物質情報学5（量子力学），担当 谷村省吾，講義ノート5

非可換性と干渉効果

結合確率

確率とは何だろうか，ということを考え出すと，長い議論になるが，ここでは，素朴に，確率とは，ある事象が起こりそうな度合，あるいは頻度を表すものだと考える．例えば，サイコロを振って3の目が出る確率が $\frac{1}{6}$ であるとは，このサイコロを600回振れば，そのうち100回前後，3の目が出ることが期待できることを意味する．

二つの事象の組み合わせが起こる確率を述べることもできる．例えば，サイコロとコインを同時に投げて「サイコロは3の目が出て，かつ，コインは表が出る」という事象の確率を述べることができる．複数のサイコロをいっぺんにに振って，「サイコロAは3の目が出て，同時に，サイコロBは5の目が出る」確率を調べることもできる．このように，2つ以上の出来事の組み合わせを一つの事象とみなしたとき，その生起確率を**結合確率** (joint probability) という．「Aの値が a になり，かつ，Bの値が b になる確率」を

$$\mathrm{Prob}(\mathrm{A}=a, \mathrm{B}=b) \tag{1}$$

と書く．また，たんに「Aの値が a になる確率」または「Bの値が b になる確率」を

$$\mathrm{Prob}(\mathrm{A}=a), \qquad \mathrm{Prob}(\mathrm{B}=b) \tag{2}$$

と書き，これを結合確率 (1) に対する**周辺確率** (marginal probability) という．結合確率が存在すれば，

$$\mathrm{Prob}(\mathrm{A}=a) = \sum_b \mathrm{Prob}(\mathrm{A}=a, \mathrm{B}=b), \tag{3}$$

$$\mathrm{Prob}(\mathrm{B}=b) = \sum_a \mathrm{Prob}(\mathrm{A}=a, \mathrm{B}=b) \tag{4}$$

が必ず成り立つ．しかし，

$$\mathrm{Prob}(\mathrm{A}=a) \times \mathrm{Prob}(\mathrm{B}=b) \\ = \mathrm{Prob}(\mathrm{A}=a, \mathrm{B}=b) \tag{5}$$

は必ずしも成り立たない．すべての値 a, b に対して等式 (5) が成り立っていれば，量AとBは独立だという．

問1. 独立な量の例を挙げよ．また，独立でない量の例を挙げよ．例えば，2種類の英語の試験を受けるとして，1種類目の試験のスコアをA，2種類目の試験のスコアをBとすれば，A, Bは独立と考えられるか？ また，体重と身長は独立と考えられるか？ 気温と数学の試験の成績は独立と考えられるか？

可換な物理量

演算子 $\hat{A}, \hat{B}$ に対して

$$[\hat{A}, \hat{B}] := \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A} \tag{6}$$

もまた演算子になるが，$[\hat{A}, \hat{B}]$ を $\hat{A}$ と $\hat{B}$ の**交換子** (commutator) という．$[\hat{A}, \hat{B}] = 0$ ならば，つまり $\hat{A}\hat{B} = \hat{B}\hat{A}$ ならば，$\hat{A}$ と $\hat{B}$ は**可換** (commutative) だという．

同一のヒルベルト空間 $\mathscr{H}$ 上の2つ演算子 $\hat{A}, \hat{B}$ に対して

$$\hat{A}|v\rangle = a|v\rangle, \quad \hat{B}|v\rangle = b|v\rangle, \quad |v\rangle \neq 0 \tag{7}$$

を満たす数 $a, b \in \mathbb{C}$ とベクトル $|v\rangle \in \mathscr{H}$ があれば，$|v\rangle$ を $\hat{A}$ と $\hat{B}$ の**同時固有ベクトル** (simultaneous eigenvector) という．言い換えると，ベクトル $|v\rangle$ が演算子 $\hat{A}$ の固有ベクトルであり，かつ，演算子 $\hat{B}$ の固有ベクトルにもなっていることを，$|v\rangle$ は $\hat{A}$ と $\hat{B}$ の同時固有ベクトルだという．固有値 a と b は異なっていてもかまわない．

ここでは，(7) を満たすベクトルは $|v\rangle$ のスカラー倍しかないとする（縮退がないと仮定する）．また，$|v\rangle$ は単位ベクトルであることを仮定する．つまり，$\langle v|v\rangle = 1$ とする．

