第8章　一般的枠組み

8.1　線形代数復習

次の節で議論するように，量子力学の数学的構造は線形代数そのものである．そこでまず線形代数の復習をしよう．

8.1.1　数ベクトル

n 個の複素数 $z_1, z_2, \dots, z_n$ を順序付けて並べた組を n 次元 (複素) **数ベクトル**という．特に縦に並べた組

$$\boldsymbol{z} = \begin{pmatrix} z_1 \\ z_2 \\ \vdots \\ z_n \end{pmatrix}$$

を**縦ベクトル**（列ベクトル）という.（これに対し n 個の複素数を横に並べたものを**横ベクトル**（行ベクトル）という.）これらの間には次のような足し算，複素数倍が定義されている．

$$\text{足し算：}\quad \boldsymbol{z} = \begin{pmatrix} z_1 \\ z_2 \\ \vdots \\ z_n \end{pmatrix}, \quad \boldsymbol{w} = \begin{pmatrix} w_1 \\ w_2 \\ \vdots \\ w_n \end{pmatrix}, \quad \text{に対して} \quad \boldsymbol{z} + \boldsymbol{w} = \begin{pmatrix} z_1 + w_1 \\ z_2 + w_2 \\ \vdots \\ z_n + w_n \end{pmatrix}.$$

$$\text{複素数倍：}\quad \lambda \boldsymbol{z} = \begin{pmatrix} \lambda z_1 \\ \lambda z_2 \\ \vdots \\ \lambda z_n \end{pmatrix}. \qquad \lambda\text{：複素数（スカラー）}$$

n 次元複素数ベクトルの空間を $\boldsymbol{C}^n$ で表す.

8.1.2 内積

$\boldsymbol{C}^n$ の任意の二つのベクトル $\boldsymbol{z} = \begin{pmatrix} z_1 \\ z_2 \\ \vdots \\ z_n \end{pmatrix}$, $\boldsymbol{w} = \begin{pmatrix} w_1 \\ w_2 \\ \vdots \\ w_n \end{pmatrix}$, に対して,

$$\boxed{(\boldsymbol{z},\, \boldsymbol{w}) = z_1^* w_1 + z_2^* w_2 + \cdots z_n^* w_n} \tag{8.1.1}$$

をベクトル $\boldsymbol{z}$ と $\boldsymbol{w}$ の**内積**といい，左辺の記号で表す.

(注意 1) 内積は単なる複素数（スカラー）であって，もはやベクトルではない.

(注意 2) 実数ベクトルの内積の場合と異なり，成分どうしをかけあわせるときに一方が複素共役になる（物理では上のように，左側のベクトルの方の成分に対し複素共役をとるのが普通．数学の教科書では逆なので要注意）．こうしてはじめて，ベクトルの「長さ」を内積で表わすことができる (次の内積の性質 (iv) および Remark 1 を参照).

(注意 3) 内積の記号としてここでは，$(\boldsymbol{z},\, \boldsymbol{w})$ を使ったが，教科書によっては $\langle \boldsymbol{z},\, \boldsymbol{w} \rangle$ の記号もよく使われる.（しかし，$\boldsymbol{z} \cdot \boldsymbol{w}$ の記号はほとんど用いられない.）

(内積の性質)

(i) $\boxed{(\boldsymbol{z},\, \boldsymbol{w}) = (\boldsymbol{w},\, \boldsymbol{z})^*}$

(ii) $(\boldsymbol{z}_1 + \boldsymbol{z}_2,\, \boldsymbol{w}) = (\boldsymbol{z}_1,\, \boldsymbol{w}) + (\boldsymbol{z}_2,\, \boldsymbol{w})$,
$(\boldsymbol{z},\, \boldsymbol{w}_1 + \boldsymbol{w}_2) = (\boldsymbol{z},\, \boldsymbol{w}_1) + (\boldsymbol{z},\, \boldsymbol{w}_2)$.

(iii) $(\boldsymbol{z},\, \lambda\boldsymbol{w}) = \lambda(\boldsymbol{z},\, \boldsymbol{w})$,
$\boxed{(\lambda\boldsymbol{z},\, \boldsymbol{w}) = \lambda^*(\boldsymbol{z},\, \boldsymbol{w}).}$

(iv) $(\boldsymbol{z},\, \boldsymbol{z}) \geq 0$, 等号は $\boldsymbol{z} = 0$ (=ゼロベクトル) のときに限る.

(Remark 1) $\|\boldsymbol{z}\| = \sqrt{(\boldsymbol{z},\, \boldsymbol{z})}$ を $\boldsymbol{z}$ の***ノルム***（or 長さ）という．$\|\boldsymbol{z}\| = 0$ となるのは $\boldsymbol{z}$ がゼロベクトルのときに限る.

(Remark 2) $(\boldsymbol{z},\, \boldsymbol{w}) = 0$ のとき，$\boldsymbol{z}$ と $\boldsymbol{w}$ は**直交する**という.

(Remark 3) 性質 (i) や性質 (iii) の第二式があるため，内積を表わす記号として $\boldsymbol{z} \cdot \boldsymbol{w}$ を使うのはやめた方がよい．混乱のもとである．例えば，$i\boldsymbol{z} \cdot \boldsymbol{w}$ と書いたとき，それを $i(\boldsymbol{z},\, \boldsymbol{w})$ と思うか，$(i\boldsymbol{z},\, \boldsymbol{w})$ と考えるかで結果が違う.

(Remark 3) 性質 (ii),(iii) を別の言い方で言うと,
$(\boldsymbol{z},\, \boldsymbol{w})$ は $\boldsymbol{w}$ について線形 (linear)，$\boldsymbol{z}$ について反線形 (anti-linear) である.

