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 7 章
物理量と測定

古典力学では物理量は系の状態から直接求められるものであった．すなわち，状態の単なる関数として表すことができた．量子力学では状態が同じであっても測定するたびに異なった値が得られることが普通である (統計性).

また, 古典力学では測定による系の状態変化を原理的にいくらでも小さくすることが許されている．それに対して, 量子力学では, 測定は本質的に系に影響を及ぼす形でしかなしえず, 測定後の系の状態は一般に測定前の状態とは異なっており, その変化の仕方は測定結果に依存している (測定の反作用).

古典力学では測定結果は連続的な値をとるのが普通であるが, 量子力学では離散的な特定の値しかとれない場合も多い (値の離散性).

7.1　量子系における物理量と測定

量子力学における物理量と測定の概要をまず, 簡単な例を用いて具体的に説明しよう．右円偏光 $|\mathrm{R}\rangle$, 左円偏光 $|\mathrm{L}\rangle$ の光子は進行方向に沿った角運動量成分 $\hbar$, $-\hbar$ をそれぞれ持つことが知られている．一般の偏光をもった光子の状態は

$$|\psi\rangle = \alpha|\mathrm{R}\rangle + \beta|\mathrm{L}\rangle, \quad (|\alpha|^2 + |\beta|^2 = 1) \tag{7.1}$$

で表される．この状態に対する角運動量成分を測定すると

$$J_z = (+\hbar)|\alpha|^2 + (-\hbar)|\beta|^2 \tag{7.2}$$

が得られると思うのが自然である. 意外なことに, 測定によって得られる値は $\hbar$ か $-\hbar$ のどちらかであって, 中間の値は決して出現しない. しかも, 全く同じ状態の光子を用意しても, どちらの値が出るかは予測がつかない. ただ, それぞれの生起確率が $|\alpha|^2$, $|\beta|^2$ であることは多数のサンプルに対して測定を行うと確かめることができる. したがって, 期待値, あるいは平均値が式 (7.2) で与えられているにすぎない.

たとえば, 水平偏光光子 $|\mathrm{H}\rangle = (|\mathrm{R}\rangle + |\mathrm{L}\rangle)/\sqrt{2}$ は $\alpha = \beta = 1/\sqrt{2}$ であるが, これをたくさん準備して, 角運動量の z 成分の測定を行うと, $\hbar$ か $-\hbar$ がコイン投げの裏と表のように次々と得られる. 期待値は 0 である.

測定を行った光子は最早, もとの状態にはない. $\hbar$ の結果を得た光子に対して再度測定を行うと必ず $\hbar$ の値が得られることから, 測定後の状態は $|\mathrm{R}\rangle$ になっていると思われる. 逆に, $-\hbar$ が得られた場合には, $|\mathrm{L}\rangle$ に変化しているように見える. すなわち,

$$|\mathrm{H}\rangle \to \text{測定} \to \begin{cases} |\mathrm{R}\rangle & +\hbar \text{ のとき} \\ |\mathrm{L}\rangle & -\hbar \text{ のとき} \end{cases}. \tag{7.3}$$

7.2 測定を与える演算子

古典論では物理量は状態変数の関数にすぎなかった. しかし, 量子論では, 物理量の役割は複合的であり,

- 値の候補　(離散的, 連続量の場合はその範囲)
- 系の状態が与えられたとき, それぞれの値が得られる確率
- 各値が得られた場合の, 測定後の状態

を与えるものでなければならない. これらの役割をまとめて担うのがエルミート演算子である. 今, ある物理量 A に対応するエルミート演算子を $\hat{A}$ としよう. $\hat{A}$ のスペクトル分解を

$$\hat{A} = \sum_{i=1}^{n} a_i \hat{P}_i = \sum_{i=1}^{n} a_i |a_i\rangle\langle a_i| \tag{7.4}$$

とすると, 当該物理量が取りうる値の集合は $\hat{A}$ のスペクトル (固有値全体) $\{a_i\}$ で与えられる. エルミート演算子の固有値 a_i は実数であることに注意する.

系の状態 $|\psi\rangle$ を $\hat{A}$ の正規化された固有ケット $|a_i\rangle$ で展開する:

$$|\psi\rangle = \sum_{i=1}^{n} \xi_i |a_i\rangle. \tag{7.5}$$

このとき, 測定値が a_i である確率は

$$P_\psi(a_i) = |\xi_i|^2 \tag{7.6}$$

で与えられる．これをボルンの規則という．特に, 状態が固有状態の 1 つであるとき, 例えば $|\psi\rangle = |a_j\rangle$ である場合には確率 1 で測定結果は a_j である．そうでない場合には測定結果を確実に予測するとはできず, 確率が計算できるだけである．確率は

$$\begin{aligned} P_\psi(a_i) &= ||\hat{P}_i|\psi\rangle||^2 = |||a_i\rangle\langle a_i|\psi\rangle||^2 \\ &= \langle\psi|a_i\rangle\langle a_i|\psi\rangle = \langle\psi|\hat{P}_i|\psi\rangle \end{aligned} \tag{7.7}$$

