第３回：１０月１８日（火）

3　測定と演算子

3.1　量子力学における測定

これまで、エネルギー、運動量、位置の演算子と波動関数の関係を見てきたが、この関係は次のように一般化できる。

1. ある物理量 A に対して線形演算子 $\widehat{A}$ が対応する。
2. 物理量 A の値が a である状態の波動関数 ψ は $\widehat{A}$ の固有関数であり、その固有値が a である。このような状態は物理量 A の**固有状態**であると言われる。

2 にある「物理量 A の値が a である状態」というのは、A の測定を行ったときに必ず a が得られるような状態という意味である。一般には、ある状態の波動関数が与えられたとしても、その状態に対してある物理量の測定を行ったときに得られる測定値は一意的に決まらない。たとえば物理量として粒子の位置を考えてみると、二重スリットの実験からも分かるとおり、波動関数は粒子がそれぞれの位置にある確率密度を与えるだけであり、粒子の位置を実際に測定したときに得られる値を一意的に決めることはできない。このことは他の物理量に対してもいえる。2 が主張しているのは、波動関数 ψ がもし $\widehat{A}$ の固有関数であれば、A の測定を行ったときに a が得られる確率が 100% であり、それ以外の値が得られないということである。

物理量の測定に関連する重要な概念として、**物理的連続性**がある。

物理的連続性

物理量 A の測定を二回行うことを考える。ある時刻に始めの測定を行い、測定結果として a_1 を、さらにその後に二回目の測定を行い、測定結果として a_2 を得たとする。もし二つの測定の時間間隔が十分小さければ、二つの測定結果は一致する。

一回目の測定を行う前の波動関数が $\widehat{A}$ の固有関数とは限らない任意の関数であったとしよう。このとき、一回目の測定結果 a_1 がいくらになるか前もって決まらない。しかし、物理的連続性より、間隔をおかずに二回目の測定を行った結果は $a_2 = a_1$ になるはずであるから、一回目の測定の直後は系の波動関数は固有値として a_1 を持つ $\widehat{A}$ の固有関数になっているはずである。つまり、**一回目の測定は波動関数の形を $\widehat{A}$ の固有関数へとに変化させた**のである。これはしばしば**波束の収縮**と呼ばれる。（位置を測定した場合に波動関数が図 4 のような形に変化す

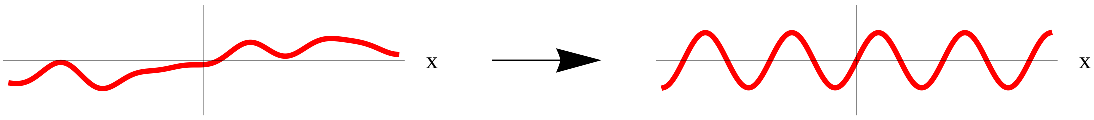

図 6: 波束の収縮（運動量を測定した場合）

ることを考えれば、このように呼ばれる理由も理解できるであろう。）

古典力学における測定は、できる限り系に影響を与えないように注意しながら行うのが普通であるが、上記の議論は、量子力学においてはそのようなことが不可能であることを意味している。このことに関してしばしば挙げられる例として、粒子の位置を測定することを考えよう。粒子の位置は、それを単に見れば知ることができる。しかし「見る」という操作は、対称に光をぶつけて跳ね返ってきた光をとらえるという操作であるから、対象が小さければ、光の衝突により、系は乱される。量子力学においては、どのような測定においても系の変化を避けることはできない。

3.2　測定と波動関数

この小節では、一般の波動関数 ψ によって与えられる系に対して物理量 A の測定を行った場合に、どのような値がどんな確率で得られるかということをまとめる。これはいくつかのルールによって決めることができる。どのルールを出発点として採用するかは人によって異なるが、ここでは以下の 3 つのルールから出発することにしよう。