8.1.3 エルミート共役，エルミート演算子

行列（一次変換）A が与えられたとき，任意のベクトル $\boldsymbol{z}$, $\boldsymbol{w}$ に対して，

$$\boxed{(\boldsymbol{z},\, A\boldsymbol{w}) = (A^\dagger \boldsymbol{z},\, \boldsymbol{w})} \tag{8.1.2}$$

が成り立つような行列 $A^\dagger$ が必ず存在する．$A^\dagger$ を行列 A のエルミート共役 (hermitian conjugate) という．あるいは $A^\dagger$ のことを A の随伴 (adjoint) 行列ともいう．両辺の複素共役をとることにより，上の式は

$$\boxed{(A\boldsymbol{w},\, \boldsymbol{z}) = (\boldsymbol{w},\, A^\dagger \boldsymbol{z})} \tag{8.1.3}$$

とも表される．(† はダガーとよむ．短剣 dagger の意.)

(憶えかた) 内積の一方から他方へ行列 (演算子) を移動したいときは，$\dot{\text{の}}\dot{\text{し}}$(= †) をつけて贈ろう．

(Remark) 内積を行列の記号を使って，

$$(\boldsymbol{z},\, \boldsymbol{w}) = (z_1^*\; z_2^*\; \cdots\; z_n^*) \begin{pmatrix} w_1 \\ w_2 \\ \vdots \\ w_n \end{pmatrix} = (\boldsymbol{z}^{\mathrm{T}})^* \boldsymbol{w} \tag{8.1.4}$$

と表すことができる．この表示を使えば

$$(\boldsymbol{z},\, A\boldsymbol{w}) = (\boldsymbol{z}^{\mathrm{T}})^* A\boldsymbol{w} = \left\{ \Big((A^{\mathrm{T}})^* \boldsymbol{z} \Big)^{\mathrm{T}} \right\}^* \boldsymbol{w} = \Big((A^{\mathrm{T}})^* \boldsymbol{z},\, \boldsymbol{w} \Big)$$

となるから，結局，行列のエルミート共役は転置行列と同時に複素共役をとったものになる：

$$\boxed{A^\dagger = (A^{\mathrm{T}})^*} \tag{8.1.5}$$

(定義) $\boxed{A = A^\dagger \text{ となる行列をエルミート行列という．}}$

エルミート行列のことを自己随伴行列 (self adjoint matrix) ともいう．

(エルミート共役，エルミート行列の性質)

(1) $(A^\dagger)^\dagger = A$,

(2) $(\alpha A + \beta B)^\dagger = \alpha^* A^\dagger + \beta^* B^\dagger$,

(3) $(AB)^\dagger = B^\dagger A^\dagger$,

(4) A がエルミート $\quad \Leftrightarrow \quad (\boldsymbol{z},\, A\boldsymbol{w}) = (A\boldsymbol{z},\, \boldsymbol{w})$, $\quad$ ($\boldsymbol{z}$, $\boldsymbol{w}$ は任意)

(5) $\boxed{A\text{がエルミート} \quad \Leftrightarrow \quad (\boldsymbol{z},\, A\boldsymbol{z}) = \text{実数}, \quad (\boldsymbol{z}\text{は任意})}$

(6) $A^\dagger A$ はエルミートで，　$(\boldsymbol{z},\, A^\dagger A\boldsymbol{z}) \geq 0.$　($\boldsymbol{z}$ は任意；等号は $A\boldsymbol{z} = 0$ のときに限る)

これらの性質から次の対応関係があることがわかる.

行列	エルミート共役	エルミート行列	$(\boldsymbol{z},\, A^\dagger A\boldsymbol{z}) \geq 0$
複素数	複素共役	実数	$\lambda^*\lambda \geq 0$

上の性質を (8.1.2) または (8.1.3) 式の定義に基づいて証明するには，例えば次の様にする：

(証明)

(1) $\boldsymbol{z}$, $\boldsymbol{w}$ を任意のベクトルとすると，

$$(\boldsymbol{z},\, A\boldsymbol{w}) = (A^\dagger\boldsymbol{z},\, \boldsymbol{w}) = (\boldsymbol{z},\, (A^\dagger)^\dagger\, \boldsymbol{w}).$$

ただし，一番目の等式では (8.1.2) 式を，二番目の等式では (8.1.3) 式を使った. $\underline{\boldsymbol{z},\ \boldsymbol{w}\ \text{は任意であったから}}$，$(A^\dagger)^\dagger = A$ が成り立つ.

(2) $\boldsymbol{z}$, $\boldsymbol{w}$ を任意のベクトルとすると，

$$\begin{aligned}
(\boldsymbol{z},\, (\alpha A + \beta B)^\dagger\boldsymbol{w}) &= ((\alpha A + \beta B)\boldsymbol{z},\, \boldsymbol{w}) \\
&= (\alpha A\boldsymbol{z} + \beta B\boldsymbol{z},\, \boldsymbol{w}) \\
&= \alpha^*(A\boldsymbol{z},\, \boldsymbol{w}) + \beta^*(B\boldsymbol{z},\, \boldsymbol{w}) \\
&= \alpha^*(\boldsymbol{z},\, A^\dagger\boldsymbol{w}) + \beta^*(\boldsymbol{z},\, B^\dagger\boldsymbol{w}) \\
&= (\boldsymbol{z},\, \alpha^* A^\dagger\boldsymbol{w}) + (\boldsymbol{z},\, \beta^* B^\dagger\boldsymbol{w}) \\
&= (\boldsymbol{z},\, (\alpha^* A^\dagger + \beta^* B^\dagger)\boldsymbol{w}).
\end{aligned}$$

$\underline{\boldsymbol{z},\ \boldsymbol{w}\ \text{は任意であったから}}$，$(\alpha A + \beta B)^\dagger = \alpha^* A^\dagger + \beta^* B^\dagger$ が成り立つ.