などとも書ける．$\sum_i P_\psi(a_i) = 1$ が成り立つことに注意する．

測定によって系の状態は一般に変化する．理想的な測定に対しては, 測定結果が a_i であった場合, 測定直後の状態は $|a_i\rangle$ である．このような測定を射影測定という[*1)]．事後の状態は, 正規化によって

$$|\psi'\rangle = \frac{\hat{P}_i|\psi\rangle}{||\hat{P}_i|\psi\rangle||} = \frac{\xi_i|a_i\rangle}{|\xi_i|} = \mathrm{e}^{\mathrm{i}\phi}|a_i\rangle \tag{7.8}$$

と表すことができる．位相因子 ϕ は不定である．

このように, エルミート演算子とそのスペクトル分解 (7.4) が, 量子論における物理量の機能を果たしていることが分かる．

射影演算子 $\hat{P}_i$ も物理量を表していると考えることができる．すなわち, 状態が $|a_i\rangle$ の場合に値が 1, その他の場合には 0 となる物理量であると考えるのである．固有値は $(n-1)$ 重に縮退している．

7.3 平均値

多数回の測定を行う場合には, 測定値の平均値や分散に関心が向くだろう．これらは確率分布 $P(a_i)$ から求めることができる．状態 $|\psi\rangle$ に対する物理量 A の測定の平均値は

$$\langle\hat{A}\rangle_\psi = \sum_{i=1}^{n} a_i P_\psi(a_i) = \sum_{i=1}^{n}\langle\psi|a_i\rangle a_i\langle a_i|\psi\rangle = \langle\psi|\hat{A}|\psi\rangle \tag{7.9}$$

のように覚えやすい形に書ける．分散の計算に必要な 2 次のモーメントも

$$\langle\hat{A}^2\rangle_\psi = \sum_{i=1}^{n} a_i^2 P_\psi(a_i) = \sum_{i=1}^{n}\langle\psi|a_i\rangle a_i^2\langle a_i|\psi\rangle = \langle\psi|\hat{A}^2|\psi\rangle \tag{7.10}$$

とかける．ばらつきを表す分散は

$$\langle(\delta\hat{A})^2\rangle_\psi = \langle\hat{A}^2\rangle_\psi - (\langle\hat{A}\rangle_\psi)^2 \tag{7.11}$$

である．

*1) 一般的な測定に関しては第 14 章でのべる

7.4 トレースと演算子の内積

演算子 $\hat{A}$ のトレース (trace) は

$$\mathrm{Tr}\,\hat{A} = \sum_{i=1}^{n} \langle e_i|\hat{A}|e_i\rangle \tag{7.12}$$

と定義される．すなわち, 行列表示したときの対角要素の和である．トレースは行列を用いて定義されてはいるが, 基底の選びかたには無関係な量である．実際,

$$\begin{aligned}
\mathrm{Tr}\,\hat{A} &= \sum_j \sum_k \sum_i \langle e_i|e'_j\rangle\langle e'_j|\hat{A}|e'_k\rangle\langle e'_k|e_i\rangle \\
&= \sum_j \sum_k \sum_i \langle e'_k|e_i\rangle\langle e_i|e'_j\rangle\langle e'_j|\hat{A}|e'_k\rangle \\
&= \sum_j \sum_k \langle e'_k|e'_j\rangle\langle e'_j|\hat{A}|e'_k\rangle \\
&= \sum_j \sum_k \delta_{kj}\langle e'_j|\hat{A}|e'_k\rangle = \sum_j \langle e'_j|\hat{A}|e'_j\rangle
\end{aligned} \tag{7.13}$$

である．

問題 7.1 $\hat{1}$, $|a\rangle\langle a|$, $|a\rangle\langle b|$ のトレースをそれぞれ求めよ．

$\hat{A}$ が対角化可能である場合には, その基底で展開して

$$\mathrm{Tr}\,\hat{A} = \sum_{i=1}^{n} a_i\langle e_i|e_i\rangle = \sum_{i=1}^{n} a_i \tag{7.14}$$

が得られる．(重複を含めた) 固有値の和に等しいことがわかる．

また,

$$\begin{aligned}
&\mathrm{Tr}(c_1\hat{A}_1 + c_2\hat{A}_2) = c_1\,\mathrm{Tr}\,\hat{A}_1 + c_2\,\mathrm{Tr}\,\hat{A}_2 \\
&\mathrm{Tr}(\hat{A}_1\hat{A}_2\cdots\hat{A}_n) = \mathrm{Tr}(\hat{A}_n\hat{A}_1\cdots\hat{A}_{n-1})
\end{aligned} \tag{7.15}$$

