Hermite 共役と Hermite 演算子の定義

2 つの演算子 $\hat{A},\ \hat{B}$ が任意の関数 $\psi,\ \phi$ に対して，

$$\left(\int \psi^* \hat{A}\phi \ \mathrm{d}^3 r\right)^* = \int \phi^* \hat{B}\psi \ \mathrm{d}^3 r \tag{1}$$

を満たすとき,「$\hat{B}$ は $\hat{A}$ の**Hermite**(エルミート)**共役**(きょうやく)である」と言う。

$\longrightarrow \hat{B} = \hat{A}^\dagger$ と書く。

とくに，Hermite 共役が自分自身と等しい $\hat{A} = \hat{A}^\dagger$ とき，$\hat{A}$ を Hermite 演算子という。

すなわち，Hermite 演算子は次式を満足する。

$$\left(\int \psi^* \hat{A}\phi \ \mathrm{d}^3 r\right)^* = \int \phi^* \hat{A}\psi \ \mathrm{d}^3 r \qquad \text{Hermite 演算子の定義} \tag{2}$$

(2) 式の左辺を次のように変形する。

$$\begin{aligned}
\text{左辺} &= \int \left(\psi^* \hat{A}\phi\right)^* \mathrm{d}^3 r && \text{積分してから複素共役をとるのと，} \\
& && \text{複素共役をとってから積分するのは同じだから} \\
&= \int (\psi^*)^* \left(\hat{A}\phi\right)^* \mathrm{d}^3 r && (a \times b)^* = a^* \times b^* \\
&= \int \psi \left(\hat{A}\phi\right)^* \mathrm{d}^3 r && (a^*)^* = a \\
&= \int \left(\hat{A}\phi\right)^* \psi \ \mathrm{d}^3 r
\end{aligned} \tag{3}$$

よって，次式を Hermite 演算子の定義として用いても良い。

$$\int \left(\hat{A}\phi\right)^* \psi \ \mathrm{d}^3 r = \int \phi^* \hat{A}\psi \ \mathrm{d}^3 r \qquad \text{Hermite 演算子の定義 2} \tag{4}$$

Hermite 演算子の性質 I

Hermite 演算子の固有値は実数である。

証明　$\hat{F}$ を Hermite 演算子とし，その固有値を f，対応する固有関数を ψ とする。すなわち，次式が成り立つとする。

$$\hat{F}\psi = f\psi \tag{5}$$

(5) 式の両辺に左から ψ^* をかけて積分する。

$$\begin{aligned}\int \psi^* \hat{F}\psi \mathrm{d}^3 r &= \int \psi^* f\psi \mathrm{d}^3 r \\ &= f\int \psi^* \psi \mathrm{d}^3 r \quad \xrightarrow{\text{右辺と左辺を入れ換えると}} \quad f\int \psi^* \psi \mathrm{d}^3 r = \int \psi^* \hat{F}\psi \mathrm{d}^3 r\end{aligned} \tag{6}$$

ここで，(6) 式の両辺の複素共役をとると，

$$\begin{aligned}f^* \int \psi^* \psi \mathrm{d}^3 r &= \left(\int \psi^* \hat{F}\psi \mathrm{d}^3 r\right)^* \\ &= \int \psi^* \hat{F}^\dagger \psi \mathrm{d}^3 r = \int \psi^* \hat{F}\psi \mathrm{d}^3 r \qquad \hat{F}\text{は Hermite 演算子だから}\end{aligned} \tag{7}$$

となる。(6) 式と (7) 式の右辺は同じものだから，左辺どうしも等しいはずである。

$$f\int \psi^* \psi \mathrm{d}^3 r = f^* \int \psi^* \psi \mathrm{d}^3 r \quad \xrightarrow{\text{両辺を}\int \psi^* \psi \mathrm{d}^3 r\text{で割ると}} \quad f = f^* \tag{8}$$

$f = f^*$ が得られたが，これが成り立つのは f が実数の場合だけである。すなわち，Hermite 演算子の固有値は実数に限定される。 □

Hermite 演算子の性質 II

Hermite 演算子 $\hat{F}$ の異なる固有値に対応する固有関数は**直交**(ちょっこう)する。

「関数が直交する」とは，2 つの波動関数の積を積分した結果が 0 になることをいう。すなわち，ψ_i と ψ_j を異なった固有値 f_i，f_j に対応する波動関数とすれば，次式が成立する[1]。

$$\int \psi_i^* \psi_j \mathrm{d}^3 r \quad = \quad 0 \tag{9}$$

$\boxed{\text{証明}}$ $\hat{F}$ を Hermite 演算子，$\hat{F}$ の異なった固有値を f_i，f_j とし，それぞれに対応する固有関数を ψ_i, ψ_j とする。すなわち，次式が成り立つとする。

$$\begin{cases} \hat{F}\psi_i = f_i \psi_i \\ \hat{F}\psi_j = f_j \psi_j \end{cases} \tag{10}$$

(10) 上式の両辺に左から ψ_j^* をかけて積分すると次式を得る。

$$\int \psi_j^* \hat{F} \psi_i \mathrm{d}^3 r = f_i \int \psi_j^* \psi_i \mathrm{d}^3 r \tag{11}$$

この式の両辺の複素共役をとると次式を得る。ただし，$\hat{F}$ が Hermite 演算子であること $\left(\int \psi_j^* \hat{F} \psi_i \mathrm{d}^3 r \right)^* = \int \psi_i^* \hat{F} \psi_j \mathrm{d}^3 r$，$f_i$ が実数であること $f^* = f$ を考慮した。

$$\int \psi_i^* \hat{F} \psi_j \mathrm{d}^3 r = f_i \int \psi_i^* \psi_j \mathrm{d}^3 r \tag{12}$$

次に (10) 下式の両辺に左から ψ_i^* をかけて積分すると次式を得る。

$$\int \psi_i^* \hat{F} \psi_j \mathrm{d}^3 r = f_j \int \psi_i^* \psi_j \mathrm{d}^3 r \tag{13}$$

(12) 式と (13) 式の左辺は同じものだから，(12) 式と (13) 式の辺々を差し引いて，次のように変形できる。

$$(f_i - f_j) \int \psi_i^* \psi_j \mathrm{d}^3 r = 0 \quad \xrightarrow{\text{両辺を } (f_i - f_j) \text{ で割ると}} \quad \int \psi_i^* \psi_j \mathrm{d}^3 r = 0 \tag{14}$$

ここでは $f_i \neq f_j$ を仮定しているから，両辺を $f_i - f_j \neq 0$ で割ってよい。以上より，異なった固有値に対応する固有関数は直交することが示された。 □

[1] この Hermite 演算子の固有関数に関する性質は，将来的に「縮退した波動関数」へ拡張する。