物理量を表す演算子

量子力学では系の状態はヒルベルト空間のベクトルで表され，系の物理量は**ヒルベルト空間上の演算子**で表される．とくにエルミート演算子は，固有値が実数であり，異なる固有値に属する固有ベクトルが直交し，固有ベクトル全部を集めたものが基底（完全系）になるという著しい性質を持ち，そのおかげで物理的な意味付けができる．

演算子

ヒルベルト空間 $\mathscr{H}$ があるとき，任意のベクトル $|\psi\rangle \in \mathscr{H}$ をベクトル $\hat{A}|\psi\rangle \in \mathscr{H}$ に移す写像 $A : \mathscr{H} \to \mathscr{H}$ が，任意の $|\psi_1\rangle, |\psi_2\rangle, |\psi\rangle \in \mathscr{H}$ と任意の $c \in \mathbb{C}$ に対して

$$\hat{A}\Big(|\psi_1\rangle + |\psi_2\rangle\Big) = \hat{A}|\psi_1\rangle + \hat{A}|\psi_2\rangle \tag{1}$$

$$\hat{A}(c|\psi\rangle) = c(\hat{A}|\psi\rangle) \tag{2}$$

を満たすならば，$\hat{A}$ を $\mathscr{H}$ 上の**線形演算子** (linear operator) あるいはたんに**演算子** (operator) という．

とくに任意のベクトル $|\psi\rangle \in \mathscr{H}$ に対して

$$\hat{I}|\psi\rangle := |\psi\rangle \tag{3}$$

で定められる写像 $\hat{I} : \mathscr{H} \to \mathscr{H}$ を**恒等演算子** (identity operator) または**単位演算子** (unit operator) という．

演算子同士の和 $\hat{A}+\hat{B}$ や，演算子のスカラー倍 $c\hat{A}$，演算子同士の積 $\hat{A}\hat{B}$ が定義できる：

$$(\hat{A}+\hat{B})|\psi\rangle := \hat{A}|\psi\rangle + \hat{B}|\psi\rangle \tag{4}$$

$$(c\hat{A})|\psi\rangle := c(\hat{A}|\psi\rangle) \tag{5}$$

$$(\hat{A}\hat{B})|\psi\rangle := \hat{A}(\hat{B}|\psi\rangle) \tag{6}$$

しかし，演算子の積においては，一般に $\hat{A}\hat{B}$ と $\hat{B}\hat{A}$ は等しくない．$\hat{A}\hat{B}$ と $\hat{B}\hat{A}$ の「等しくない度合い」を測るものとして

$$[\hat{A}, \hat{B}] := \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A} \tag{7}$$

を定め，$[\hat{A}, \hat{B}]$ を $\hat{A}$ と $\hat{B}$ の**交換子** (commutator) という．また，

$$\{\hat{A}, \hat{B}\} := \hat{A}\hat{B} + \hat{B}\hat{A} \tag{8}$$

を $\hat{A}$ と $\hat{B}$ の**反交換子** (anti-commutator) という．

例．n 行 n 列の複素数行列は，ヒルベルト空間 $\mathscr{H} = \mathbb{C}^n$ 上の演算子である．この場合，演算子の和・スカラー倍・積は，行列の和・スカラー倍・積に他ならない．また，$\mathbb{C}^n$ 空間における恒等演算子は単位行列である．例えば $\mathbb{C}^2$ 上なら

$$\hat{I} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \tag{9}$$

である．

問 1. (i) $\mathscr{H} = \mathbb{C}^2$ において

$$|\psi\rangle = \begin{pmatrix} z_1 \\ z_2 \end{pmatrix},\ \hat{A} = \begin{pmatrix} a & c \\ b & d \end{pmatrix},\ \hat{B} = \begin{pmatrix} u & x \\ v & y \end{pmatrix} \tag{10}$$

とおいて，$\hat{B}|\psi\rangle, \hat{A}(\hat{B}|\psi\rangle)$ を計算せよ．その計算結果から $\hat{A}\hat{B}$ を求めよ．(ii) 同様に，$\hat{A}|\psi\rangle$, $\hat{B}(\hat{A}|\psi\rangle)$ を計算し，その計算結果から $\hat{B}\hat{A}$ を求めよ．

