると、上と同様に任意の状態ベクトル $|\psi\rangle$ が基底 $\{|x\rangle\}$ で展開できて（式 (46))、

$$|\psi\rangle = \int dx\ \ |x\rangle \langle x|\psi\rangle$$

となる。座標表示の波動関数 $\psi(x,t)$ は、この展開係数を用いて**定義する**：

$$\langle x|\psi\rangle = \psi(x,t)$$

つまり、**座標表示の波動関数 $\psi(x,t)$ は、状態ベクトル $|\psi\rangle$ を基底 $\{|x\rangle\}$ で展開したときの展開係数**である。同様に考えて、運動量表示の波動関数（別の基底によるベクトルの表現）が欲しければ $\{|p\rangle\}$ で展開すれば良いし、もっと別の基底を持ってきても良い。$|\psi\rangle$ は基底によらずにベクトルをあらわしているのに対し、波動関数 $\psi(x,t)$ は座標基底を用いた $|\psi\rangle$ の具体的な表現である。このように定義すると、例えば式 (35) の内積が以下のように確認できる。

$$\langle \psi_a|\psi_b\rangle = \int dx\, \langle \psi_a|x\rangle \langle x|\psi_b\rangle = \int dx (\langle x|\psi_a\rangle)^* \langle x|\psi_b\rangle = \int dx\ \ \psi_a^*(x,t)\psi_b(x,t)$$

演算子の座標表示

演算子の座標表示 (43) の具体例と運動量演算子 $\hat{p}$ の座標基底 $|x\rangle$ への作用 (70)。

座標演算子 $\hat{x}$ と運動量演算子 $\hat{p}$ の状態 $|x\rangle$ への作用は

$$\hat{x}\,|x\rangle = x\,|x\rangle\,, \quad \langle x|\,\hat{x} = x\,\langle x|$$
$$\hat{p}\,|x\rangle = i\hbar\frac{d}{dx}\,|x\rangle\,, \quad \langle x|\,\hat{p} = -i\hbar\frac{d}{dx}\,\langle x|$$

で与えられる。これは式 (43) の例になっており、演算子 $\hat{x}, \hat{p}$ の座標表示 $x, -i\hbar d/dx$ は $|x\rangle$ ではなく $\langle x|$ に作用した際に得られる。$|x\rangle$ が座標演算子 $\hat{x}$ の固有状態であり、$\hat{x}$ がエルミートであることから、$\hat{x}$ は $\langle x|$ に作用しても $|x\rangle$ に作用しても同じ x を与えるが、運動量演算子 $\hat{p}$ は $\langle x|$ に作用したときに符号が反転することに注意。直感的には $\hat{p} \to -i\hbar d/dx$ は座標表示の波動関数 $\phi(x)$ に対して作用させる際の置き換えであり、これはブラケットで書くと $\phi(x) = \langle x|\phi\rangle$ と表され、ここに $|x\rangle$ ではなく $\langle x|$ が入っているため、$\hat{p}$ を $\langle x|$ に作用させた方と同じ演算になると理解できる。以下では運動量演算子 $\hat{p}$ の $|x\rangle$、$\langle x|$ への作用が上記で与えられることを確認する。より厳密には、運動量演算子から並行移動の演算子を作り、無限小変換を考えることで導くことができる（例えば猪木慶治・川合光「量子力学 I」(講談社サイエンティフィク)p.189 参照)。

式 (44)、(45)、より、状態ベクトルの規格化と完全性は

$$\langle x|x'\rangle = \delta(x - x'), \quad \int dx\,|x\rangle\,\langle x| = 1$$

で与えられる。交換関係 $[\hat{x}, \hat{p}] = i\hbar$ の行列要素を考えると[3]

$$\begin{aligned}
\langle x|\,i\hbar\,|x'\rangle &= i\hbar\delta(x - x') \\
\langle x|\,[\hat{x}, \hat{p}]\,|x'\rangle &= \langle x|\,(\hat{x}\hat{p} - \hat{p}\hat{x})\,|x'\rangle \\
&= \langle x|\,(x\hat{p} - \hat{p}x')\,|x'\rangle \\
&= (x - x')\,\langle x|\,\hat{p}\,|x'\rangle \\
\Rightarrow \langle x|\,\hat{p}\,|x'\rangle &= \frac{i\hbar}{x - x'}\delta(x - x')
\end{aligned}$$