一般の状態ベクトル（単位ベクトル）$|\psi\rangle$ において物理量 $\hat{A}$ と $\hat{B}$ を一斉に測って，$\hat{A}$ の測定値として a を得て，かつ，$\hat{B}$ の測定値として b を得る結合確率は

$$\mathrm{Prob}(v \leftarrow \psi) \;=\; \Big|\langle v|\psi\rangle\Big|^2 \tag{8}$$

で与えられる．

問 2. (i) 次の演算子 $\hat{S}, \hat{T}$ が可換であることを確認せよ．

$$\hat{S} = \begin{pmatrix} 2 & 1 & 0 \\ 1 & 2 & 0 \\ 0 & 0 & 4 \end{pmatrix} \tag{9}$$

$$\hat{T} = \begin{pmatrix} 0 & 2 & 0 \\ 2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 5 \end{pmatrix} \tag{10}$$

$$|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{3}}\begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix} \tag{11}$$

(ii) $\hat{S}, \hat{T}$ の固有値と同時固有ベクトルをすべて求めよ．

(iii) 状態ベクトル $|\psi\rangle$ は上で与えたものとして，状態 $|\psi\rangle$ において $\hat{S}$ を測って測定値として 3 を得る確率はいくらか．

(iv) 状態 $|\psi\rangle$ において $\hat{S}$ の測定値として 6 を得る確率はいくらか．

(iv) 状態 $|\psi\rangle$ において $\hat{T}$ の測定値として 2 を得る確率はいくらか．

(v) 状態 $|\psi\rangle$ において $\hat{S}$ の測定値として 3 を得ると同時に $\hat{T}$ の測定値として 2 を得る確率はいくらか．

縮退がある場合

2 つ演算子 $\hat{A}, \hat{B}$ と一定の値 a, b に対して

$$\hat{A}|v^{(r)}\rangle = a|v^{(r)}\rangle, \quad \hat{B}|v^{(r)}\rangle = b|v^{(r)}\rangle \tag{12}$$

$$\langle v^{(s)}|v^{(r)}\rangle = \delta_{rs} \tag{13}$$

を満たすベクトル $|v^{(r)}\rangle$ がラベル $r = 1, 2, \cdots, k$ の分だけ一次独立なものが見つかる場合，固有値 $\hat{A} = a, \hat{B} = b$ は k 重に縮退しているという．

このとき，**系の状態が規格化されたベクトル $|\psi\rangle \in \mathscr{H}$ で表されているならば，物理量 $\hat{A}$ と $\hat{B}$ を測って測定値として $\hat{A} = a$ かつ $\hat{B} = b$ を得る結合確率は**

$$\mathrm{Prob}(\hat{A} = a, \hat{B} = b|\psi) \;=\; \sum_{r=1}^{k} \Big|\langle v^{(r)}|\psi\rangle\Big|^2 \tag{14}$$

に等しい．この式も**ボルンの確率公式**という．

問 3. (i) 次の演算子 $\hat{U}, \hat{V}$ が可換であることを確認せよ．

$$\hat{U} = \begin{pmatrix} 2 & 1 & 0 \\ 1 & 2 & 0 \\ 0 & 0 & 3 \end{pmatrix} \tag{15}$$

$$\hat{V} = \begin{pmatrix} 0 & 2 & 0 \\ 2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 2 \end{pmatrix} \tag{16}$$

$$|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} \tag{17}$$

(ii) $\hat{U}, \hat{V}$ の固有値と同時固有ベクトルをすべて求めよ．

(iii) 状態 $|\psi\rangle$ において $\hat{U}$ の測定値として 3 を

得ると同時に $\hat{V}$ の測定値として 2 を得る確率はいくらか.

問 4. 一般に，自己共役演算子 $\hat{A}, \hat{B}$ が可換ならば，$\hat{A}$ と $\hat{B}$ の同時固有ベクトル全体はヒルベルト空間の基底をなすことを証明せよ.

非可換な物理量

演算子 $\hat{A}, \hat{B}$ について $\hat{A}\hat{B} \neq \hat{B}\hat{A}$ ならば（$[\hat{A}, \hat{B}] \neq 0$ ならば）$\hat{A}$ と $\hat{B}$ は**非可換** (noncommutative) だという．非可換な物理量の存在は，量子力学の特徴であり，古典力学では見られなかった現象を引き起こす.