例．ヒルベルト空間 $\mathscr{H}$ が関数空間 $L^2(\mathbb{R})$ だった場合，恒等演算子 $\hat{I}$ は波動関数 $\psi(x) \in L^2(\mathbb{R})$ に対して

$$\hat{I}\psi(x) = \psi(x) \tag{11}$$

のように作用する．つまり恒等演算子は波動関数を変えない．

例．実数値関数 $V(x)$ が与えられれば，関数空間 $L^2(\mathbb{R})$ において関数 $V(x)$ による**掛け算演算子** (multiplicative operator) $\hat{V}$ が

$$\hat{V}\psi(x) := V(x)\psi(x) \tag{12}$$

で定められる．とくに x 座標の値を掛け算する演算子 $\hat{X}$ が

$$\hat{X}\psi(x) := x \cdot \psi(x) \tag{13}$$

で定まるが，この $\hat{X}$ を**位置演算子** (position operator) という．

例．関数空間 $L^2(\mathbb{R})$ において**運動量演算子** (momentum operator) $\hat{P}$ を

$$\hat{P}\psi(x) := -i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial x} \tag{14}$$

で定める．ここで**プランク定数** (Planck constant) と呼ばれる物理定数 h に連動して $\hbar$ は定められる．その値は

$$h = 6.626070040 \times 10^{-34}\,\mathrm{J\cdot s} \tag{15}$$
$$\hbar := \frac{h}{2\pi} = 1.054571800 \times 10^{-34}\,\mathrm{J\cdot s} \tag{16}$$

である（CODATA2014 参照）．プランク定数の値は文献によって微妙に異なることがあるので注意してほしい．CODATA（Committee on Data for Science and Technology，科学技術データ委員会）は 2018 年に物理量単位系の改定と物理定数値を発表する予定である．たいていの計算には有効数字 3 ケタの近似値で十分である：

$$h \fallingdotseq 6.63 \times 10^{-34}\,\mathrm{J\cdot s} \tag{17}$$
$$\hbar \fallingdotseq 1.05 \times 10^{-34}\,\mathrm{J\cdot s} \tag{18}$$

ただし J はエネルギーの単位のジュールで，s は時間の単位の秒 (second) である．ラグランジアンを時間で積分したものを**作用積分** (action integral) とか**作用**という．ラグランジアンはエネルギーの次元を持ち，**プランク定数は作用の次元を持つ．**

問 2．プランク定数の単位は

$$\mathrm{J\cdot s} = \mathrm{m^2\cdot kg\cdot s^{-1}} \tag{19}$$

と一致することを示せ．プランク定数の次元は（運動量×長さ）の次元と一致することを確認せよ．

問 3．$\hat{X}$ と $\hat{P}$ の交換子が

$$[\hat{X}, \hat{P}] = i\hbar\hat{I} \tag{20}$$

となることを証明せよ．この関係式 (20) を**正準交換関係** (canonical commutation relation) という．

問 4．過去にはプランク定数の値は

$h = 6.6260755 \times 10^{-34}\,\mathrm{J\cdot s}$（1994 年理科年表）

$h = 6.62606957 \times 10^{-34}\,\mathrm{J\cdot s}$（2014 年理科年表）

などとされていた．なぜプランク定数の値が変化したのか？　何を基準にしてプランク定数の値を決めていたのか？

エルミート演算子

任意のベクトル $|\chi\rangle, |\psi\rangle \in \mathscr{H}$ に対して

$$\langle\chi|\hat{A}\psi\rangle = \langle\hat{A}^\dagger\chi|\psi\rangle \tag{21}$$

を満たすような演算子 $\hat{A}^\dagger$ を $\hat{A}$ の**エルミート共役** (Hermite conjugate) という．この式は

$$\langle\chi|\hat{A}|\psi\rangle^* = \langle\psi|\hat{A}^\dagger|\chi\rangle \tag{22}$$