(3) (8.1.3) 式を連続して使うと，

$$(\boldsymbol{z},\, (AB)^\dagger\, \boldsymbol{w}) = (AB\boldsymbol{z},\, \boldsymbol{w}) = (B\boldsymbol{z},\, A^\dagger\, \boldsymbol{w}) = (\boldsymbol{z},\, B^\dagger A^\dagger\, \boldsymbol{w}).$$

$\underline{\text{任意のベクトル}\ \boldsymbol{z},\ \boldsymbol{w}\ \text{に対してこれが成り立つので}}$，$(AB)^\dagger = B^\dagger A^\dagger$ が成り立つ.

(4) 定義そのもの.

(5) (⇒ の証明)
A がエルミート，すなわち，$A^\dagger = A$ とすると，

$$(\boldsymbol{z},\, A\boldsymbol{z}) = (A^\dagger\, \boldsymbol{z}, \boldsymbol{z}) = (A\boldsymbol{z},\, \boldsymbol{z}) = (\boldsymbol{z},\, A\boldsymbol{z})^* = 実数.$$

(⇐ の証明)
逆に，任意のベクトル $\boldsymbol{z}$ に対して

$$(\boldsymbol{z},\, A\boldsymbol{z}) = (\boldsymbol{z},\, A\boldsymbol{z})^* \ (= 実数).$$

が成り立つと仮定する．任意のベクトル $\boldsymbol{u}$, $\boldsymbol{v}$ を選んで，$\boldsymbol{z} = \boldsymbol{u} + \boldsymbol{v}$ としても上の式が成り立つはずであるので，上に代入すると，

$$(\boldsymbol{u},\, A\boldsymbol{u})+(\boldsymbol{u},\, A\boldsymbol{v})+(\boldsymbol{v},\, A\boldsymbol{u})+(\boldsymbol{v},\, A\boldsymbol{v}) = (\boldsymbol{u},\, A\boldsymbol{u})^*+(\boldsymbol{u},\, A\boldsymbol{v})^*+(\boldsymbol{v},\, A\boldsymbol{u})^*+(\boldsymbol{v},\, A\boldsymbol{v})^*.$$

$\boldsymbol{z} = \boldsymbol{u}$, $\boldsymbol{z} = \boldsymbol{v}$ としても成り立つので，上の式から，

$$(\boldsymbol{u},\, A\boldsymbol{v}) + (\boldsymbol{v},\, A\boldsymbol{u}) = (A\boldsymbol{u},\, \boldsymbol{v}) + (A\boldsymbol{v},\, \boldsymbol{u})$$

が導かれる．ただし，$(\boldsymbol{v}, A\boldsymbol{u})^* = (A\boldsymbol{u}, \boldsymbol{v})$ などを用いた．次に，$\boldsymbol{z} = \boldsymbol{u} + i\boldsymbol{v}$ として同様なことを行なえば，内積の性質 (iii) に注意すると，

$$(\boldsymbol{u},\, A\boldsymbol{v}) - (\boldsymbol{v},\, A\boldsymbol{u}) = (A\boldsymbol{u},\, \boldsymbol{v}) - (A\boldsymbol{v},\, \boldsymbol{u})$$

が得られる．二つの結果を合わせると結局，

$$(\boldsymbol{u},\, A\boldsymbol{v}) = (A\boldsymbol{u},\, \boldsymbol{v})$$

が任意のベクトル $\boldsymbol{u}, \boldsymbol{v}$ に対して成り立つことになる．したがって，(4) の結果より，A はエルミートである．

(6) (2) と (1) を使えば，

$$(A^\dagger A)^\dagger = A^\dagger (A^\dagger)^\dagger = A^\dagger A$$

となるので，どんな行列 A に対しても $A^\dagger A$ はエルミートである．次に，$\boldsymbol{z}$ を任意のベクトルとして，

$$(\boldsymbol{z},\, A^\dagger A\boldsymbol{z}) = (\boldsymbol{z},\, A^\dagger(A\boldsymbol{z})) = (A\boldsymbol{z},\, A\boldsymbol{z}) = \|A\boldsymbol{z}\|^2 \geq 0.$$

またこれから，等号が成り立つのは $\boldsymbol{z}$ が $A\boldsymbol{z} = 0$ を満たすときに限ることもわかる．

8.1.4 エルミート行列の固有値・固有ベクトル

(エルミート行列の固有値・固有ベクトルの性質)
A をエルミート行列とするとき,

(1) $\boxed{\text{エルミート行列の固有値は実数である.}}$

(2) $A\boldsymbol{z} = \lambda\boldsymbol{z},\ A\boldsymbol{z}' = \lambda',\ \lambda \neq \lambda' \ \Rightarrow\ (\boldsymbol{z},\ \boldsymbol{z}') = 0.$
すなわち, $\boxed{\text{異なる固有値に属する固有ベクトルは直交する.}}$

(3) $n \times n$ エルミート行列は n 個の 1 次独立な固有ベクトルを持つ. すなわち, 任意のベクトルを固有ベクトルで展開できる（これを固有ベクトルは**完全系**をなすという）.

(証明)

(1) λ をエルミート行列 A の固有値とし, 対応する固有ベクトルを $\boldsymbol{z}\,(\neq 0)$ とする. すなわち, $A\boldsymbol{z} = \lambda\boldsymbol{z}$ が成り立つ. エルミート行列の性質 (5) より, $(\boldsymbol{z}, A\boldsymbol{z})$ は実数であるから,

$$\text{実数} = (\boldsymbol{z}, A\boldsymbol{z}) = (\boldsymbol{z}, \lambda\boldsymbol{z}) = \lambda(\boldsymbol{z}, \boldsymbol{z}) = \lambda\|\boldsymbol{z}\|^2.$$

これより, λ は実数である（$\|\boldsymbol{z}\| \neq 0$ に注意）.