が成り立つ．

2 つの演算子 $\hat{A}$, $\hat{B}$ の内積を

$$(\hat{A},\hat{B}) = \mathrm{Tr}(\hat{A}^\dagger\hat{B}) = \sum_i \sum_j A^*_{ij}B_{ij} \tag{7.16}$$

で定義してみよう[*2]．以下のような, 内積にふさわしい性質が成り立つ．

*2) 演算子の内積にはいくつかの（本質的に異なる）定義がある．ここでの定義は複素ベクトルの内積を自然な形で拡張したものである．$(\boldsymbol{a},\boldsymbol{b}) = \sum_i a^*_i b_i$ と比較すればよい．

$$
\begin{aligned}
(c_1\hat{A}_1 + c_2\hat{A}_2, \hat{B}) &= c_1^*(\hat{A}_1, \hat{B}) + c_2^*(\hat{A}_2, \hat{B}) \\
(\hat{A}, c_1\hat{B}_1 + c_2\hat{B}_2) &= c_1(\hat{A}, \hat{B}_1) + c_2(\hat{A}, \hat{B}_2) \\
(\hat{B}, \hat{A}) &= (\hat{A}, \hat{B})^* \\
||\hat{A}||^2 &= (\hat{A}, \hat{A}) \geq 0 \\
||\hat{A}||||\hat{B}|| &\geq (\hat{A}, \hat{B})
\end{aligned} \tag{7.17}
$$

ここで, 演算子の大きさを

$$
||\hat{A}||^2 = \mathrm{Tr}(\hat{A}^\dagger \hat{A}) \tag{7.18}
$$

と定義した. ベクトル $\boldsymbol{a}$, $\boldsymbol{b}$ の内積 $(\boldsymbol{a}, \boldsymbol{b})$ がこれらベクトルの重なり具合を示しているのと同じように, $(\hat{A}, \hat{B})$ は演算子の重なり (一致度) を与えている.

とくに, $\hat{A}$ がエルミートの場合は,

$$
(\hat{A}, \hat{B}) = \mathrm{Tr}\, \hat{A}\hat{B} \tag{7.19}
$$

でよい.

余談

トレースの定義 (7.12) には本来無関係なはずの基底が用いられていて, 不自然な感じがする. 基底を用いない方法を考えてみよう. まず, ケットとブラからなる演算子 $|u\rangle\langle v|$ に対して,

$$
|u\rangle\langle v| = \langle v|u\rangle \tag{7.20}
$$

のような作用を定義する. ケットとブラを切り離して, "$*$" のところで糊付けをするのである. 一方,

$$
\mathrm{Tr}\, |u\rangle\langle v| = \sum_i \langle e_i|u\rangle\langle v|e_i\rangle = \sum_i \langle v|e_i\rangle\langle e_i|u\rangle = \langle v|u\rangle \tag{7.21}
$$

であり, 式 (7.20) と一致する. 任意の演算子は $\hat{A} = \sum_j |u_j\rangle\langle v_j|$ と展開できるので,

$$
\mathrm{Tr}\, \hat{A} = *\hat{A}* = \sum_j *|u_j\rangle\langle v_j|* \tag{7.22}
$$

によって, 基底に依存しない方法でトレースを定義することができる.

7.5 行列式

演算子の行列式 (determinant) を定義しておく. $n = \dim\mathcal{H}$ とおく. まず, $\mathrm{vol}(|f_1\rangle, \ldots, |f_n\rangle)$ を, n 個のケット $|f_1\rangle, \ldots, |f_n\rangle$ が張る平行 $n(n-1)$ 面体の体積である (複素ベクトルなので通常の体積とはやや異なることに注意する). これは, $\mathcal{H}^n$ から $\mathbb{C}$ への多重線形写像である. また, 反対称性, すなわち

$$\mathrm{vol}(\ldots,|f_j\rangle,\ldots,|f_i\rangle,\ldots) = -\mathrm{vol}(\ldots,|f_i\rangle,\ldots,|f_j\rangle,\ldots) \tag{7.23}$$