ここで任意の関数 $f(x)$ に対し

$$\begin{aligned}
\int dx\ f(x)x\frac{d}{dx}\delta(x) &= -\int dx\frac{d}{dx}[f(x)x]\delta(x) \quad \leftarrow (\text{部分積分、表面項は}\ \delta(x)\ \text{が消えるので}\ 0) \\
&= -\int dx\left[x\frac{df(x)}{dx} + f(x)\right]\delta(x) \\
&= -\int dx f(x)\delta(x) \quad \leftarrow \int xg(x)\delta(x)dx = 0
\end{aligned}$$

[3] より厳密には以下の計算の式 (C1) は $\delta(x - x')$ に x の任意関数をかけた項を持ちうるが、この項は位相因子の選び方で状態ベクトルに吸収できるため、結果として式 (C1) の形を選ぶことができる。近藤慶一「量子力学講義 I」(共立出版)p.182 参照。

より

$$x\frac{d}{dx}\delta(x) = -\delta(x)$$

である。$x \to x - x'$ と置き換えると、$d(x - x') = dx$ より

$$\begin{aligned}(x - x')\frac{d}{dx}\delta(x - x') &= -\delta(x - x') \\ \frac{1}{x - x'}\delta(x - x') &= -\frac{d}{dx}\delta(x - x')\end{aligned}$$

となるので、

$$\langle x|\,\hat{p}\,|x'\rangle = -i\hbar\frac{d}{dx}\delta(x - x') \tag{C1}$$

を得る。よって

$$\begin{aligned}\langle x|\,\hat{p} &= \int dx'\,\langle x|\,\hat{p}\,|x'\rangle\,\langle x'| \\ &= \int dx'\left[-i\hbar\frac{d}{dx}\delta(x - x')\right]\langle x'| \\ &= -i\hbar\frac{d}{dx}\int dx'\delta(x - x')\,\langle x'| \\ &= -i\hbar\frac{d}{dx}\,\langle x|\end{aligned} \tag{C2}$$

また

$$\begin{aligned}\hat{p}\,|x\rangle &= \int dx'\,|x'\rangle\,\langle x'|\,\hat{p}\,|x\rangle \\ &= \int dx'\,|x'\rangle\left[-i\hbar\frac{d}{dx'}\delta(x' - x)\right] \\ &= -i\hbar\int dx'\,|x'\rangle\left[\frac{d}{dx'}\delta(x' - x)\right]\end{aligned}$$

この場合 (C2) と異なり微分が dx' になっているためそのまま積分の外に出せず、δ 関数にも微分がかかっているので通常の積分ができない。そこで部分積分を行うと

$$\hat{p}\,|x\rangle = i\hbar\int dx'\left[\frac{d}{dx'}\,|x'\rangle\right]\delta(x' - x) \quad \leftarrow (\text{表面項は}\,\delta(x' - x)\,\text{が消えるので}\,0)$$

となる。δ 関数の微分が外れたので積分が実行でき

$$\hat{p}\,|x\rangle = i\hbar\frac{d}{dx}\,|x\rangle$$

つまり

$$\langle x|\,\hat{p} = -i\hbar\frac{d}{dx}\,\langle x|\,, \quad \hat{p}\,|x\rangle = +i\hbar\frac{d}{dx}\,|x\rangle$$

となる。

演算子の座標表示を用いることで、これまで波動関数を用いて計算されていた結果が状態ベクトルで表現できることがわかる。例えば、式 (41) の状態ベクトルのシュレディンガー方程式より

$$
\begin{aligned}
\hat{H}\left|\phi\right\rangle &= E\left|\phi\right\rangle \\
\int dx \left|x\right\rangle \left\langle x\right| \left[\frac{\hat{p}^2}{2m} + V(\hat{x})\right] \left|\phi\right\rangle &= E\int dx \left|x\right\rangle \left\langle x|\phi\right\rangle \\
\int dx \left[\frac{(-i\hbar\frac{d}{dx})^2}{2m} + V(x)\right] \left|x\right\rangle \left\langle x|\phi\right\rangle &= E\int dx \left|x\right\rangle \left\langle x|\phi\right\rangle \\
\int dx \left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + V(x)\right] \phi(x) \left|x\right\rangle &= E\int dx\phi(x) \left|x\right\rangle \\
\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + V(x)\right] \phi(x) &= E\phi(x)
\end{aligned}
$$

と座標表示のシュレディンガー方程式が得られる。