(2) A がエルミートであることから成り立つ次の式に注目する：

$$(\boldsymbol{z}, A\boldsymbol{z}') = (A\boldsymbol{z}, \boldsymbol{z}').$$

ここで, 両辺をそれぞれ計算すると,

$$\begin{aligned}
\text{左辺} &= (\boldsymbol{z}, \lambda'\boldsymbol{z}') = \lambda'(\boldsymbol{z}, \boldsymbol{z}'), \\
\text{右辺} &= (\lambda\boldsymbol{z}, \boldsymbol{z}') = \lambda^*(\boldsymbol{z}, \boldsymbol{z}') = \lambda(\boldsymbol{z}, \boldsymbol{z}'). \qquad (\lambda\text{は実数より})
\end{aligned}$$

これらが等しいのであるから, 移項して整理すれば,

$$(\lambda - \lambda')(\boldsymbol{z}, \boldsymbol{z}') = 0.$$

$\lambda \neq \lambda'$ より,

$$(\boldsymbol{z}, \boldsymbol{z}') = 0.$$

(3) 固有値を決定する方程式は,

$$\det|A - \lambda\mathbf{1}| = 0.$$

であることを思い出そう. ここで, 行列式の中の $\mathbf{1}$ は単位行列である. この式は n 次方程式であり解は重複度を含めて n 個ある.

(重解が一組もない場合．) n 個の異なる固有値があることになり，それに対応する n 個の固有ベクトルがある．これらのベクトルは互いに直交するのであるから１次独立である．

(重解がある場合．) λ を固有値方程式の r 重解とすれば，固有値 λ に属する互いに１次独立な r 個の固有ベクトルがあることがわかる.（たとえば，A の各成分を適当に微少変形して A' という行列を考える．そうすれば，r 重解 λ は値が微少にずれて r 個に分裂するはずである．この r 個の解に対応して互いに直交する r 個の固有ベクトルがあるはず．そこで，行列をもとにする $A' \to A$ の極限をとれば，r 個の固有値はすべて λ に収束するが，固有ベクトルは互いに直交したままなので r 個の１次独立なベクトルに収束する.）固有値は重複度を含めると n 個あるのだから，１次独立な固有ベクトルも結局はトータルで n 個あることになる．

(Remark 1) (3) において，重解がある場合も１次独立な n 個の固有ベクトルはすべて互いに直交するように選ぶことができる．これは，(3) の証明で述べたような $A' \to A$ のやり方で固有ベクトルを求めたやり方があることからもわかるだろう．

(Remark 2) 量子力学におけるエルミート演算子に対しても (1), (2) は全く同じように成り立つ．

(Remark 3) (3) は無限次元のベクトル空間では必ずしも成り立たない．量子力学では無限次元のベクトル空間上のエルミート演算子を考えるが，勝手なエルミート演算子に対しては，その固有ベクトルが完全系を成すとはいえない．しかし，物理量を表す演算子の固有関数（固有ベクトル）は物理的に重要な状態を表す．測定をすることによって状態は固有関数のどれかに変化するはずである．特定の状態へ変化する確率振幅はもとの波動関数を固有関数で展開したときの展開係数である．これはつまり，どんな状態も考えている物理量の固有関数で展開できなければならないことを意味する．したがって，量子力学では次のことが仮定される：物理量を表す演算子は上の (3) を満たす（i.e. 固有ベクトルが完全系をなす）エルミート演算子である．

このことから (3) を満たすエルミート演算子は重要なので，**オブザーバブル** (Observable) という名前が付いている．この言葉を使えば，
「物理量を表す演算子はオブザーバブルである.」

8.2 数学的枠組み

量子力学の数学的枠組みは線形代数そのものです．

8.2.1 ヒルベルト空間におけるベクトル・演算子・内積・基底

- **状態を表すものはベクトル**

重ね合わせの原理： ψ_1, ψ_2 を二つの状態を表す波動関数のとき，$c_1\psi_1 + c_2\psi_2$ (c_1, c_2: 複素定数) もまた c_1, c_2 の取り方に応じて別の状態を表す.
$\Rightarrow$ 波動関数 ψ_1, ψ_2 はベクトル．c_1, c_2 はスカラー.

(Remark) 関数＝無限次元ベクトルであること.

$\psi(x)$, $\phi(x)$ を $[0,1]$ 上の連続関数（複素数値）とする.
$[0,1]$ 区間を N 等分し，N 個の点 ($x_1 = 1/N$, $x_2 = 2/N$, , , $x_N = 1$) の値によって ψ, ϕ を近似する.

$$\psi \sim \boldsymbol{z} = \begin{pmatrix} \psi(x_1) \\ \psi(x_2) \\ \vdots \\ \psi(x_N) \end{pmatrix}, \ \phi \sim \boldsymbol{w} = \begin{pmatrix} \phi(x_1) \\ \phi(x_2) \\ \vdots \\ \phi(x_N) \end{pmatrix}.$$

$N \to \infty$ とすることによって関数 $\psi(x)$, $\phi(x)$ が再現される．$\boldsymbol{z}$, $\boldsymbol{w}$ はともに N 次元の数ベクトルである．したがって，関数 $\psi(x)$, $\phi(x)$ は無限次元のベクトルと考えられる.