が任意の i, j について成り立っている．これより，

$$\mathrm{vol}(\ldots,|f_i\rangle,\ldots,|f_i\rangle,\ldots) = 0. \tag{7.24}$$

$|f_i\rangle = \hat{A}|e_i\rangle = \sum_{j=1}^{n}|e_j\rangle A_{ji}$ のように各ケットを展開したものを, 代入すると,

$$\begin{aligned}\mathrm{vol}(|f_1\rangle,\ldots,|f_n\rangle) &= \mathrm{vol}(\hat{A}|e_1\rangle,\ldots,\hat{A}|e_n\rangle)\\ &= \mathrm{vol}(\sum_j A_{j1}|e_j\rangle,\ldots,\sum_k A_{kn}|e_k\rangle)\\ &= \sum_{\sigma\in S_n}\prod_{i=1}^{n} A_{i,\sigma(i)}\mathrm{vol}(|e_{\sigma(1)}\rangle,\ldots,|e_{\sigma(n)}\rangle)\\ &= \sum_{\sigma\in S_n}\prod_{i=1}^{n} A_{i,\sigma(i)}\mathrm{sgn}(\sigma)\mathrm{vol}(|e_1\rangle,\ldots,|e_n\rangle)\end{aligned} \tag{7.25}$$

と表される．S_n は n 次の置換群, $\mathrm{sgn}(\sigma)$ は置換 σ の符号を表す．

この結果を用いて, 演算子 $\hat{A}$ の行列式を

$$\det\hat{A} = \frac{\mathrm{vol}(\hat{A}|e_1\rangle,\ldots,\hat{A}|e_n\rangle)}{\mathrm{vol}(|e_1\rangle,\ldots,|e_n\rangle)} \tag{7.26}$$

と定義する．分母は正規直交基底のベクトルからなるので ±1 である．対角的な場合には $\det\hat{A} = \prod_{i=1}^{n} a_i$.

$\det\hat{A}$ は正規直交基底がつくる正 $n(n-1)$ 面体の体積 (±1) とそれを $\hat{A}$ で変換して得られる平行 $n(n-1)$ 面体の体積の比を与えている．

問題 7.2 $\det(\exp\hat{A}) = \exp(\mathrm{Tr}\,\hat{A})$ が成り立つことを示せ．

7.6 密度演算子と射線

$|\psi'\rangle = \mathrm{e}^{\mathrm{i}\phi}|\psi\rangle$ に対する $\hat{A}$ の期待値を計算すると,

$$\langle\psi'|\hat{A}|\psi'\rangle = \langle\psi|\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\phi}\hat{A}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\phi}|\psi\rangle = \langle\psi|\hat{A}|\psi\rangle \tag{7.27}$$

となって, $|\psi\rangle$ に対するものと同じになる．つまり, $|\psi\rangle$ と $|\psi'\rangle$ は状態として区別ができないということである．したがって, 状態に対応するのは, 1 つ 1 つのケットではなく, ケットの集合

$$\{\mathrm{e}^{\mathrm{i}\phi}|\psi\rangle \in \mathcal{H} \mid -\pi \le \phi < \pi\} \tag{7.28}$$

とする方が正確だといえる．このように位相因子だけが異なるケットの集合を射線 (ray) または, ファイバー (fiber) という．ここで慌てて, 位相因子は無視してよいと思ってはいけない．複数のケットの和をつくるときには, 相対位相が

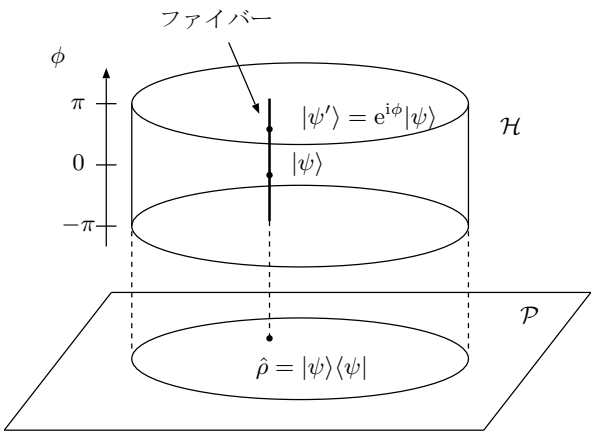

図 7.1　ヒルベルト空間の射線構造

意味をもってくる. 無視してよいのは, 全体にかかる共通因子である*3).

射線全体の集合を底集合 (base space) $\mathcal{P}$ とよぶ. $\mathcal{P}$ は線形空間ではない. 通常, 正規化された状態に対応する射線だけを考える. 実数としての, 自由度は $2n-1-1$ である

物理量の平均値を

$$\begin{aligned}\langle\hat{A}\rangle_\psi &= \langle\psi|\hat{A}|\psi\rangle = \langle\psi|\hat{1}\hat{A}|\psi\rangle \\ &= \sum_i \langle\psi|e_i\rangle\langle e_i|\hat{A}|\psi\rangle \\ &= \sum_i \langle e_i|\hat{A}|\psi\rangle\langle\psi|e_i\rangle = \mathrm{Tr}\left(\hat{A}|\psi\rangle\langle\psi|\right) = \mathrm{Tr}(\hat{A}\hat{\rho}) = (\hat{A},\hat{\rho}) \quad (7.29)\end{aligned}$$

のように変形すると, 物理量と状態をいくぶん分離した形に表せる. $\mathrm{Tr}\,\hat{A}\hat{B}$ はエルミート演算子の内積であることを思いだそう [式 7.19]. ここで,

$$\hat{\rho} = |\psi\rangle\langle\psi| \in \mathcal{P} \tag{7.30}$$

は正規化されたケット $|\psi\rangle$ に対して定義される演算子で, 密度演算子 (density operator) と呼ばれる. 射影演算子の形をしている. (後にさらに一般的な定義が与えられる.)

