非可換性と干渉効果

確率

そもそも確率とは何だろうか，ということを言い出すと，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，サイコロを600回振れば，そのうち100回前後（ジャスト100回とは断言できない）3の目が出ることが期待できることを意味する．

物理量Aを測って，その値がaになる確率を

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

と書く．Aを測る実験をN回行って，測定値aを得る回数をN_aとするとき，実験回数Nを増やすと$\mathrm{A}=a$を得る頻度が一定値

$$\mathrm{Prob}(\mathrm{A}=a)=\lim_{N\to\infty}\frac{N_a}{N} \tag{2}$$

に収束するならば，この値こそが確率だと考えるのが，確率の**頻度解釈**である．

結合確率

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」というような事象の組み合わせを**複合事象**といい，複合事象の生起確率を**結合確率** (joint probability) という．2個のサイコロをいっぺんに振って，「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」確率も結合確率である．このように，「Aの値がaになり，かつ，Bの値がbになる確率」を

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

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

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

と書き，これを結合確率(3)に対する**周辺確率** (marginal probability) という．結合確率が存在すれば，

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

$$\mathrm{Prob}(\mathrm{B}=b)=\sum_a \mathrm{Prob}(\mathrm{A}=a,\mathrm{B}=b) \tag{6}$$

が必ず成り立つ．しかし，

$$\begin{aligned}&\mathrm{Prob}(\mathrm{A}=a)\times\mathrm{Prob}(\mathrm{B}=b)\\&=\mathrm{Prob}(\mathrm{A}=a,\mathrm{B}=b)\end{aligned} \tag{7}$$

は必ずしも成り立たない．すべての値a,bに対して等式(7)が成り立っていれば，量AとBは**独立** (independent) 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，TOEICとTOEFLの英語の試験を受けるとして，TOEICのスコアをA, TOEFL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

$$[\hat{A},\,\hat{B}]:=\hat{A}\hat{B}-\hat{B}\hat{A} \tag{8}$$

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

$$\hat{A}|v\rangle = a|v\rangle, \quad \hat{B}|v\rangle = b|v\rangle, \quad |v\rangle \neq 0 \tag{9}$$

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，(9) 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．

ここからが物理的解釈である．量子力学では物理系の状態はヒルベルト空間の単位ベクトル（ノルムが 1 のベクトル，規格化されたベクトル）で表される．もしも，系の状態ベクトルが (9) を満たす同時固有ベクトル $|v\rangle$ であれば，この状態においては物理量 $\hat{A}$ を測れば確実に値 a が測定値として得られ，かつ，物理量 $\hat{B}$ を測れば確実に値 b が測定値として得られる．

系の状態ベクトル $|\psi\rangle$ が同時固有ベクトル $|v\rangle$ ではない場合は，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

$$\mathrm{Prob}(v \leftarrow \psi) = \Big|\langle v|\psi\rangle\Big|^2 \tag{10}$$

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．

$$\hat{S} = \begin{pmatrix} 2 & 1 & 0 \\ 1 & 2 & 0 \\ 0 & 0 & 4 \end{pmatrix} \tag{11}$$

$$\hat{T} = \begin{pmatrix} 0 & 2 & 0 \\ 2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 5 \end{pmatrix} \tag{12}$$

$$|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{3}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix} \tag{13}$$

(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 $|\psi\rangle$ 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

$$\hat{A}|v^{(r)}\rangle = a|v^{(r)}\rangle, \quad \hat{B}|v^{(r)}\rangle = b|v^{(r)}\rangle \tag{14}$$

$$\langle v^{(s)}|v^{(r)}\rangle = \delta_{rs} \tag{15}$$

を満たすベクトル $|v^{(r)}\rangle$ がラベル $r = 1, 2, \ldots, k$ の分だけ一次独立なものある場合，$\hat{A}, \hat{B}$ の固有値の組 (a, b) は k 重に縮退しているという．このとき，量子力学では次の法則が成り立つ：

系の状態が単位ベクトル $|\psi\rangle \in \mathscr{H}$ 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

$$\mathrm{Prob}(\hat{A}=a,\hat{B}=b|\psi) = \sum_{r=1}^{k} \left|\langle v^{(r)}|\psi\rangle\right|^2 \tag{16}$$

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．

$$\hat{U} = \begin{pmatrix} 2 & 1 & 0 \\ 1 & 2 & 0 \\ 0 & 0 & 3 \end{pmatrix} \tag{17}$$

$$\hat{V} = \begin{pmatrix} 0 & 2 & 0 \\ 2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 2 \end{pmatrix} \tag{18}$$