上のように考えれば関数の内積も無限次元ベクトル空間の内積として自然に導入される．極限をとる前でかんがえれば，

$$(\boldsymbol{z}, \boldsymbol{w}) = \sum_{n=1}^{N} z_n^* w_n = \sum_{n=1}^{N} \psi^*(x_n)\phi(x_n).$$

$N \to \infty$ とすると右辺はほぼ N に比例して大きくなる．そこで

$$(\psi, \phi) \equiv \lim_{N\to\infty} \frac{1}{N}(\boldsymbol{z}, \boldsymbol{w}) = \lim_{N\to\infty} \sum_{n=1}^{N} \psi^*(x_n)\phi(x_n) \cdot \frac{1}{N}$$

とおくと，$1/N = x_{n+1} - x_n = \Delta x$ より，

$$(\psi, \phi) = \int_0^1 \psi^*(x)\phi(x)\,dx.$$

上では簡単のため関数の定義域を $[0,1]$ 区間としたが，$(-\infty, \infty) = \boldsymbol{R}$ 上の連続関数 $\psi(x)$, $\phi(x)$ に対しても無限遠で十分速く $|\psi| \to 0$, $|\phi| \to 0$ となるならば，

$$(\psi, \phi) = \int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(x)\phi(x)\,dx.$$

によって内積が定義される．この意味で，波動関数の規格化というのはベクトルを単位ベクトルに規格化することである.

規格化： $(\psi, \psi) = 1.$

内積の定義された無限次元のベクトル空間は**ヒルベルト空間**と呼ばれる.

- **物理量は 1 次演算子**

  $\hat{A}$ を物理量を表す演算子とし，ψ をある状態を表すベクトル (=波動関数) とすると，$\psi' = \hat{A}\psi$ は一般には ψ と異なった状態に対応するベクトルとなる．

  特に ψ が $\hat{A}$ の固有ベクトルのときは，固有値を a とすれば，$\hat{A}\psi = a\psi$ が成り立つ．（このときは $\psi' = a\psi$ で同じ状態を表す．）固有値 a は測定値に対応することを思い出すとすべての固有値は実数でなければならないことがわかる．したがって，

  $$\boxed{\text{物理量を表す演算子はエルミートである．}}$$

- **確率振幅は内積**

  状態が ψ で表されるとき，何らかの物理量を測定して状態 ϕ を得る確率は

  $$\left| \int_{-\infty}^{\infty} \phi^*(x)\psi(x)\, dx \right|^2$$

  であった．絶対値の二乗をとる前の振幅はベクトル (=波動関数) の内積に他ならない．つまり，

  $$\boxed{\text{状態 } \psi \text{ にあるとき実験をした結果，状態が } \phi \text{ となる確率振幅} = (\phi, \psi)} \tag{8.2.1}$$

  ψ, ϕ が規格化されていないときは上の確率振幅はつぎのように表される．

  $$\text{確率振幅} = \frac{(\phi, \psi)}{\sqrt{(\phi, \phi)}\sqrt{(\psi, \psi)}} = \frac{(\phi, \psi)}{\|\phi\|\,\|\psi\|} \tag{8.2.2}$$

- **期待値も内積で表わす：**

  A を物理量を表わすエルミート演算子とする．状態 ψ における A の期待値も内積をつかうと次のようにコンパクトに表わすことができる．

  $$\langle \hat{A} \rangle = (\psi, \hat{A}\psi). \tag{8.2.3}$$

  A がエルミートなので，この期待値は必ず実数になることに注意しよう．もちろん上は状態ベクトル ψ が規格化されている場合の式であり，規格化されていない場合は次のようになる：

  $$\langle \hat{A} \rangle = \frac{(\psi, \hat{A}\psi)}{(\psi, \psi)}. \tag{8.2.4}$$

- **測定値は固有値，測定後の状態は固有ベクトル**

  $\hat{A}$ の測定では必ず $\hat{A}$ の固有値のどれかが得られる．測定値 a を得たとしたら，その測定直後の系の状態は固有値 a に属する固有ベクトルで与えられる．

- **固有関数系は基底ベクトル**

$\hat{A}$ を物理量を表わすエルミート演算子とし，a_n をその固有値, φ_n を対応する固有関数 (＝固有ベクトル) とする ($n = 1, 2, 3, \cdots$):

$$\hat{A}\,\varphi_n = a_n\varphi_n. \qquad (n = 1, 2, 3, \cdots) \tag{8.2.5}$$

エルミート演算子の異なる固有値に属する固有ベクトルは互いに直交するので,

$$(\varphi_n,\, \varphi_m) = 0, \qquad (n \neq m) \tag{8.2.6}$$

が成り立つ．(固有値が縮退している場合, i.e. $a_n = a_m \ \ (n \neq m)$ なる固有値の組がある場合でも，固有ベクトルをうまく選べばこうすることができる.）また，固有ベクトルの定数倍はやはり同じ固有値に属する固有ベクトルであるから，各 φ_n は規格化されているものとしてよい：

$$(\varphi_n,\, \varphi_n) = 1. \tag{8.2.7}$$

クロネッカーのデルタを使うとこれらの式は次のようにまとめることができる：

$$(\varphi_n,\, \varphi_m) = \delta_{nm}. \tag{8.2.8}$$

さて，状態ベクトル ψ が上の固有ベクトル系 $\{\varphi_n\}$ で

$$\psi = c_1\varphi_1 + c_2\varphi_2 + c_3\varphi_3 + \cdots = \sum_{n=1}^{\infty} c_n\varphi_n, \tag{8.2.9}$$

と展開することができたとしよう．ψ も規格化されているものとする．状態が ψ のもとで $\hat{A}$ の測定をしたとき，測定値は固有値 a_n のどれかになる．測定値 a_m を得る確率は

$$|(\varphi_m,\, \psi)|^2 \tag{8.2.10}$$

で与えられる．絶対値の 2 乗をとる前の量が確率振幅であった．上の展開式を使うと確率振幅は次のように求まる．

$$\begin{aligned}
(\varphi_m,\, \psi) &= (\varphi_m,\, \sum_{n=1}^{\infty} c_n\varphi_n) \\
&= \sum_{n=1}^{\infty} c_n(\varphi_m,\, \varphi_n) \\
&= \sum_{n=1}^{\infty} c_n\delta_{mn} \\
&= c_m
\end{aligned} \tag{8.2.11}$$

したがって，確率振幅というのは，固有ベクトルで展開したときの成分である．

エルミート演算子 $\hat{A}$ が物理量を表わすためには, 上のようなことがどんな状態ベクトル ψ に対してもいえなければならない．つまり，任意の状態ベクトルを $\hat{A}$ の固有ベクトル系で展開できなければならない (有限次元のエルミート行列のときは必ず成り立つ性質；無限次元ではこの性質を満たさないエルミート演算子も有り得る)．すなわち，$\hat{A}$ の固有ベクトル系は**完全系** (＝ヒルベルト空間の基底) を成さなければならない．このような性質を持つエルミート演算子を**オブザーバブル** (Observable) という.