実際, 密度演算子はエルミートである. また, 式 (7.30) の形から

$$\hat{\rho}^2 = \hat{\rho} \tag{7.31}$$

が成り立っていることが分かる. したがって, 固有値は 0 または 1 である. また, $\mathrm{Tr}\,\hat{\rho} = 1$ であることも容易に確かめられる.

状態 $|\psi'\rangle = \mathrm{e}^{\mathrm{i}\phi}|\psi\rangle$ もおなじ密度演算子を与えることに注意する. つまり, 密

*3)　この位相が問題になる場面もある. 幾何学的位相あるいは Berry 位相と呼ばれているものである.

度演算子と射線は 1 対 1 に対応しているということである.

$\hat{\rho}$ の成分は

$$\rho_{ij} = \langle e_i|\hat{\rho}|e_j\rangle = \langle e_i|\psi\rangle\langle\psi|e_j\rangle = \xi_i\xi_j^* \tag{7.32}$$

であり, 成分表示は

$$\hat{\rho} = \sum_{i,j} \rho_{ij}|e_i\rangle\langle e_j| = \sum_{i,j} \xi_i\xi_j^*|e_i\rangle\langle e_j| \tag{7.33}$$

となる.

問題 7.3 状態 $|\mathrm{H}\rangle$, $|\mathrm{D}\rangle = (|\mathrm{H}\rangle + |\mathrm{V}\rangle)/\sqrt{2}$ に対応する密度演算子をそれぞれ求めよ.

密度演算子に対する運動方程式を求めてみよう.

$$-\mathrm{i}\hbar\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\langle\psi| = \langle\psi|\hat{H} \tag{7.34}$$

より,

$$\begin{aligned}\mathrm{i}\hbar\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\hat{\rho} &= \left(\mathrm{i}\hbar\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}|\psi\rangle\right)\langle\psi| + |\psi\rangle\left(\mathrm{i}\hbar\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\langle\psi|\right) \\ &= \hat{H}|\psi\rangle\langle\psi| - |\psi\rangle\langle\psi|\hat{H} = [\hat{H}, \hat{\rho}]\end{aligned} \tag{7.35}$$

が得られる. すなわち,

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\hat{\rho} = [\hat{H}, \hat{\rho}] \tag{7.36}$$

が求める運動方程式である. 解は

$$\rho(t) = \hat{U}(t)\hat{\rho}(0)\hat{U}^\dagger(t) \tag{7.37}$$

である.

ハイゼンベルク描像における, 物理量を表す演算子の運動方程式 (6.27) とは符号が異なっていることに注意する. 時間変化する密度演算子はシュレディンガー描像に属するものであって, 運動の「向き」は逆でよい. すなわち,

$$\begin{aligned}\langle\hat{A}(t)\rangle &= \mathrm{Tr}\,\hat{A}\hat{\rho}(t) = \mathrm{Tr}\,\hat{A}\hat{U}(t)\hat{\rho}(0)\hat{U}^\dagger(t) && \text{シュレディンガー描像} \\ &= \mathrm{Tr}\,\hat{A}(t)\hat{\rho} = \mathrm{Tr}\,\hat{U}^\dagger(t)\hat{A}\hat{U}(t)\hat{\rho} && \text{ハイゼンベルク描像}\end{aligned} \tag{7.38}$$

である.

7.7 不確定関係

2 つの交換しないエルミート演算子 $\hat{A}$, $\hat{B}$ を考える．交換子 $[\hat{A}, \hat{B}]$ の共役は

$$(\hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A})^\dagger = \hat{B}^\dagger\hat{A}^\dagger - \hat{A}^\dagger\hat{B}^\dagger = \hat{B}\hat{A} - \hat{A}\hat{B} = -[\hat{B}, \hat{A}] \tag{7.39}$$

であり, $[\hat{A}, \hat{B}]$ は反エルミートである．したがって,

$$[\hat{A}, \hat{B}] = \mathrm{i}\hat{C} \tag{7.40}$$

のようにエルミート演算子 $\hat{C}$ を用いて表すことができる．

今, 状態 $|\psi\rangle \in \mathcal{H}$ を固定して, この状態に関する演算子の期待値を $\langle\hat{A}\rangle = \langle\psi|\hat{A}|\psi\rangle$ と表すことにする．