ルール 1　ある物理量 A に対して、A が確定した状態

$$\psi_1, \psi_2, \ldots \tag{77}$$

が存在し、状態 ψ_n に対して A を測定すれば必ず値 a_n が得られる。（ここでは a_n が離散的な値を取り、全て異なることを仮定しておく。）

ルール 2　任意の状態 ψ は、上記 ψ_n を用いて

$$\psi = \sum_n c_n \psi_n \tag{78}$$

のように展開できる。（「ψ_n は**完全系**をなす」という。）

ルール 3　状態 ψ に対して A を測定したときに a_n が得られる確率は

$$P_n = \left| \int_{-\infty}^{\infty} \psi_n^* \psi dx \right|^2 \tag{79}$$

によって与えられる。

ただし、これらのルールが適用できるためには、波動関数は次のように規格化されていなければならない。

$$\int |\psi|^2 dx = \int |\psi_m|^2 dx = 1. \tag{80}$$

この規格化条件は上記の３つのルールとは独立なものではなく、上記のルールと、確率を全部あわせると 1 になるということを組み合わせることで得ることができる。

ルール３において、状態 ψ として ψ_m を取ってみよう。ルール１より、状態 ψ_m に対して A の測定を行えば必ず a_m が得られるはずであり、a_n が得られる確率は次のように与えられる。

$$P_n = \left| \int_{-\infty}^{\infty} \psi_n^* \psi_m dx \right|^2 = \delta_{mn} \tag{81}$$

ただし δ_{mn} はクロネッカーのデルタ

$$\delta_{mn} = \begin{cases} 1 & (m = n) \\ 0 & (m \neq n) \end{cases} \tag{82}$$

である。従って、波動関数の組 $\{\psi_m\}$ は次の**正規直交条件**を満足するはずである。

$$\int \psi_m^* \psi_n dx = \delta_{mn} \tag{83}$$

この条件が満足されるとき、関数の組 $\{\psi_m\}$ は**正規直交系**をなすという。

いくつか言葉の定義を与えておこう。二つの関数 $f(x)$ と $g(x)$ が与えられたときに、積分

$$\int_{-\infty}^{\infty} f^*(x) g(x) dx \tag{84}$$

は f と g の**エルミート内積**、あるいは単に**内積**と呼ばれる。内積が 0 であるような二つの関数は互いに**直交**しているといわれる。この積分で $f = g$ としたもの、すなわち

$$\int_{-\infty}^{\infty} f^*(x) f(x) dx \tag{85}$$

は関数 f の**ノルム**と呼ばれる。$\{\psi_m\}$ が正規直交系をなすとは、全ての関数のノルムが 1 であり、系に含まれる任意の異なる二つの関数が直交することを意味する。ノルムが 1 であるということは、規格化条件 (80) を満足するということに他ならない。

ルール３の積分に現れる ψ_n と ψ の内積にルール２の展開式を代入し、正規直交条件を用いると、

$$\int \psi_n^* \left(\sum_k c_k \psi_k \right) dx = \int \psi_n^* \psi dx = \sum_k c_k \int \psi_n^* \psi_k dx = \sum_k c_k \int \delta_{nk} = c_n \tag{86}$$

従って、f_n が得られる確率は展開係数の絶対値の二乗である。

$$P = |c_n|^2 \tag{87}$$

ルール 2 のように展開される任意の状態 ψ のノルムは

$$\begin{aligned}
\int \psi^* \psi dx &= \int \left(\sum_m c_m^* \psi_m^* \right) \left(\sum_n c_n \psi_n \right) dx \\
&= \sum_{m,n} c_m^* c_n \int \psi_m^* \psi_n dx \\
&= \sum_{m,n} c_m^* c_n \delta_{m,n} \\
&= \sum_n |c_n|^2 \\
&= \sum_n P_n
\end{aligned} \tag{88}$$

となり、全確率を与える。従ってこの値は 1 でなければならない。つまり、状態 ψ は規格化条件 (80) を満足する。

物理量 A に対して、 A の取り得る値 a_n とそれぞれの確率 P_n が分かると、A の測定結果に対する期待値 $\overline{A}$ を計算することができる。

$$\begin{aligned}
\overline{A} = \sum_n P_n a_n &= \sum_n \left| \int \psi_n^*(x) \psi(x) dx \right|^2 a_n \\
&= \sum_n \left| \int \psi^*(x) \psi_n(x) dx \right| a_n \left| \int \psi_n^*(y) \psi(y) dy \right| \\
&= \sum_n \left(\int \psi^*(x) \psi_n(x) dx \right) a_n \left(\int \psi_n^*(y) \psi(y) dy \right) \\
&= \int \int \psi^*(x) A(x,y) \psi(y) dx dy
\end{aligned} \tag{89}$$