物理量を表わす演算子はオブザーバブルである.

すなわち,

物理量を表わす演算子の固有ベクトル系は完全系を成す.

これまでに出てきたハミルトニアンや運動量演算子などはすべてオブザーバブルであることが示せる.
(注意) 物理量に応じて完全系が決まる．状況に応じて便利な完全系＝基底を使えばよい（状況に応じて，デカルト座標が便利だったり，極座標が便利だったりするのと同じ.）

以上のように，量子力学は内積の定義された無限次元のベクトル空間 (ヒルベルト空間) の理論である．状態はヒルベルト空間のベクトルによって表される．物理量はヒルベルト空間上で働く１次演算子である．確率振幅や期待値は内積を使って表される．測定値は考えている物理量に対応する演算子の固有値である．対応する固有ベクトルも測定において重要な役割を演じる.

8.2.2 物理量を表す演算子の例

- **位置の演算子** $\hat{x} = x$
  ＜エルミートであること＞

$$(\psi, \hat{x}\phi) = \int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(x) \cdot x\phi(x)\, dx = \int_{-\infty}^{\infty} \{x\psi(x)\}^* \cdot \phi(x)\, dx = (\hat{x}\psi, \phi). \tag{8.2.12}$$

＜参考：$\hat{x}$ の固有関数系＞
固有値を a (a は任意の実数) とし，対応する固有関数を $\varphi_a(x)$ とすると,

$$x\,\varphi_a(x) = a\,\varphi_a(x) \tag{8.2.13}$$

が成り立つはずである．このような関数はデルタ関数, $\varphi_a(x) = \delta(x-a)$ である：

$$x\,\delta(x-a) = a\,\delta(x-a). \tag{8.2.14}$$

任意の波動関数 , $\psi(x)$ はこの位置の固有関数で次のように展開できる.

$$\psi(x) = \int_{-\infty}^{\infty} \psi(a)\delta(x-a)\,da. \tag{8.2.15}$$

今の場合，固有値が連続的に分布 (連続スペクトル) しているため，足し算が固有値に関する積分になっている．また，ここでは $\psi(a)$ が展開係数であることに注意しよう．結局位置の演算子の固有関数系は完全系を成すことがわかった.

以上より位置の演算子はオブザーバブルであることがわかる.

3 次元空間の位置の演算子 $\boldsymbol{r} = (\hat{x}, \hat{y}, \hat{z})$ も同様.

x の実関数 $f(x)$ に対応する演算子 $f(\hat{x})$ （$f(\hat{x})\,\psi(x) = f(x)\,\psi(x)$）も同様にオブザーバブルである．例えば,

$$(\hat{x}^2)^\dagger = (\hat{x}^\dagger)^2 = \hat{x}^2$$

であるので， $\hat{x}^2$ はエルミートであり，固有関数系は $\hat{x}$ と共通にとれるので完全系をなす.

- **運動量演算子** $\hat{p} = (\hbar/i)\partial/\partial x$

＜エルミートであること＞

無限遠で $\psi(x)$, $\phi(x)$ が十分速くゼロになることに注意して部分積分を行うと,

$$\begin{aligned}(\psi, \hat{p}\phi) &= \int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(x)\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x}\phi(x)\,dx \\ &= -\int_{-\infty}^{\infty} \frac{\partial}{\partial x}\psi^*(x)\frac{\hbar}{i}\phi(x)\,dx \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} \left(\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x}\psi(x)\right)^* \phi(x)\,dx \\ &= (\hat{p}\psi, \phi).\end{aligned} \tag{8.2.16}$$

＜参考：$\hat{p}$ の固有関数系＞

固有値を q (q は任意の実数) とし，対応する固有関数を $\phi_q(x)$ とすると,

$$\hat{p}\,\phi_q(x) = \frac{\hbar}{i}\frac{\partial \phi_q(x)}{\partial x} = q\,\phi_q(x) \tag{8.2.17}$$

が成り立つはずである．このような関数指数関数, $\phi_q(x) = \exp(iqx/\hbar)$ である：

$$\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x}e^{iqx/\hbar} = q\,e^{iqx/\hbar}. \tag{8.2.18}$$

Fourier 変換の知識を使えば，任意の波動関数 , $\psi(x)$ はこの運動量の固有関数で次のように展開できる：

$$\psi(x) = \int_{-\infty}^{\infty} \tilde{\psi}(a)e^{iqx/\hbar}\,dq. \tag{8.2.19}$$

位置演算子の場合と同様，固有値が連続的に分布 (連続スペクトル) しているため，足し算が固有値に関する積分になっている．また，展開係数 $\tilde{\psi}(q)$ は波動関数 $\psi(x)$ の Fourier 変換 (の定数倍) であることに注意しよう．あるいは，運動量表示の波動関数といってもよいものである．結局運動量の演算子の固有関数系は完全系を成すことがわかった．

以上より，運動量演算子はオブザーバブルである．

3 次元空間の運動量演算子 $\boldsymbol{p} = (\hat{p}_x, \hat{p}_y, \hat{p}_z)$ も同様.

p の実関数 $f(p)$ に対応する演算子 $f(\hat{p})$ $(f(\hat{p})\,\psi(x)$
$= f((\hbar/i)\partial/\partial x)\,\psi(x))$ も同様にオブザーバブルである．例えば,

$$(\hat{p}^2)^\dagger = (\hat{p}^\dagger)^2 = \hat{p}^2$$

であるので，$\hat{p}^2$ はエルミートであり，固有関数系は $\hat{p}$ と共通にとれるので完全系をなす.