問 5. 演算子の交換子 $[\hat{A}, \hat{B}]$ は以下の性質を満たすことを示せ．ただし λ は任意の複素数.

$$[\hat{B}, \hat{A}] = -[\hat{A}, \hat{B}] \tag{18}$$

$$[\lambda\hat{A}, \hat{B}] = \lambda[\hat{A}, \hat{B}] \tag{19}$$

$$[\hat{A}, \lambda\hat{B}] = \lambda[\hat{A}, \hat{B}] \tag{20}$$

$$[\hat{A} + \hat{B}, \hat{C}] = [\hat{A}, \hat{C}] + [\hat{B}, \hat{C}] \tag{21}$$

$$[\hat{A}, \hat{B} + \hat{C}] = [\hat{A}, \hat{B}] + [\hat{A}, \hat{C}] \tag{22}$$

$$[\hat{A}, \hat{B}\hat{C}] = [\hat{A}, \hat{B}]\hat{C} + \hat{B}[\hat{A}, \hat{C}] \tag{23}$$

$$[\hat{A}\hat{B}, \hat{C}] = [\hat{A}, \hat{C}]\hat{B} + \hat{A}[\hat{B}, \hat{C}] \tag{24}$$

$$[\hat{A}, [\hat{B}, \hat{C}]] + [\hat{B}, [\hat{C}, \hat{A}]] + [\hat{C}, [\hat{A}, \hat{B}]] = 0 \tag{25}$$

$$[\hat{A}, \hat{B}]^\dagger = -[\hat{A}^\dagger, \hat{B}^\dagger] \tag{26}$$

性質 (23), (24) は**ライプニッツ則** (Leibniz rule) と呼ばれる．(25) は**ヤコビ律**とか**ヤコビの恒等式** (Jacobi identity) と呼ばれる.

問 6. (i) 次の行列 $\hat{X}, \hat{Y}, \hat{Z}$ はエルミート行列（自己共役演算子）であることを確かめよ.

$$\hat{X} = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \tag{27}$$

$$\hat{Y} = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \tag{28}$$

$$\hat{Z} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \tag{29}$$

(ii) 行列 $\hat{X}, \hat{Y}, \hat{Z}$ の，それぞれの固有値と規格化された固有ベクトルを求めよ.
(iii) 交換子 $[\hat{X}, \hat{Y}]$, $[\hat{Y}, \hat{Z}]$, $[\hat{Z}, \hat{X}]$ を計算せよ.
(iv) 規格化された状態ベクトル

$$|\psi\rangle = \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \end{pmatrix} \tag{30}$$

の成分の複素数 c_1, c_2 は $|c_1|^2 + |c_2|^2 = 1$ を満たす．この状態に対して $\hat{X}$ の期待値 $\langle\hat{X}\rangle = \langle\psi|\hat{X}|\psi\rangle$ を求めよ.
(v) $\hat{Y}$ の期待値 $\langle\hat{Y}\rangle = \langle\psi|\hat{Y}|\psi\rangle$ を求めよ.
(vi) $\hat{Z}$ の期待値 $\langle\hat{Z}\rangle = \langle\psi|\hat{Z}|\psi\rangle$ を求めよ.
(vii) $\langle\hat{X}\rangle^2 + \langle\hat{Y}\rangle^2 + \langle\hat{Z}\rangle^2 = 1$ であることを証明せよ．また，この物理的意味を吟味せよ.

干渉効果

ヒルベルト空間 $\mathbb{C}^2$ の元として

$$|\chi_+\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}, \quad |\chi_-\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix} \tag{31}$$

$$|\phi_+\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad |\phi_-\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \tag{32}$$

とおくと，$|\chi_\pm\rangle$ は演算子 $\hat{X}$ の固有値 $x = \pm 1$ の**固有状態**（規格化された固有ベクトルのこと）である．$|\phi_\pm\rangle$ は $\hat{Z}$ の固有値 $z = \pm 1$ の固

有状態である．これらの定義から

$$|\chi_+\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\phi_+\rangle + |\phi_-\rangle) \tag{33}$$

$$|\chi_-\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\phi_+\rangle - |\phi_-\rangle) \tag{34}$$

$$|\phi_+\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\chi_+\rangle + |\chi_-\rangle) \tag{35}$$

$$|\phi_-\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\chi_+\rangle - |\chi_-\rangle) \tag{36}$$