ただし、二変数関数

$$A(x,y) = \sum_n \psi_n(x) a_n \psi_n^*(y) \tag{90}$$

を定義した。

3.3 物理量と演算子

§3.2 で述べたルールの中では、A が確定値を取る波動関数と確定値の対 (ψ_m, a_m) $(m = 1, 2, 3, \ldots)$ を用いて、測定に関するルールを与えた。その際には演算子 $\widehat{A}$ は用いていなかった。実は、演算子 $\widehat{A}$ は次のように定義することができる。

$$\widehat{A}\psi(x) = \int A(x,y) \psi(y) dy \tag{91}$$

ただし関数 $A(x,y)$ は (90) によって (ψ_m, a_m) を用いて定義された関数である。(91) によって定義された演算子 $\widehat{A}$ は線形演算子であり、$A(x,y)$ は演算子 $\widehat{A}$ の**積分核**、あるいは単に**核**と呼ばれる。このように定義された演算子 $\widehat{A}$ が、§3.2 で述べた性質、すなわち、

- 物理量 A の値が a である状態の波動関数 ψ は $\widehat{A}$ の固有関数であり、その固有値が a である。

を満足することは簡単に分かる。実際に $\widehat{A}$ を ψ_n に作用させ、定義式 (91) を用いると、このことを確認することができる。

$$\begin{aligned}
\widehat{A}\psi_n(x) &= \int A(x,y)\psi_n(y)dy \\
&= \int \sum_m \psi_m(x) a_m \psi_m^*(y)\psi_n(y)dy \\
&= \sum_m \psi_m(x) a_m \int \psi_m^*(y)\psi_n(y)dy \\
&= \sum_m \psi_m(x) a_n \delta_{mn} \\
&= a_n \psi_n(x) \qquad (92)
\end{aligned}$$

途中で $\{\psi_m\}$ の正規直交条件を用いた。

期待値の式 (89) は演算子 $\widehat{A}$ を用いて次のように書くこともできる。

$$\boxed{\overline{A} = \int \psi^*(x)\widehat{A}\psi(x)dx \qquad (93)}$$

一般に、演算子の固有値は実数とは限らないが、実数の物理量に対応する演算子は、**固有値が実数**であるものでなければならない。この条件を満たすものは**エルミート演算子**である。

エルミート演算子の定義を与える前にいくつかの用語を定義しておく。ある演算子を $\widehat{A}$、その核を $A(x,y)$ とする。このとき

- $A^*(x,y)$ を核とする演算子を $\widehat{A}^*$ と書き、$\widehat{A}$ の複素共役という。次の式が成り立つ。

  $$\widehat{A}^* f^* = (\widehat{A}f)^* \quad \forall f. \qquad (94)$$

  （これを $\widehat{A}^*$ の定義であると思っても良い。）

- $A(y,x)$ を核とする演算子を $\widetilde{\widehat{A}}$ と書き、$\widehat{A}$ の転置と呼ぶ。次の式が成り立つ。

  $$\int (\widetilde{\widehat{A}} f) g dx = \int f(\widehat{A}g)dx \quad \forall f,g. \qquad (95)$$

  （これを $\widetilde{\widehat{A}}$ の定義であると思っても良い。）

- $A^*(y,x)$ を核とする演算子を $\widehat{A}^\dagger$ と書き、$\widehat{A}$ の**エルミート共役**、あるいは単に**共役**と呼ぶ。次の関係が成り立つ。

$$\int (\widehat{A}^\dagger f)^* g dx = \int f^* (\widehat{A} g) dx \quad \forall f, g. \tag{96}$$

（これを $\widehat{A}^\dagger$ の定義であると思っても良い。）

- 演算子 $\widehat{A}$ がその複素共役 $\widehat{A}^*$ と一致するとき、$\widehat{A}$ は実演算子であるという。
- 演算子 $\widehat{A}$ がそのエルミート共役 $\widehat{A}^\dagger$ と一致するとき、$\widehat{A}$ は**エルミート演算子**、あるいは**自己共役演算子**であるという。