$\hat{A}$, $\hat{B}$ の平均値からのずれを

$$\delta\hat{A} = \hat{A} - \langle\hat{A}\rangle\hat{1}, \quad \delta\hat{B} = \hat{B} - \langle\hat{B}\rangle\hat{1} \tag{7.41}$$

で表すことにする．$\langle\delta\hat{A}\rangle = 0$, $\langle\delta\hat{B}\rangle = 0$ である．また,

$$[\delta\hat{A}, \delta\hat{B}] = \mathrm{i}\hat{C} \tag{7.42}$$

であることは簡単に示すことができる．ここで, $\hat{D}_\lambda = \delta\hat{A} + \mathrm{i}\lambda\delta\hat{B}$ を導入する．λ は実数である．任意の $|\psi\rangle \in \mathcal{H}$ に対して, $\langle\psi|\hat{D}_\lambda^\dagger\hat{D}_\lambda|\psi\rangle = ||\hat{D}_\lambda|\psi\rangle||^2 \geq 0$ なので

$$\begin{aligned}\langle\hat{D}_\lambda^\dagger\hat{D}_\lambda\rangle &= \langle(\delta\hat{A} - \mathrm{i}\lambda\delta\hat{B})(\delta\hat{A} + \mathrm{i}\lambda\delta\hat{B})\rangle \\ &= \langle\delta\hat{A}^2\rangle + \lambda\langle\hat{C}\rangle + \lambda^2\langle\delta\hat{B}^2\rangle \geq 0\end{aligned} \tag{7.43}$$

この不等式が λ によらず成り立つためには, 2 次方程式の判別式から

$$\langle\hat{C}\rangle^2 - 4\langle\delta\hat{A}^2\rangle\langle\delta\hat{B}^2\rangle \leq 0 \tag{7.44}$$

となることが必要である．すなわち, 条件

$$\langle\delta\hat{A}^2\rangle\langle\delta\hat{B}^2\rangle \geq \frac{\langle\hat{C}\rangle^2}{4} \tag{7.45}$$

が常に成り立つ．

物理量 $\hat{A}$, $\hat{B}$ に対するゆらぎの下限を制限する不等式が得られた．実用上, よく現れるのは, $\hat{C} = \hbar\hat{1}$ となる場合 (正準交換関係) であり, これらの物理量は相補的であると呼ばれる．この場合,

$$\langle\delta\hat{A}^2\rangle\langle\delta\hat{B}^2\rangle \geq \frac{\hbar^2}{4} \tag{7.46}$$

であり, 一方の物理量に対するゆらぎが小さい状態に対して, もう一方の物理量のゆらぎがそれを補うように大きくなるという関係が存在する．

$\hat{A}$, $\hat{B}$ が交換可能な場合, つまり $\hat{C}=0$ の場合には, 双方のゆらぎが 0 の状態が許されることになる. 実際, $|\psi\rangle$ として, $\hat{A}$, $\hat{B}$ の同時固有ケットを選べば, 双方のゆらぎはゼロとなる.

7.8 測定の効果

測定の概念を再度まとめると, 次のようになる.

$$\begin{array}{ccccc} |\psi\rangle & \rightarrow & \text{物理量 } A \text{ の測定} & \rightarrow & |a_i\rangle \\ & & \downarrow & & \\ & & a_i & & \end{array} \tag{7.47}$$

(一般に未知の) 状態 $|\psi\rangle$ に対して物理量 A の測定を実施すると, 測定値として演算子 $\hat{A}$ の固有値の 1 つ a_i が, ある確率で得られ, 結果の状態は対応する固有ケット $|a_i\rangle$ に必ず変化する. 確率は $P_i=|\langle a_i|\psi\rangle|^2$ である. この図式を用いると測定の効果, すなわち測定後の状態についていろいろなことが分かる.

フィルタ

特定の a_j が測定値として得られた場合の状態だけを残し, 他の場合は破棄するようにすれば, 測定後の状態は確実に $|a_j\rangle$ であるといえる. 測定過程を特定の状態を抜き出すフィルターとして利用することができる.

実際に偏光子はそのような役割を果たしている. また, 分光器は特定の波長をもった光子だけを選別している. このようなフィルター型の測定は, 既知の量子状態 (あるいはアンサンブル) を準備するのに有用である.