とも書ける．

例．ヒルベルト空間 $\mathscr{H} = \mathbb{C}^n$ 上の演算子のエルミート共役は，行列のエルミート共役，すなわち転置行列の複素共役である．

$\hat{A}^\dagger = \hat{A}$ を満たすような演算子 $\hat{A}$ を**自己共役演算子** (self-adjoint operator) あるいは**エル**

ミート演算子 (Hermite operator, Hermitian) という．

$\hat{A}^\dagger = -\hat{A}$ を満たすような演算子 $\hat{A}$ を**反自己共役演算子** (anti-self-adjoint operator) あるいは**反エルミート演算子** (anti-Hermite operator) という．

問 5．エルミート共役の性質

$$(\hat{A}+\hat{B})^\dagger = \hat{A}^\dagger + \hat{B}^\dagger \tag{23}$$

$$(c\hat{A})^\dagger = c^* \hat{A}^\dagger \tag{24}$$

$$(\hat{A}\hat{B})^\dagger = \hat{B}^\dagger \hat{A}^\dagger \tag{25}$$

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

$$(\hat{A}^\dagger)^\dagger = \hat{A} \tag{27}$$

を証明せよ．

問 6．$\mathbb{C}^n$ 上の行列 $\hat{A}$ の転置行列の複素共役を $\hat{A}^\dagger$ とすると性質 (21) が成立することを確認せよ．

問 7．運動量演算子 $\hat{P}$ が自己共役演算子であることを確認せよ．すなわち，任意の波動関数 $\psi_1(x)$, $\psi_2(x)$ に対して

$$\langle\psi_1|\hat{P}|\psi_2\rangle = -i\hbar \int_{-\infty}^{\infty} \psi_1^*(x) \frac{\partial \psi_2(x)}{\partial x}\, dx \tag{28}$$

とおいたとき，

$$\langle\psi_2|\hat{P}|\psi_1\rangle = \langle\psi_1|\hat{P}|\psi_2\rangle^* \tag{29}$$

が成立することを示せ．

演算子の固有値

演算子 $\hat{A}$ に対して

$$\hat{A}|v\rangle = \lambda|v\rangle \tag{30}$$

を満たすようなベクトル $|v\rangle \in \mathscr{H}$ ($|v\rangle \neq 0$) と複素数 $\lambda \in \mathbb{C}$ があった場合，λ を演算子 $\hat{A}$ の**固有値** (eigenvalue) といい，$|v\rangle$ を固有値 λ に属する**固有ベクトル** (eigenvector) という．与えられた演算子の固有値と固有ベクトルをすべて求めることを**固有値問題を解く**という．

例題：固有値問題の解法を実演しよう．まず与えられた行列

$$\hat{A} = \begin{pmatrix} 3 & -1 \\ 2 & 6 \end{pmatrix} \tag{31}$$

が自己共役か否か判定する．$\hat{A}$ のエルミート共役

$$\hat{A}^\dagger = \begin{pmatrix} 3 & 2 \\ -1 & 6 \end{pmatrix} \tag{32}$$

は $\hat{A}$ に等しくないので，$\hat{A}$ は自己共役ではない（だからと言って，固有値問題が解けないわけではない）．λ を未知変数として

$$\lambda\hat{I} - \hat{A} = \begin{pmatrix} \lambda-3 & 1 \\ -2 & \lambda-6 \end{pmatrix} \tag{33}$$

という行列を作り，これの行列式が零になることを要請して固有値方程式を立て，それを解く：

$$\begin{aligned} \det(\lambda\hat{I}-\hat{A}) &= (\lambda-3)(\lambda-6) - 1\cdot(-2) \\ &= \lambda^2 - 9\lambda + 18 + 2 \\ &= \lambda^2 - 9\lambda + 20 \\ &= (\lambda-4)(\lambda-5) \;=\; 0 \end{aligned} \tag{34}$$