- **ハミルトニアン**

＜エルミートであること＞

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + V(\hat{x}) \tag{8.2.20}$$

のとき，各項はエルミートであるから，その和もエルミートである.

- **角運動量演算子 $\hat{\boldsymbol{L}} = \hat{\boldsymbol{r}} \times \hat{\boldsymbol{p}}$**

＜エルミートであること＞

角運動量演算子 $\hat{\boldsymbol{L}} = (\hat{L}_x, \hat{L}_y, \hat{L}_z)$ は次で定義される：

$$\hat{\boldsymbol{L}} = \hat{\boldsymbol{r}} \times \hat{\boldsymbol{p}}, \tag{8.2.21}$$

すなわち，例えば,

$$\hat{L}_x = \hat{y}\hat{p}_z - \hat{z}\hat{p}_y. \tag{8.2.22}$$

である．$\hat{\boldsymbol{r}}$ や $\hat{\boldsymbol{p}}$ がエルミートであることに注意して，上のエルミート共役をとれば,

$$\hat{L}_x^\dagger = \hat{p}_z\hat{y} - \hat{p}_y\hat{z} = \hat{y}\hat{p}_z - \hat{z}\hat{p}_y. = \hat{L}_x. \tag{8.2.23}$$

ただしここで，$[\hat{y}, \hat{p}_z] = [\hat{z}, \hat{p}_y] = 0$, すなわち, 異なる方向の成分では運動量演算子と位置演算子は交換することを用いた.

8.2.3 ハミルトニアンのエルミート性と確率の保存

ハミルトニアンのエルミート性は確率の保存と密接な関係にある.

時刻 t での波動関数 $\psi(x,y,z,t)$ を簡単のため位置座標を省略して $\psi(t)$ と表わすことにしよう. $\psi(t)$ の時間依存性はハミルトニアン $\hat{H}$ を使って, シュレーディンガー方程式

$$i\hbar\frac{\partial\psi(t)}{\partial t} = \hat{H}\,\psi(t) \tag{8.2.24}$$

によって与えられる. 時刻 t での確率密度は $|\psi(t)|^2 = \psi^*(t)\,\psi(t)$ であり, 全確率は

$$P(t) = \int_{\text{全空間}} \psi^*(t)\,\psi(t)\,dxdydz = (\psi(t),\,\psi(t)) \tag{8.2.25}$$

と, 内積を使って表わされる. これより, 全確率の時間変化は,

$$\begin{aligned} \frac{dP(t)}{dt} &= \left(\psi(t),\,\frac{\partial\psi(t)}{\partial t}\right) + \left(\frac{\partial\psi(t)}{\partial t},\,\psi(t)\right) \\ &= \left(\psi(t),\,\frac{1}{i\hbar}\hat{H}\psi(t)\right) + \left(\frac{1}{i\hbar}\hat{H}\psi(t),\,\psi(t)\right) \\ &= \frac{1}{i\hbar}\left\{\left(\psi(t),\,\hat{H}\psi(t)\right) - \left(\hat{H}\psi(t),\,\psi(t)\right)\right\} \\ &= 0. \end{aligned} \tag{8.2.26}$$

となる. ただし, 最後の等式では $\hat{H}$ がエルミートであることを使った.

以上より次のことが結論される：

$$\boxed{\text{ハミルトニアンがエルミート} \quad \Longleftrightarrow \quad \text{確率保存}}$$

＊）入射ビームの一部が散乱体に吸収されてしまうような散乱 (非弾性散乱) の問題では確率が保存しないものとして取り扱う場合がある. このような場合はエルミートでないハミルトニアンを使う.

8.3 同時測定可能性

8.3.1 不確定性関係

＜測定誤差＞

$\hat{A}$ を物理量を表わす演算子とする. 状態 ψ のもとで $\hat{A}$ の測定を行なう. このような測定を多数回おこなったときの平均値は次の期待値 $\langle\hat{A}\rangle$ で与えられる.

$$\langle\hat{A}\rangle = (\psi,\,\hat{A}\,\psi). \tag{8.3.1}$$

測定を多数回おこなうと，測定値はこの期待値を中心にしてばらつく．この平均値からの統計的なばらつき具合 ΔA は

$$\Delta A \equiv \sqrt{\langle(\hat{A}-\langle\hat{A}\rangle)^2\rangle} \tag{8.3.2}$$

で与えられる．これを測定誤差の目安とするのが自然である．この ΔA は自然法則が量子力学にしたがうために生ずる本質的な測定誤差であり，測定技術が限りなく進歩したとしても減らすことのできないものである．

∗} $\langle\hat{A}-\langle\hat{A}\rangle\rangle$ ではゼロになってしまって，平均値からのズレの目安にはならない．

＜不確定性関係の厳密な導出＞

測定誤差を明確に定義できたので不確定性関係も定量的に議論できるようになる．

$\hat{X}$ を任意の演算子とする．$\hat{X}^\dagger\hat{X}$ はエルミート演算子であり，その期待値は，

$$\langle\hat{X}^\dagger\hat{X}\rangle = (\psi,\, \hat{X}^\dagger\hat{X}\,\psi) = (\hat{X}\,\psi,\, \hat{X}\,\psi) = \|\hat{X}\,\psi\|^2 \geq 0, \tag{8.3.3}$$