混合状態

測定を行っても, 測定値を利用しないで放置したとしよう. すると測定後の状態は情報不足のために, 確率 P_i で状態 $|a_i\rangle$ であるとしかいえない. これを統計的な混合状態とよぶ. このような状態は密度演算子を用いるとうまく表すことができる.

$$\begin{aligned} \hat{\rho}_{\text{out}} &= \sum_i P_i\hat{\rho}_i = \sum_i |\langle a_i|\psi\rangle|^2 |a_i\rangle\langle a_i| \\ &= \sum_i |a_i\rangle\langle a_i|\psi\rangle\langle\psi|a_i\rangle\langle a_i| \end{aligned} \tag{7.48}$$

あるいは,

$$\hat{\rho}_{\text{out}} = \sum_i \hat{P}_i\hat{\rho}_{\text{in}}\hat{P}_i \tag{7.49}$$

と書ける.

$$\begin{array}{ccccc} |\psi\rangle & \rightarrow & \text{物理量 } A \text{ の測定} & \rightarrow & \hat{\rho}_{\text{out}} = \sum_i P_i|a_i\rangle\langle a_i| \\ & & \downarrow & & \\ & & \text{値を見ない} & & \end{array} \tag{7.50}$$

測定値

一般に測定というと, 結果の値に注目しがちであるが, 量子的な測定では値よりも, スペクトル分解に相当する部分がより重要な場合が多い. 例えば,

$$
\begin{array}{ccccc}
|\psi\rangle & \to & \text{物理量 } A \text{ の測定} & \to & |a_i\rangle \\
 & & \downarrow & & \\
 & & \text{関数 } f & & \\
 & & \downarrow & & \\
 & & f(a_i) & &
\end{array}
\tag{7.51}
$$

のような設定を考えると, これは

$$
\begin{array}{ccccc}
|\psi\rangle & \to & \text{物理量 } f(A) \text{ の測定} & \to & |a_i\rangle \\
 & & \downarrow & & \\
 & & a_i & &
\end{array}
\tag{7.52}
$$

と殆んど等価であることが分かる. ($f(a)$ が一価関数でない場合は違いがある.)

7.9 純粋状態と混合状態

これまで量子系の状態はヒルベルト空間のベクトル $|\psi\rangle$ で表されるものとしてきた. さらに厳密には, 射線 $\{\mathrm{e}^{\mathrm{i}\phi}|\psi\rangle| -\pi < \phi \le \pi\}$ が状態と 1 対 1 に対応することを見た. ここでは状態の概念を拡張する.

まず, 複数 (K 個) の正規化されたケットの集合 $\{|\psi_1\rangle, \ldots, |\psi_k\rangle, \ldots, |\psi_K\rangle\}$ を考える. K は任意の正整数であり, ヒルベルト空間の次元とは無関係である. また, $|\psi_k\rangle$ たちは直交している必要はない. 各状態に確率 p_k を割り当てる. $\sum_{k=1}^{K} p_k = 1$ であるとする.

状態 $|\psi_k\rangle$ が確率 p_k で現れるような仕組またはアンサンブルを考える. このようにして得られた系を混合状態 (mixed state) という. 統計的混合状態ともよばれる. これに対して, これまで扱ってきた状態を純粋状態 (pure state) とよぶ.

混合状態の原因は上に述べたような確率的な混合, 状態に対する無知 (情報の不足), 外部系との量子相関 (エンタングルメント) の形成*4) などがある.

混合状態に対する物理量 A の期待値は $\langle\hat{A}\rangle_k = \langle\psi_k|\hat{A}|\psi_k\rangle$ とおくと,

*4) これが最も本質的に興味のある混合の原因であるが, 後の章で触れる.

$$
\begin{aligned}
\langle \hat{A} \rangle &= \sum_{k=1}^{K} p_k \langle \hat{A} \rangle_k \\
&= \sum_{k=1}^{K} p_k \langle \psi_k | \hat{A} | \psi_k \rangle \\
&= \sum_{k=1}^{K} \sum_{i=1}^{n} p_k \langle \psi_k | e_i \rangle \langle e_i | \hat{A} | \psi_k \rangle \\
&= \sum_{k=1}^{K} \sum_{i=1}^{n} p_k \langle e_i | \hat{A} | \psi_k \rangle \langle \psi_k | e_i \rangle = \operatorname{Tr} \hat{A} \hat{\rho}
\end{aligned} \tag{7.53}
$$

ただし,

$$
\hat{\rho} = \sum_{k=1}^{K} p_k |\psi_k\rangle\langle\psi_k| = \sum_{k=1}^{K} p_k \hat{\rho}_k \tag{7.54}
$$

とおいた. これは混合状態に対する密度演算子と考えることができ, 各状態に対する密度演算子 $\hat{\rho}_k = |\psi_k\rangle\langle\psi_k|$ の重みづき和になっている.

(もっと一般に混合状態 $\hat{\rho}_k$ が確率 p_k で生起するような状態

$$
\hat{\rho} = \sum_{k=1}^{K} p_k \hat{\rho}_k \tag{7.55}
$$

を考えることもできる.)

