演算子

1. 交換関係

演算子に対しては和の交換則は成立するが、積の交換則は成立しない。すなわちA, Bを演算子とすると、一般には

$$A + B = B + A$$
$$AB \neq BA$$

である。そこで

$$[A, B] = AB - BA$$

と定義し、これを交換子とよぶ。
一般に、交換子には次のような関係がなりたつ。ただし、A, B, Cは演算子、kは単なる数（一般に複素数）であるとする。

(1)　$[A, B] = -[B, A]$

証明

$$[A, B] = AB - BA = -(BA - AB) = -[B, A]$$

(2)　$[kA, B] = [A, kB] = k[A, B]$

証明

$$[kA, B] = (kA)B - B(kA) = k(AB - BA) = k[A, B]$$
$$[A, kB] = A(kB) - (kB)A = k(AB - BA) = k[A, B]$$

(3)　$[A, B + C] = [A, B] + [A, C]$

証明

$$[A, B + C] = A(B + C) - (B + C)A = AB + AC - BA - CA$$
$$= AB - BA + AC - CA = [A, B] + [A, C]$$

(4)$[A, BC] = B[A, C] + [A, B]C$

証明

$$[A, BC] = A(BC) - (BC)A = ABC + BAC - BAC - BCA$$
$$= BAC - BCA + ABC - BAC = B(AC - CA) + (AB - BA)C = B[A, C] + [A, B]C$$

2. エルミート共役

演算子Aに対して

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

の関係を満たす演算子を、Aのエルミート共役な演算子と呼び$A^{\dagger}$と表記する。エルミート共役な演算子には次のような関係がなりたつ。ただし、A, B, Cは演算子、kは単なる数（一般に複素数）であるとする。

(1) $(kA)^{\dagger} = k^{*}A^{\dagger}$

証明

$$\langle\psi|kA\varphi\rangle = k\langle\psi|A\varphi\rangle = k\langle A^{\dagger}\psi|\varphi\rangle = \langle k^{*}A^{\dagger}\psi|\varphi\rangle$$

(2) $(A+B)^{\dagger} = A^{\dagger} + B^{\dagger}$

証明

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

(3) $(AB)^{\dagger} = B^{\dagger}A^{\dagger}$

証明

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

(4) $(A^{2})^{\dagger} = (A^{\dagger})^{2}$

証明

$$(A^{2})^{\dagger} = (AA)^{\dagger} = A^{\dagger}A^{\dagger} = (A^{\dagger})^{2}$$

3. 不確定性関係

任意の実数 t とエルミート演算子 A, B に対して $C = A + itB$ と置くと、そのエルミート共役な演算子は、$C^\dagger = A - itB$ となる。また $\langle C\varphi | C\varphi \rangle$ は関数 $C|\varphi\rangle$ の絶対値の自乗を積分したものであるから必ず正になる。すなわち

$$\langle C\varphi | C\varphi \rangle = \langle \varphi | C^\dagger C | \varphi \rangle = \langle C^\dagger C \rangle \geq 0$$

となる。これを展開すると

$$\begin{aligned}\langle C^\dagger C \rangle &= \langle (A - itB)(A + itB) \rangle = \langle A^2 + itAB - itBA + t^2 B^2 \rangle \\ &= \langle A^2 \rangle + it\langle AB - BA \rangle + t^2 \langle B^2 \rangle \\ &= \langle A^2 \rangle + it\langle [A,B] \rangle + t^2 \langle B^2 \rangle \geq 0\end{aligned}$$

ここで、左辺右辺とも実数であるには$\langle [A,B] \rangle$は純虚数でなければならない。そこで任意の実数t について

$$t^2 \langle B^2 \rangle + t \left| \langle [A,B] \rangle \right| + \langle A^2 \rangle \geq 0$$

もしくは

$$t^2 \langle B^2 \rangle - t \left| \langle [A,B] \rangle \right| + \langle A^2 \rangle \geq 0$$

の関係を満たされることになる。どちらの関係であっても

$$\left| \langle [A,B] \rangle \right|^2 - 4 \langle A^2 \rangle \langle B^2 \rangle \leq 0 \text{（二次方程式の判別式）}$$

の条件が成立する。すなわち

$$\sqrt{\langle A^2 \rangle} \sqrt{\langle B^2 \rangle} \geq \frac{1}{2} \left| \langle [A,B] \rangle \right|$$

そこでたとえば、$A = p_x - \langle p_x \rangle$, $B = x - \langle x \rangle$とおくと、

$$\begin{aligned}\langle A^2 \rangle &= \left\langle \left(p_x - \langle p_x \rangle \right)^2 \right\rangle = \left\langle {p_x}^2 - 2\langle p_x \rangle p_x + \langle p_x \rangle^2 \right\rangle \\ &= \left\langle {p_x}^2 \right\rangle - 2\langle p_x \rangle \langle p_x \rangle + \left\langle \langle p_x \rangle^2 \right\rangle = \left\langle {p_x}^2 \right\rangle - \langle p_x \rangle^2\end{aligned}$$

よって$\sqrt{\left\langle \left(p_x - \langle p_x \rangle \right)^2 \right\rangle} = \Delta p_x$。同様にして$\sqrt{\left\langle \left(x - \langle x \rangle \right)^2 \right\rangle} = \Delta x$。また、

$$\begin{aligned}[A,B] &= [p_x - \langle p_x \rangle, x - \langle x \rangle] \\ &= [p_x, x] - [\langle p_x \rangle, x] - [p_x, \langle x \rangle] + [\langle p_x \rangle, \langle x \rangle] \\ &= [p_x, x] = \frac{\hbar}{i}\end{aligned}$$

であるから

$$\Delta p_x \Delta x \geq \frac{\hbar}{2}$$

のような不確定性関係が成立する。