という関係が成り立つ．

量子力学の解釈によれば，演算子 $\hat{X}$ の固有値 1 の固有状態 $|\chi_+\rangle$ において物理量 $\hat{X}$ を測れば，測定値として確実に 1 を得る．また，演算子 $\hat{Z}$ の固有値 -1 の固有状態 $|\phi_-\rangle$ において物理量 $\hat{Z}$ を測れば，測定値として確実に -1 を得る．他の固有状態も同様に解釈できる．そのうえ，

$$\begin{aligned}\mathrm{Prob}(x=1 \leftarrow z=1) &= \left|\langle\chi_+|\phi_+\rangle\right|^2 \\ &= \left|\langle\phi_+|\chi_+\rangle^*\right|^2 \\ &= \left|\frac{1}{\sqrt{2}}\right|^2 \\ &= \frac{1}{2}\end{aligned} \tag{37}$$

なので，$z=1$ の固有状態に対して物理量 $\hat{X}$ を測って測定値 $x=1$ が出て来る確率は $\frac{1}{2}$ である．同様の計算を繰り返せば，

$$\begin{aligned}&\mathrm{Prob}(x=1 \leftarrow z=1) \\ &= \mathrm{Prob}(x=-1 \leftarrow z=1) \\ &= \mathrm{Prob}(z=1 \leftarrow x=1) \\ &= \mathrm{Prob}(z=-1 \leftarrow x=1) \\ &= \mathrm{Prob}(z=1 \leftarrow x=-1) \\ &= \mathrm{Prob}(z=-1 \leftarrow x=-1) \\ &= \frac{1}{2}\end{aligned} \tag{38}$$

であることも結論できる．また，

$$\mathrm{Prob}(z=1 \leftarrow z=1) = \left|\langle\phi_+|\phi_+\rangle\right|^2 = 1 \tag{39}$$

$$\mathrm{Prob}(z=-1 \leftarrow z=1) = \left|\langle\phi_-|\phi_+\rangle\right|^2 = 0 \tag{40}$$

もわかる．ここまでは量子力学の規則どおりの計算結果であり，何の変哲もない結果のように見えるが，よく考えてみると意外な意味をはらんでいる．

問 7. 式 (38) の計算を (37) のように行え．また，これらの式 (38), (39), (40) の意味するところを考察せよ．

問 8. 任意の実数 α に対して

$$|\phi_\alpha\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(e^{i\alpha}|\chi_+\rangle + e^{-i\alpha}|\chi_-\rangle) = \begin{pmatrix}\cos\alpha \\ i\sin\alpha\end{pmatrix} \tag{41}$$

とおいたものについて以下の問いに答えよ．

(i) $\langle\phi_\alpha|\phi_\alpha\rangle = 1$ であることを確認せよ．

(ii) 状態ベクトル $|\phi_\alpha\rangle$ において物理量 $\hat{X}$ を測ったときに測定値 $x=\pm1$ を得る確率

$$\mathrm{Prob}(x=1 \leftarrow \phi_\alpha)$$
$$\mathrm{Prob}(x=-1 \leftarrow \phi_\alpha)$$

をそれぞれ求めよ．

(iii) 状態ベクトル $|\phi_\alpha\rangle$ において物理量 $\hat{Z}$ を測ったときに測定値 $z=\pm1$ を得る確率

$$\mathrm{Prob}(z=1 \leftarrow \phi_\alpha)$$
$$\mathrm{Prob}(z=-1 \leftarrow \phi_\alpha)$$

をそれぞれ求めよ．

(iv) これらの結果の意味するところを考察せよ．

非可換量の和の不思議

式 (27), (28), (29) で定めた行列 $\hat{X}, \hat{Y}, \hat{Z}$ について以下の問いを答えよ．

問 9. 行列 $\hat{L} = \hat{X} + \hat{Y}$ の固有値と固有ベクトルを求めよ．

問 10. 任意の実数 x_1, x_2, x_3 について行列 $M = x_1\hat{X} + x_2\hat{Y} + x_3\hat{Z}$ の固有値と固有ベクトルを求めよ．