$\hat{\rho}$ がエルミートであることは簡単に確かめられる. また,

$$
\operatorname{Tr} \hat{\rho} = \sum_{k=1}^{K} \sum_{i=1}^{n} p_k \langle e_i | \psi_k \rangle \langle \psi_k | e_i \rangle = \sum_{k=1}^{K} p_k = 1 \tag{7.56}
$$

である. 純粋状態でなければ,

$$
\hat{\rho}^2 \neq \hat{\rho} \tag{7.57}
$$

であることに注意する.

純粋状態 $\hat{\rho} = |\psi\rangle\langle\psi|$ の場合, 任意の $|\phi\rangle \in \mathcal{H}$ に対して,

$$
\langle \phi | \hat{\rho} | \phi \rangle = |\langle \psi | \phi \rangle|^2 \geq 0 \tag{7.58}
$$

が成り立つ. 混合状態でも,

$$
\langle \phi | \hat{\rho} | \phi \rangle = \sum_{k=1}^{K} p_k |\langle \psi_k | \phi \rangle|^2 \geq 0 \tag{7.59}
$$

である. 密度演算子は非負演算子である.

$S = \langle -\ln \hat{\rho} \rangle = -\operatorname{Tr} \hat{\rho} \ln \hat{\rho}$ は系の乱雑さを示す指標でありフォンノイマンエントロピーと呼ばれる. 純粋状態では $S = 0$, 完全な混合状態では $S = \ln n$ である.

$\operatorname{Tr} \hat{\rho} = \sum_{i=1}^{n} \lambda_i = 1$ を用いると

$$\mathrm{Tr}\,\hat{\rho}^2 = \sum_{i=1}^{n} \lambda_i^2 \leq 1 \tag{7.60}$$

であることが分かる. $\lambda_i \geq 0$ は $\hat{\rho}$ の固有値である.

混合状態を含む一般的な量子系の状態はトレースが1の非負演算子で完全に規定されることが分かった. 自由度はエルミート演算子の自由度が $n+(n^2-n)=n^2$ なので, トレースが 1 という拘束から, n^2-1 である. 純粋状態の自由度は $2(n-1)$ である.

簡単な例を見ておこう. H 偏光と V 偏光を同じ重みで混合した場合の密度演算子と

$$\hat{\rho}_{\mathrm{unpol}} = \frac{1}{2}|\mathrm{H}\rangle\langle\mathrm{H}| + \frac{1}{2}|\mathrm{V}\rangle\langle\mathrm{V}| \tag{7.61}$$

D 偏光に関する密度演算子

$$\hat{\rho}_{\mathrm{D}} = |\mathrm{D}\rangle\langle\mathrm{D}| = \frac{1}{2}|\mathrm{H}\rangle\langle\mathrm{H}| + \frac{1}{2}|\mathrm{V}\rangle\langle\mathrm{V}| + \frac{1}{2}|\mathrm{H}\rangle\langle\mathrm{V}| + \frac{1}{2}|\mathrm{V}\rangle\langle\mathrm{H}| \tag{7.62}$$

は非対角項 (最後の 2 つの項) の有無において違いがある. 非対角項は干渉項ともよばれる. その理由を見ておこう.

物理量 $\hat{P}(\theta) = |\theta\rangle\langle\theta|$, $|\theta\rangle = \cos\theta|\mathrm{H}\rangle + \sin\theta|\mathrm{V}\rangle$ のそれぞれの状態に関する期待値を求める.

$$\mathrm{Tr}\left(\hat{P}(\theta)\hat{\rho}_{\mathrm{unpol}}\right) = \frac{1}{2}, \quad \mathrm{Tr}\left(\hat{P}(\theta)\hat{\rho}_{\mathrm{D}}\right) = \frac{1}{2}(1+\sin 2\theta) \tag{7.63}$$

となって, 非対角項によって, 値が 1 と 0 の間で振動する. つまり, 干渉縞が見られる.

また,

$$\frac{1}{2}\hat{\rho}_{\mathrm{D}} + \frac{1}{2}\hat{\rho}_{\mathrm{X}} = \frac{1}{2}|\mathrm{H}\rangle\langle\mathrm{H}| + \frac{1}{2}|\mathrm{V}\rangle\langle\mathrm{V}| = \hat{\rho}_{\mathrm{mixed}} \tag{7.64}$$

となることに注意する. D 偏光と X 偏光を同じ重みで混合した場合と H 偏光と V 偏光を同じ重みで混合した場合は同じ密度演算子で表されるのである. (もっと一般に, 直交する偏光の同じ重みでの混合として表される.) このように, 混合としての表しかたは一意ではない.