エルミート演算子は、物理量に対応する演算子として必要な次の性質を持つ。

エルミート演算子の性質

1. 固有値が実数である。
2. 異なる固有値を持つ固有関数は直交する。

まず、1 から示そう。$\widehat{A}$ をエルミート演算子とし、ψ をその固有関数、a を対応する固有値とする。エルミート演算子が満足する式 (96) に対して $f = g = \psi$ を代入し、$\widehat{A}\psi = a\psi$ を用いると、

$$a^* \int \psi^* \psi dx = a \int \psi^* \psi dx \tag{97}$$

が得られる。関数 ψ が 0 でなければ、両辺にある積分は正の実数であるから、$a^* = a$ が成り立つ。つまり、固有値 a は実数である。次に 2 を示そう。ψ と ψ' を $\widehat{A}$ の固有関数とし、対応する固有値をそれぞれ a, a' とする。つまり、

$$\widehat{A}\psi = a\psi, \quad \widehat{A}\psi' = a'\psi' \tag{98}$$

の二つの式が成り立つとする。エルミート演算子が満足する式 (96) に対して $f = \psi$, $g = \psi'$ を代入し、固有値 a, a' が実数であることを用いれば

$$a \int \psi^* \psi' dx = a' \int \psi^* \psi' dx \tag{99}$$

が得られる。従って、もし二つの固有値 a と a' が異なれば、次の式が成り立つ。

$$\int \psi^* \psi' dx = 0. \tag{100}$$

つまり ψ と ψ' は直交する。

3.4 縮退

§3.2 ではある演算子 $\hat{A}$ の固有値 a_m が全て異なる場合について考えた。そこで述べたことを、固有値の中に同じものが存在する場合に拡張するに当たって、注意すべきことをいくつかあげておこう。

演算子 $\hat{A}$ の二つの線形独立な固有関数 ψ_1 と ψ_2 が同じ固有値 a を持つとき、これらの状態は**縮退**しているという。このとき、ψ_1 と ψ_2 の任意の 0 でない線形結合

$$\alpha\psi_1 + \beta\psi_2 \quad \alpha, \beta \in \mathbf{C} \tag{101}$$

もやはり $\hat{A}$ の固有関数であり、固有値は a である。すなわち、縮退した状態がある場合には、固有関数の選び方が無限に存在する。例えば、ψ_1, ψ_2 の代わりに

$$\psi_1' = \alpha\psi_1 + \beta\psi_2, \quad \psi_2' = \gamma\psi_1 + \delta\psi_2, \quad \alpha\delta - \beta\gamma \neq 0 \tag{102}$$

によって定義された ψ_1' と ψ_2' を独立な固有関数として用いることもできる。このように、線形独立な固有関数の選び方を変更することを、**基底の取替え**という。ここでは二つの線形独立な波動関数が縮退している場合を例としてあげたが、3 つ以上の線形独立な波動関数が縮退していた場合も同様である。

縮退がない場合、このような不定性はないので、演算子 $\hat{A}$ が与えられると、§3.2 において用いた波動関数の完全系 $\{\psi_m\}$ は定数因子を除き一意的に定まる。そして、関数のノルムが 1 になるように規格化すれば、それらは正規直交条件を満足することが保障される。

一方、縮退がある場合には、波動関数の完全系 $\{\psi_m\}$ のとり方に上で述べたような任意性がある。従って、それぞれの関数のノルムを 1 に取ったとしても、それらが正規直交条件を満足するとは限らない。つまり、異なる二つの波動関数が直交するとは限らない。

しかしそのような場合であっても、上で述べたような基底の取替えを行えば必ず正規直交条件を満足するようにすることができる。例えば、演算子 $\hat{A}$ の縮退した固有状態を ψ_1、ψ_2 としよう。これらは一般に直交しないので、行列

$$A_{ij} = \int \psi_i^* \psi_j dx \tag{103}$$

とすると A_{12} および A_{21} は 0 とは限らない。しかし ψ_2 の代わりに

$$\psi_2' = \psi_2 - \frac{A_{12}}{A_{11}}\psi_1 \tag{104}$$

を用いれば

$$\int \psi_1^* \psi_2' dx = \int \psi_1^* \left(\psi_2 - \frac{A_{12}}{A_{11}}\psi_1 \right) dx = A_{12} - \frac{A_{12}}{A_{11}} A_{11} = 0 \tag{105}$$