であり，必ずゼロ以上となる．特にゼロとなるのは，$\hat{X}\psi=0$ のときに限る．さて，$\hat{U}$, $\hat{V}$ をオブザーバブルとして，$\hat{X}=\hat{U}+i\lambda\hat{V}$, $\hat{X}^\dagger=\hat{U}-i\lambda\hat{V}$ (λ は任意の実数) とおけば (8.3.3) より，

$$0 \leq \langle\hat{X}^\dagger\hat{X}\rangle = \langle\hat{U}^2\rangle + i\lambda\langle[\hat{U},\, \hat{V}]\rangle + \lambda^2\langle\hat{V}^2\rangle \equiv f(\lambda). \tag{8.3.4}$$

特に，$f(\lambda)$ を最小にする λ の値 $\lambda_{\min}$ においても (8.3.4) 式は成り立つ．

$$f(\lambda_{\min}) = \langle\hat{U}^2\rangle + \frac{\langle[\hat{U},\, \hat{V}]\rangle^2}{4\langle\hat{V}^2\rangle} \geq 0, \tag{8.3.5}$$

であるので，

$$\langle\hat{U}^2\rangle\langle\hat{V}^2\rangle \geq -\frac{1}{4}\langle[\hat{U},\, \hat{V}]\rangle^2, \tag{8.3.6}$$

が成り立つ．

∗）$\hat{U}$, $\hat{V}$ がエルミートなので，$\langle[\hat{U},\, \hat{V}]\rangle =$ 純虚数 である．したがって上の右辺は必ずゼロ以上である．

$\hat{A}$, $\hat{B}$ をオブザーバブルとする．$\hat{U}=\hat{A}-\langle\hat{A}\rangle$, $\hat{V}=\hat{B}-\langle\hat{B}\rangle$ として上の不等式を使う．$[\hat{U},\, \hat{V}]=[\hat{A},\, \hat{B}]$, $\langle\hat{U}^2\rangle=(\Delta A)^2$ などに注意すると，

$$(\Delta A)^2\cdot(\Delta B)^2 \geq \frac{1}{2}\left|\,\langle[\hat{A},\, \hat{B}]\rangle\right|^2,$$

となる．したがって，

$$\boxed{\Delta A\cdot\Delta B \geq \frac{1}{2}\,|\,\langle[\hat{A},\, \hat{B}]\rangle|.} \tag{8.3.7}$$

例えば，位置と運動量の演算子は，

$$[\hat{p}_x,\, \hat{x}] = -i\hbar$$

を満たすので $|\langle[\hat{p}_x,\,\hat{x}]\rangle| = \hbar$. したがって,

$$\boxed{\Delta p_x \cdot \Delta x \geq \frac{\hbar}{2}.} \tag{8.3.8}$$

が成り立つ.

(8.3.7) から次のことがわかる：

$$\boxed{[\hat{A},\,\hat{B}] \neq 0 \text{ ならば同時測定ができない.}}$$

8.3.2 同時測定可能性

上とは逆に $[A, B] = 0$ ならば同時測定が可能であることが示せる．すなわち,

$$\boxed{\text{互いに交換可能な (可換な) 物理量は同時測定可能である.}}$$

これは，$[A, B] = 0$ ならば A, B は同時固有関数系を持つという事実を使って示される（教科書第 9 章参照）．実際 A, B の同時固有関数系があったとすれば，それを $\{\phi_n\}$ として,

$$A\phi_n = a_n\phi_n, \quad B\phi_n = b_n\phi_n. \quad (a_n,\, b_n \text{は } A,\, B \text{ の固有値})$$

とおく．任意の状態 ψ で A, B の測定を行うと，ψ は ϕ_n で展開できるから,

$$\psi = c_1\phi_1 + c_2\phi_2 + \cdots \quad \xrightarrow{A\ (B)\ \text{の測定}} \quad \text{どれかの } \phi_k \xrightarrow{B\ (A)\ \text{の測定}} \quad \phi_k$$

のようになって，A, B の測定操作は互いに邪魔しあわない.（このときの測定値は $A = a_k$, $B = b_k$ である.）まとめると,

$$\boxed{[A, B] = 0 \quad \Leftrightarrow \quad \text{同時固有関数系をもつ} \quad \Leftrightarrow \quad \text{同時測定可能.}}$$

8.3.3 可換な物理量の完全な組

- **縮退**

  一つの固有値に対応する (1 次独立な) 子優状態が二つ以上ある時その固有値は**縮退**しているという．($\hat{A}\phi_1 = a\phi_1,\ \hat{A}\phi_2 = a\phi_2$.)

- **状態の指定**

  オブザーバブル $\hat{A}$ のすべての固有値に縮退がなければ，$\hat{A}$ の測定をすることによって状態を完全に決定できる．例えば，測定値が a_3 ならば状態は ϕ_3 で与えられる.

  縮退があるときには，$\hat{A}$ の測定だけでは状態を決定できない．このときは，$\hat{A}$ と同時に測定できるいくつかの適当なオブザーバブル $\hat{B}, \hat{C}, \cdots$ の測定も同時に行なう

ことによって状態を完全に決めることができる．例えば，水素原子の場合は，エネルギー (主量子数 n) だけでは状態が決まらず，角運動量の大きさ (方位量子数 l) と角運動量の z 成分 (磁気量子数 m) も必要である．自由粒子の場合なら，一つの運動量成分 $\hat{p}_x$ だけでは状態は完全に決まらず，同時測定可能なオブザーバブル $\hat{p}_x, \hat{p}_y, \hat{p}_z$ の 3 つが必要である.（もちろん同時に位置までは決められない.）

このように，同時測定によって状態を完全に決定できるようなオブザーバブルの組のことを**可換なオブザーバブルの完全な組**という.