この方程式の解 $\lambda = 4, 5$ が $\hat{A}$ の固有値である．固有値 $\lambda_1 = 4$ に対する固有ベクトル $|v_1\rangle$ は $\hat{A}|v_1\rangle = \lambda_1|v_1\rangle$ すなわち $(\lambda_1\hat{I}-\hat{A})|v_1\rangle = 0$ を満たすことが要請される：

$$\begin{aligned} (\lambda_1\hat{I}-\hat{A})|v_1\rangle &= \begin{pmatrix} 4-3 & 1 \\ -2 & 4-6 \end{pmatrix}|v_1\rangle \\ &= \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ -2 & -2 \end{pmatrix}|v_1\rangle \;=\; 0. \end{aligned} \tag{35}$$

これを満たす $|v_1\rangle$ は

$$|v_1\rangle = c_1 \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix} \tag{36}$$

である．ここで c_1 は任意の複素数である．同様に，固有値 $\lambda_2 = 5$ に対する固有ベクトル $|v_2\rangle$ は

$$
\begin{aligned}
(\lambda_2 \hat{I} - \hat{A})|v_2\rangle &= \begin{pmatrix} 5-3 & 1 \\ -2 & 5-6 \end{pmatrix}|v_2\rangle \\
&= \begin{pmatrix} 2 & 1 \\ -2 & -1 \end{pmatrix}|v_2\rangle = 0
\end{aligned} \tag{37}
$$

を満たすべきであり，これにあてはまる $|v_2\rangle$ は

$$
|v_2\rangle = c_2 \begin{pmatrix} 1 \\ -2 \end{pmatrix} \tag{38}
$$

である．ここで c_2 は任意の複素数である．まとめると，(31) 式の行列 $\hat{A}$ の固有値・固有ベクトルは

$$
\lambda_1 = 4, \quad |v_1\rangle = c_1 \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix} \tag{39}
$$

$$
\lambda_2 = 5, \quad |v_2\rangle = c_2 \begin{pmatrix} 1 \\ -2 \end{pmatrix} \tag{40}
$$

である．念のため，固有ベクトルの内積を求めると

$$
\begin{aligned}
\langle v_1|v_1\rangle &= |c_1|^2\{|1|^2 + |-1|^2\} = 2\,|c_1|^2 \\
\langle v_2|v_2\rangle &= |c_2|^2\{|1|^2 + |-2|^2\} = 5\,|c_2|^2 \\
\langle v_1|v_2\rangle &= c_1^* c_2\{1^*\,1 + (-1)^*(-2)\} = 3\,c_1^* c_2
\end{aligned}
$$

となる．この $\hat{A}$ は自己共役ではないので，異なる固有値に対する固有ベクトル v_1, v_2 は直交しない．固有ベクトルは規格化しておくと便利なので，規格化もやっておこう．$\langle v_1|v_1\rangle = 1$ を要請すると，

$$
\langle v_1|v_1\rangle = 2\,|c_1|^2 = 1
$$

だから，これにあてはまる c_1 は

$$
c_1 = \frac{1}{\sqrt{2}}\,e^{i\theta_1}.
$$

ただし，θ_1 は任意の実数．規格化された固有ベクトルを一つ求めよと言われたら，例えば $e^{i\theta_1} = 1$ を選んで，

$$
|v_1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix} \tag{41}
$$

とすればよい．同様に，

$$
\langle v_2|v_2\rangle = 5\,|c_2|^2 = 1
$$

を要請すると，あてはまる c_2 は，θ_2 を任意の実数として

$$
c_2 = \frac{1}{\sqrt{5}}\,e^{i\theta_2}
$$

であり，規格化された固有ベクトルを一つ求めよと言われたら，例えば $e^{i\theta_2} = 1$ を選んで，

$$
|v_2\rangle = \frac{1}{\sqrt{5}}\begin{pmatrix} 1 \\ -2 \end{pmatrix} \tag{42}
$$

とすればよい．あるいは，$e^{i\theta_2} = -1$ を選んで

$$
|v_2\rangle = -\frac{1}{\sqrt{5}}\begin{pmatrix} 1 \\ -2 \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{5}}\begin{pmatrix} -1 \\ 2 \end{pmatrix} \tag{43}
$$