であり、(ψ_1, ψ_2') は互いに直交する。同様な基底の取替えは、何重に縮退していた場合でも行うことができ、正規直交条件を満足する固有関数の組 $\{\psi_m\}$ を取ることができる。

測定による状態の変化についても、縮退がない場合とある場合でどのような違いが出るかを見ておこう。物理量 A の測定を行うことを考えよう。測定前の状態 ψ_{before} が $\hat{A}$ の固有関数を用いて次のように展開されたとしよう。

$$\psi_{\mathrm{before}} = c_1\psi_1 + c_2\psi_2 + c_3\psi_3 + c_4\psi_4 + c_5\psi_5 + \cdots. \tag{106}$$

この状態に対して A の測定を行い、その結果 ψ_3 に対応する固有値 a_3 が得られたとしよう。

もし縮退がなければ、固有値 a_3 が得られたということは状態が ψ_3 であることが確定したことを意味し、波束の収縮の結果、測定後の波動関数は次のようになる。

$$\psi_{\mathrm{after}} \propto c_3\psi_3. \tag{107}$$

しかし、もし縮退があり、$a_3 = a_4$ であった場合には、固有値 a_3 が得られたとしても状態 ψ_3 なのかそれとも ψ_4 なのかは定まらない。従って、測定後の波動関数にはこれら二つの項が残される。

$$\psi_{\mathrm{after}} \propto c_3\psi_3 + c_4\psi_4. \tag{108}$$

一般に、ある物理量 A の測定を行って測定値 a が得られたとき、測定後の波動関数は次のように与えられる。

$$\psi_{\mathrm{after}} = \hat{P}_a^A \psi_{\mathrm{before}} \tag{109}$$

ただし、$\hat{P}_a^A$ は次の積分核を持つ演算子であり、(106) のような展開式の中から固有値が a の波動関数の部分を取り出す役割を果たす。

$$P_a^A(x, y) = \sum_{a_m = a} \psi_m(x)\psi_m^*(y). \tag{110}$$

右辺の和は $a_m = a$ を満足する全ての m について取る。

状態 ψ_{after} に対して A の測定を行ったとき a が得られる可能性が 0 である場合には $\hat{P}_a^A\psi_{\mathrm{before}} = 0$ である。逆に、確率 1 で a が得られる場合には $\hat{P}_a^A\psi_{\mathrm{before}} = \psi_{\mathrm{before}}$ である。

3.5 同時測定可能性

§3.1 において述べたように、ミクロな系における測定は系に影響を与えずに行うことはできず、物理量 A の測定は波動関数を $\hat{A}$ の固有関数に変化させる。このことは、二つの物理量を同時に測定しようとしたときに困難を生じる。

二つの物理量 A と B の測定を行うことを考えよう。A の測定をある時刻に行い測定値 a を、その直後に間をおかずに B の測定を行い測定値 b を得たとする。これらの測定によって波動関数は（後に測定を行った B に対応する）演算子 $\widehat{B}$ の固有状態になっているであろう。従って、さらに間をおかずに $\widehat{B}$ の測定を再び行えば、確率 1 で測定値 b を得るはずである。それでは A と B の測定のあとに A の測定を行ったらどうなるであろうか。

一般には最初の A の測定を行うことで得られた波動関数はそのすぐ後の B の測定によって破壊されてしまうから、そのあとに再び A の測定を行っても始めと同じ測定値 a が得られるとは限らない。しかし、 A と B の組み合わせによっては、B の測定を行った後であっても状態が A の固有状態であり、A を測定すると確率 1 で a を与える。このようなとき、二つの物理量 A と B は**同時測定可能**であるという。

二つの物理量 A と B が同時測定可能であるために演算子 $\widehat{A}$ と $\widehat{B}$ が満足すべき条件を求めよう。そのために§3.4 で定義された演算子 $\widehat{P}^A_a$ を用いるのが便利である。この演算子は次の性質を満足する。

$$\sum_a \widehat{P}^A_a = \widehat{1}, \quad \sum_a a\widehat{P}^A_a = \widehat{A}, \quad \widehat{P}_a\widehat{A} = \widehat{A}\widehat{P}_a = a\widehat{P}_a, \quad \widehat{P}^A_a\widehat{P}^A_{a'} = \delta_{aa'}\widehat{P}^A_a \tag{111}$$