$$|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} \tag{19}$$

(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．

$$[\hat{B},\hat{A}] = -[\hat{A},\hat{B}] \tag{20}$$
$$[\lambda\hat{A},\hat{B}] = \lambda[\hat{A},\hat{B}] \tag{21}$$
$$[\hat{A},\lambda\hat{B}] = \lambda[\hat{A},\hat{B}] \tag{22}$$
$$[\hat{A}+\hat{B},\hat{C}] = [\hat{A},\hat{C}] + [\hat{B},\hat{C}] \tag{23}$$
$$[\hat{A},\hat{B}+\hat{C}] = [\hat{A},\hat{B}] + [\hat{A},\hat{C}] \tag{24}$$
$$[\hat{A},\hat{B}\hat{C}] = [\hat{A},\hat{B}]\hat{C} + \hat{B}[\hat{A},\hat{C}] \tag{25}$$
$$[\hat{A}\hat{B},\hat{C}] = [\hat{A},\hat{C}]\hat{B} + \hat{A}[\hat{B},\hat{C}] \tag{26}$$
$$[\hat{A},[\hat{B},\hat{C}]] + [\hat{B},[\hat{C},\hat{A}]] + [\hat{C},[\hat{A},\hat{B}]] = 0 \tag{27}$$
$$[\hat{A},\hat{B}]^\dagger = -[\hat{A}^\dagger,\hat{B}^\dagger] \tag{28}$$

性質 (25), (26) は**ライプニッツ則** (Leibniz rule) と呼ばれる．(27) 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．

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

$$\hat{Y} = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \tag{30}$$

$$\hat{Z} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \tag{31}$$

(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) 単位ベクトル

$$|\psi\rangle = \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \end{pmatrix} \tag{32}$$

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，この式の物理的意味を検討せよ．

上の問題の一部に答えておく．行列 $\hat{X},\hat{Y},\hat{Z}$ の固有値はどれも ±1 である．従って，どれも期待値（平均値）は $-1 \le \langle\hat{X}\rangle \le 1$ の範囲にあり，$\langle\hat{X}\rangle^2 \le 1$ が成り立つ．$\langle\hat{X}\rangle^2 = 1$ になるのは $\langle\hat{X}\rangle=\pm1$ のとき，すなわち，$|\psi\rangle$ が $\hat{X}$ の固有状態になっているときだけである．$\langle\hat{X}\rangle^2=1$ であれば，$\langle\hat{X}\rangle^2+\langle\hat{Y}\rangle^2+\langle\hat{Z}\rangle^2=1$ は $\langle\hat{Y}\rangle=\langle\hat{Z}\rangle=0$ を意味する．つまり，$|\psi\rangle$ が $\hat{X}$ の固有状態，すなわち，$\hat{X}$ の値が確定している状態であれば，$\hat{Y}$, $\hat{Z}$ の値は $\frac{1}{2}$ の確率で ±1 でなくてはならない．同様に，$\hat{Y}$ の値が確定すれば $\hat{X}$, $\hat{Z}$ の値は完全に不確定である．このように，**非可換な物理量は，一方の値を確定させると他の物理量の値は不確定になるという性質を持つ．**こういう性質を**不確定性関係** (uncertainty relation) という．

干渉効果

ヒルベルト空間 $\mathbb{C}^2$ の元として

$$|\chi_+\rangle=\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1\\1\end{pmatrix},\quad |\chi_-\rangle=\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1\\-1\end{pmatrix} \tag{33}$$

$$|\zeta_+\rangle=\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix},\quad |\zeta_-\rangle=\begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix} \tag{34}$$

とおくと，$|\chi_\pm\rangle$ は演算子 $\hat{X}$ の固有値 $x=\pm1$ の**固有状態**（固有ベクトルのこと）である．$|\zeta_\pm\rangle$ は $\hat{Z}$ の固有値 $z=\pm1$ の固有状態である．これらの定義から

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

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

$$|\zeta_+\rangle=\frac{1}{\sqrt{2}}\big(|\chi_+\rangle+|\chi_-\rangle\big) \tag{37}$$

$$|\zeta_-\rangle=\frac{1}{\sqrt{2}}\big(|\chi_+\rangle-|\chi_-\rangle\big) \tag{38}$$

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 $|\zeta_-\rangle$ 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，

$$\begin{aligned}\mathrm{Prob}(x=1\leftarrow z=1) &= \Big|\langle\chi_+|\zeta_+\rangle\Big|^2\\ &= \Big|\frac{1}{\sqrt{2}}\Big|^2\\ &= \frac{1}{2}\end{aligned} \tag{39}$$

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，

$$\begin{aligned}&\mathrm{Prob}(x=1\leftarrow z=1)\\ &= \mathrm{Prob}(x=-1\leftarrow z=1)\\ &= \mathrm{Prob}(z=1\leftarrow x=1)\\ &= \mathrm{Prob}(z=-1\leftarrow x=1)\\ &= \mathrm{Prob}(z=1\leftarrow x=-1)\\ &= \mathrm{Prob}(z=-1\leftarrow x=-1)\\ &= \frac{1}{2}\end{aligned} \tag{40}$$

であることも結論できる．また，

$$\mathrm{Prob}(z=1\leftarrow z=1)=\Big|\langle\zeta_+|\zeta_+\rangle\Big|^2=1 \tag{41}$$

$$\mathrm{Prob}(z=-1\leftarrow z=1)=\Big|\langle\zeta_-|\zeta_+\rangle\Big|^2=0 \tag{42}$$