を答えても間違ってはいない．

問 8. $\mathbb{C}^n$ 上の行列 $\hat{A}$ に対して，

$$
\det(\lambda\hat{I} - \hat{A}) = 0 \tag{44}
$$

は複素数 λ が演算子 $\hat{A}$ の固有値であるための必要十分条件であることを証明せよ．

問 9. 次の行列は自己共役かそうでないか，判定せよ．また，各行列の固有値と固有ベクトルをすべて求めよ．各行列の固有ベクトルを $|v_j\rangle$ $(j = 1, 2, \cdots)$ としたとき，内積 $\langle v_j|v_k\rangle$ を

求めよ．

$$\hat{A} = \begin{pmatrix} 2 & 3-4i \\ 3+4i & 2 \end{pmatrix} \tag{45}$$

$$\hat{B} = \begin{pmatrix} -1 & 1 \\ -6 & 4 \end{pmatrix} \tag{46}$$

$$\hat{C} = \begin{pmatrix} -9+8i & 36-24i \\ -3+2i & 12-6i \end{pmatrix} \tag{47}$$

$$\hat{D} = \begin{pmatrix} -1 & 8 \\ -2 & 7 \end{pmatrix} \tag{48}$$

$$\hat{E} = \begin{pmatrix} -4 & -1 & -7 \\ 2 & 2 & 2 \\ 4 & 1 & 7 \end{pmatrix} \tag{49}$$

$$\hat{F} = \begin{pmatrix} 2 & -1 & 2 \\ -1 & 2 & 2 \\ 2 & 2 & -1 \end{pmatrix} \tag{50}$$

$$\hat{G} = \begin{pmatrix} 2 & 1 & 0 & 1 \\ 1 & 2 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 2 & 1 \\ 1 & 0 & 1 & 2 \end{pmatrix} \tag{51}$$

自己共役演算子には次のような著しい性質がある．**(i) 自己共役演算子の固有値はすべて実数である．(ii) 異なる固有値に属する固有ベクトルは直交する．(iii) 固有ベクトルの集合が $\mathscr{H}$ の基底になる．** 逆に，これら (i), (ii), (iii) の性質を備えた演算子は自己共役演算子になっている．

問 10. 上に述べた自己共役演算子の性質 (i), (ii) を証明せよ．

自己共役演算子 $\hat{A}$ の固有値 λ に属する固有ベクトルとは $\hat{A}|v\rangle = \lambda|v\rangle$ を満たすベクトル $|v\rangle$ のことだが，同一の固有値 λ に対する固有ベクトルが $\{|v_\lambda^{(1)}\rangle, \cdots, |v_\lambda^{(k)}\rangle\}$ のように複数個あることもある．そのような場合も

$$\langle v_\lambda^{(r)} | v_\lambda^{(s)} \rangle = \delta_{rs} \tag{52}$$

となるように固有ベクトルを選ぶことができる．一つの固有値 λ に属する一次独立な固有ベクトルが k 個あり，$k+1$ 個はない場合，固有値 λ は k 重に**縮退** (degenerate) しているという．

上の (iii) で述べたように，自己共役作用素の固有ベクトルを集めたものはヒルベルト空間の基底をなす．つまり，任意のベクトル $|\psi\rangle \in \mathscr{H}$ に対して

$$|\psi\rangle = \sum_\lambda \sum_{r=1}^{k} c_\lambda^{(r)} |v_\lambda^{(r)}\rangle \tag{53}$$

となるような複素数 $c_\lambda^{(r)}$ が一意的に存在し，展開係数に関しては，正規直交基底による展開と同様に

$$c_\lambda^{(r)} = \langle v_\lambda^{(r)} | \psi \rangle \tag{54}$$

が成り立つ．

固有値と測定値の関係

前節で述べた自己共役演算子の性質は純粋に数学的な事実だが，量子力学ではさらに次のような解釈を加える．

物理量は自己共役演算子で表される．演算子 $\hat{A}$ で表される物理量が取り得る値（測定値）は，$\hat{A}$ の固有値のどれかである． つまり，量子力学では，物理量は演算子で表され，物理量の値は演算子の固有値で表される．