最後の式は物理的連続性を表す。

ある状態 ψ に対して始めに A の測定を行い a が得られたとすると、そのあとの状態の波動関数は $P^A_a\psi$ に比例する。そしてさらに B の測定を行い、b が得られたとすれば、波動関数は $P^B_bP^A_a\psi$ に比例する。同時測定可能である条件は、この状態に対してさらに A の測定を行ったとき、a 以外の値が得られないということである。従って、次のように書くことができる。

$$\widehat{P}^A_{a'}\widehat{P}^B_b\widehat{P}^A_a = 0 \quad \text{for } a \neq a' \tag{112}$$

あるいは、次のように書くこともできる。

$$(a' - a)\widehat{P}^A_{a'}\widehat{P}^B_b\widehat{P}^A_a = 0. \tag{113}$$

(113) に b をかけて、a', b, a 全てに対して和を取ってみよう。(111) を用いると、

$$0 = \sum_{a',b,a}(a'b\widehat{P}^A_{a'}\widehat{P}^B_b\widehat{P}^A_a - ba\widehat{P}^A_{a'}\widehat{P}^B_b\widehat{P}^A_a) = \widehat{A}\widehat{B}\widehat{1} - \widehat{1}\widehat{B}\widehat{A} = \widehat{A}\widehat{B} - \widehat{B}\widehat{A} \tag{114}$$

が得られる。従って物理量 A と B が同時測定可能であれば

$$[\widehat{A}, \widehat{B}] = 0 \tag{115}$$

が成り立つ。ただし、$\widehat{A}$ と $\widehat{B}$ の**交換関係**

$$[\hat{A}, \hat{B}] \equiv \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A} \tag{116}$$

を定義した。(115) は二つの演算子の積が順序に依存しないことを意味する。このとき二つの演算子は**可換**であるといわれる。

逆、すなわち二つの演算子が可換であり (115) が成り立つとき (113) が成り立つことは、以下のように示すことができる。まず、(115) が成り立つとき、0 または正の整数 n に対して $[\hat{A}, \hat{B}^n] = 0$ が成り立つことはすぐに分かる。($\hat{B}^n$ は $\hat{B}$ を n 個掛けたものである。) この式に対して左から $\hat{P}^A_{a'}$, 右から $\hat{P}^A_a$ を作用させ (111) を用いると次の式を得る。

$$\sum_b b^n (a' - a) \hat{P}_{a'} \hat{P}_b \hat{P}_a = 0. \tag{117}$$

b に対する和は全ての異なる固有値にわたって行われるが、この式が任意の $n \geq 0$ に対して成り立つためには、それぞれの b ごとにこの式が成り立つ必要がある。こうして (113) が示された。

可換な二つの行列に対して次のことが成り立つことは重要である。

$\hat{A}$ と $\hat{B}$ が可換である場合、この二つの演算子の**同時固有関数**によって完全系を張ることができる。つまり、完全系をなす関数の系 ψ_m として

$$\hat{A}\psi_m = a_m \psi_m, \quad \hat{B}\psi_m = b_m \psi_m \tag{118}$$

のように $\hat{A}$ と $\hat{B}$ の両方の固有関数となっているものを取ることができる。

もしこのような完全系を取れることを仮定すると、$\hat{A}$ と $\hat{B}$ が可換であることは直ちに示すことができる。まず、任意の関数 ψ を (118) を満たす $\hat{A}$ と $\hat{B}$ の同時固有関数 ψ_n によって展開しよう。

$$\psi = \sum_n c_n \psi_n. \tag{119}$$

この関数に $\hat{A}\hat{B}$ を作用させると、

$$\hat{A}\hat{B}\psi = \sum_n c_n \hat{A}\hat{B}\psi_n = \sum_n c_n b_n \hat{A}\psi_n = \sum_n c_n b_n a_n \psi_n. \tag{120}$$

同様に、$\hat{B}\hat{A}$ を作用させると、

$$\hat{B}\hat{A}\psi = \sum_n c_n \hat{B}\hat{A}\psi_n = \sum_n c_n a_n \hat{B}\psi_n = \sum_n c_n a_n b_n \psi_n. \tag{121}$$

この二つは明らかに等しい。従って、$\hat{A}\hat{B} = \hat{B}\hat{A}$ が成り立つ。