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 (40) の値がすべて $\frac{1}{2}$ になることを確かめよ．また，これらの式 (40), (41), (42) 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

$$
\begin{aligned}
|\psi_\alpha\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}\Big(e^{i\alpha/2}|\zeta_+\rangle + e^{-i\alpha/2}|\zeta_-\rangle\Big) \\
&= \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} e^{i\alpha/2} \\ e^{-i\alpha/2} \end{pmatrix} \qquad (43)
\end{aligned}
$$

とおいた状態を考える．

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

(ii) 状態ベクトル $|\psi_\alpha\rangle$ において物理量 $\hat{Z}$ を測ったときに測定値 $z = \pm 1$ を得る確率

$$
\begin{aligned}
&\mathrm{Prob}(z = 1 \leftarrow \psi_\alpha), \\
&\mathrm{Prob}(z = -1 \leftarrow \psi_\alpha)
\end{aligned}
$$

をそれぞれ求めよ．

(iii) 次の式を計算せよ：

$$
\begin{aligned}
&Q(x = 1 \leftarrow \psi_\alpha) \\
&:= \mathrm{Prob}(x = 1 \leftarrow z = 1)\cdot\mathrm{Prob}(z = 1 \leftarrow \psi_\alpha) \\
&\quad + \mathrm{Prob}(x = 1 \leftarrow z = -1) \\
&\qquad \times \mathrm{Prob}(z = -1 \leftarrow \psi_\alpha). \qquad (44)
\end{aligned}
$$

(iv) 状態ベクトル $|\psi_\alpha\rangle$ において物理量 $\hat{X}$ を測ったときに測定値 $x = \pm 1$ を得る確率

$$
\begin{aligned}
&\mathrm{Prob}(x = 1 \leftarrow \psi_\alpha), \qquad (45) \\
&\mathrm{Prob}(x = -1 \leftarrow \psi_\alpha) \qquad (46)
\end{aligned}
$$

をそれぞれ求めよ．

(v) これらの結果の意味するところを考察せよ．

式 (41) で見たように，固有状態 $|\zeta_+\rangle$ は物理量 $\hat{Z}$ を測れば確実に測定値 $z = 1$ が得られる状態である．同様に，固有状態 $|\zeta_-\rangle$ は物理量 $\hat{Z}$ を測れば確実に測定値 $z = -1$ が得られる状態である．

式 (43) で定めた $|\psi_\alpha\rangle$ は二つの状態 $|\zeta_+\rangle, |\zeta_-\rangle$ の重ね合わせ状態である．この状態 $|\psi_\alpha\rangle$ において物理量 $\hat{Z}$ を測れば測定値 $z = \pm 1$ がそれぞれ $\frac{1}{2}$ の確率で出現する．

$z = \pm 1$ の固有状態 $|\zeta_\pm\rangle$ において物理量 $\hat{X}$ を測れば測定値として $x = \pm 1$ が $\frac{1}{2}$ の確率で出現する．

そうすると，$|\psi_\alpha\rangle$ が $|\zeta_+\rangle, |\zeta_-\rangle$ の半々の割合の混合物だと考えると，(44) 式のような推論により，状態 $|\psi_\alpha\rangle$ において $\hat{X}$ を測れば $x = \pm 1$ の値が $\frac{1}{2}$ の確率で出現することが予測される．が，実際にはそうはならない，ということを (45) 式は言っている．パラメータ α の値に応じて，確率の強め合い，あるいは，弱め合いのように見える現象が起こる．これを重ね合わせ状態における**干渉効果** (interference effect) という．

非可換量の値の不思議

式 (29), (30), (31) 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 $\hat{M} = x_1\hat{X} + x_2\hat{Y} + x_3\hat{Z}$ の固有値と固有ベクトルを求めよ．

$\hat{X}, \hat{Y}$ の固有値（測定値）は 1 または -1 だった．そうすると，直観的には，$\hat{X} + \hat{Y} = \hat{L}$ の値は 2 または 0 または -2 になることが予想される．しかし，上の問題を解いてみると，そ

うはならないことがわかる．標語的に言うと，**$\hat{\boldsymbol{X}}+\hat{\boldsymbol{Y}}$ の値は，$\hat{\boldsymbol{X}}$ の値と $\hat{\boldsymbol{Y}}$ の値を足した値に等しくはない．**

$\hat{X},\hat{Y},\hat{Z}$ の固有値（測定値）は 1 または -1 なので，$x_1\hat{X}+x_2\hat{Y}+x_3\hat{Z}=\hat{M}$ の値は $\pm x_1\pm x_2\pm x_3$ で表される値になる，と素朴には予想されるが，上の問題を解いてみると，そうはならないことがわかる．

これらの問題は，非可換物理量の和の値に関しては単純な数値の和の規則が成り立たないことを示している．もう少し正確に言うと，**非可換物理量の和の固有値は，足す前の物理量の固有値の単純な足し算に等しくない．**

このことは，非可換な物理量は個別に測定して値を確定させることはできるが，**二つ以上の非可換な物理量の値は同時に実在するとは思ってはいけない**ことを意味する．