系の状態が規格化されたベクトル $|\psi\rangle \in \mathscr{H}$ で表されているとき，物理量 $\hat{A}$ を測ったときに測定値として λ を得る確率は

$$\mathrm{Prob}(\hat{A} = \lambda | \psi) \ = \ \sum_{r=1}^{k} \left| \langle v_\lambda^{(r)} | \psi \rangle \right|^2 \tag{55}$$

に等しい． この式を**ボルン (Born) の確率公式**という．ここで $\{v_\lambda^{(1)}, \cdots, v_\lambda^{(k)}\}$ は (52) 式のところで述べた，演算子 $\hat{A}$ の固有値 λ に属する規格化された直交固有ベクトルの組である．

したがって，**系の状態ベクトルが $\hat{A}$ の固有値 λ に属する固有ベクトルであれば，$\hat{A}$ を測ったとき 100 パーセント確実に測定値 λ を得る．**

しかし，**系の状態ベクトルが固有ベクトルではない場合は，同じ状態ベクトルの系を多数用意して物理量 $\hat{A}$ を測ると，$\hat{A}$ の固有値のいずれかが測定値として得られるが，測定値は一定ではなく，(55) 式で与えられる確率に従う頻度で測定値 λ が現れる**．

N 個の系を用意して，すべて同じ状態 $|\psi\rangle$ にセットしたとする．N 個の系に対して物理量 $\hat{A}$ の測定を行い，λ という測定値が N_λ 回得られたとする．このとき，測定値の**平均値** (average) は

$$\langle \hat{A} \rangle \;:=\; \frac{\sum_\lambda \lambda \cdot N_\lambda}{N} \tag{56}$$

で定義される．

$$p_\lambda \;:=\; \lim_{N\to\infty} \frac{N_\lambda}{N} \tag{57}$$

は $\hat{A} = \lambda$ が得られる確率であり，$N \to \infty$ の極限で平均値は

$$\langle \hat{A} \rangle \;=\; \sum_\lambda \lambda \cdot p_\lambda \tag{58}$$

となる．一方で，

$$\langle \hat{A} \rangle \;:=\; \langle \psi | \hat{A} | \psi \rangle \tag{59}$$

を状態 $|\psi\rangle$ における物理量 $\hat{A}$ の**期待値** (expectation value) という（具体的な計算のしかたは (65) 式を参照）．

問 11．確率公式 (55) を用いて定められる平均値 (58) と，期待値 (59) とが等しいことを証明せよ．

問 12．$\hat{A}^\dagger = \hat{A}$ ならば $\langle \psi | \hat{A} | \psi \rangle$ は実数になることを証明せよ．また，$\hat{A}^\dagger = -\hat{A}$ ならば $\langle \psi | \hat{A} | \psi \rangle$ は純虚数になることを証明せよ．

例題：行列

$$\hat{A} = \begin{pmatrix} 5 & 1 \\ 1 & 5 \end{pmatrix} \tag{60}$$

の固有値と規格化された固有ベクトルは

$$a_1 = 6, \quad |v_1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} \tag{61}$$

$$a_2 = 4, \quad |v_2\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix} \tag{62}$$

である．規格化された状態ベクトル

$$|\psi\rangle = \frac{1}{5} \begin{pmatrix} 3 \\ 4 \end{pmatrix} \tag{63}$$

において物理量 $\hat{A}$ を測ったときに測定値 $a_1 = 6$ を得る確率は，ボルンの確率公式 (55) より

$$\begin{aligned} \mathrm{Prob}(\hat{A} = 6|\psi) &= \left| \langle v_1 | \psi \rangle \right|^2 \\ &= \left| \frac{1}{5\sqrt{2}} (3+4) \right|^2 = \frac{49}{50} \end{aligned}$$

となる．同様に，状態ベクトル $|\psi\rangle$ において物理量 $\hat{A}$ を測ったときに測定値 $a_2 = 4$ を得る確率は，

$$\begin{aligned} \mathrm{Prob}(\hat{A} = 4|\psi) &= \left| \langle v_2 | \psi \rangle \right|^2 \\ &= \left| \frac{1}{5\sqrt{2}} (3-4) \right|^2 = \frac{1}{50} \end{aligned}$$

となる．これらより，$\hat{A}$ の平均値は

$$\begin{aligned} & \langle \hat{A} \rangle \\ =\; & 6 \times \mathrm{Prob}(\hat{A} = 6|\psi) + 4 \times \mathrm{Prob}(\hat{A} = 4|\psi) \\ =\; & 6 \times \frac{49}{50} + 4 \times \frac{1}{50} = \frac{298}{50} = \frac{149}{25} \end{aligned} \tag{64}$$

となる．また，

$$\begin{aligned} & |v_1\rangle\langle v_1|\psi\rangle + |v_2\rangle\langle v_2|\psi\rangle \\ =\; & \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} \cdot \frac{7}{5\sqrt{2}} + \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix} \cdot \frac{-1}{5\sqrt{2}} \\ =\; & \frac{7}{10} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} - \frac{1}{10} \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix} \\ =\; & \frac{1}{10} \begin{pmatrix} 6 \\ 8 \end{pmatrix} = \frac{1}{5} \begin{pmatrix} 3 \\ 4 \end{pmatrix} = |\psi\rangle \end{aligned}$$

となり，展開公式 (53), (54) が正しいことが確認できる．

また，(59) を定義どおり計算してみると，

$$\begin{aligned}\langle\psi|\hat{A}|\psi\rangle &= \frac{1}{5}\cdot\frac{1}{5}(3,4)\begin{pmatrix}5 & 1\\ 1 & 5\end{pmatrix}\begin{pmatrix}3\\ 4\end{pmatrix}\\ &= \frac{1}{25}(3,4)\begin{pmatrix}15+4\\ 3+20\end{pmatrix}\\ &= \frac{1}{25}(3\cdot 19+4\cdot 23)\\ &= \frac{149}{25} \qquad (65)\end{aligned}$$

となり，(64) で計算した結果と一致する．

また，行列

$$\hat{B} = \begin{pmatrix}8 & -3i\\ 3i & 8\end{pmatrix} \qquad (66)$$

の固有値と規格化された固有ベクトルは

$$b_1 = 11,\quad |w_1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1\\ i\end{pmatrix} \qquad (67)$$

$$b_2 = 5,\quad |w_2\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1\\ -i\end{pmatrix} \qquad (68)$$

である．

問 13. 上の例題の行列 $\hat{B}$ と状態ベクトル

$$|\phi\rangle = \frac{1}{\sqrt{3}}\begin{pmatrix}1+i\\ 1\end{pmatrix} \qquad (69)$$

に関して以下の問いに答えよ．

(1) $\mathrm{Prob}(\hat{B}=11|\phi)$ と $\mathrm{Prob}(\hat{B}=5|\phi)$ を求めよ．

(2) (58) に従って $\langle\hat{B}\rangle$ を求めよ．

(3) (59) に従って $\langle\phi|\hat{B}|\phi\rangle$ を求めよ．

(4) 物理量 $\hat{A}$ を測れば確率 1 で測定値 $a_1 = 6$ を得る状態において，物理量 $\hat{B}$ を測って測定値 $b_1 = 11$ を得る確率を求めよ．

問 14. 行列

$$\hat{C} = \begin{pmatrix}3 & 1 & 0\\ 1 & 3 & 0\\ 0 & 0 & 4\end{pmatrix} \qquad (70)$$

の固有値と規格化された固有ベクトルを求めよ．また，状態ベクトル

$$|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{14}}\begin{pmatrix}1\\ 2\\ 3\end{pmatrix} \qquad (71)$$

において物理量 $\hat{C}$ を測ったときに各固有値を得る確率を求めよ．さらに，この状態における $\hat{C}$ の期待値を求めよ．