Q and A

- 物理量の期待値 (20) が複素数になることはないでしょうか？

  式 (16) より 2 つの異なるベクトルの内積は一般に複素数で、期待値は $\langle a|$ と $\hat{A}|a\rangle$ という異なるベクトルの内積なので、複素数になっても良さそうな気がしますが、たとえば位置座標の期待値が $\langle x\rangle = (1+3i)\mathrm{nm}$ のように複素数になるのは気持ち悪いです。しかし、実際には以下で説明するように**物理量に対応する演算子の期待値は実数**になります。

  物理量に対応する演算子は、自由に選んで良いのではなく、**エルミート演算子**である必要があります。演算子 $\hat{A}$ の**エルミート共役演算子** $\hat{A}^\dagger$ を

  $$\langle a|\hat{A}|b\rangle = \langle b|\hat{A}^\dagger|a\rangle^*$$

  を満たすものとして定義します。ここで $|a\rangle, |b\rangle$ は（ヒルベルト空間の）任意のベクトルです。有限次元の行列の場合は、

  $$\hat{A}^\dagger = \hat{A}^{T*}$$

  と転置複素共役（行列のエルミート共役）と一致します。実際に 2 成分複素ベクトルの場合、

  $$\begin{aligned}\langle a|\hat{A}|b\rangle &= \begin{pmatrix} a_1^* & a_2^* \end{pmatrix}\begin{pmatrix} A_{11} & A_{12} \\ A_{21} & A_{22} \end{pmatrix}\begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} a_1^* & a_2^* \end{pmatrix}\begin{pmatrix} A_{11}b_1 + A_{12}b_2 \\ A_{21}b_1 + A_{22}b_2 \end{pmatrix} \\ &= a_1^*A_{11}b_1 + a_1^*A_{12}b_2 + a_2^*A_{21}b_1 + a_2^*A_{22}b_2\end{aligned}$$

  であり、この式で a と b を入れ替え A を B に読み替えると

  $$\begin{aligned}\langle b|\hat{B}|a\rangle &= b_1^*B_{11}a_1 + b_1^*B_{12}a_2 + b_2^*B_{21}a_1 + b_2^*B_{22}a_2 \\ \langle b|\hat{B}|a\rangle^* &= (b_1^*B_{11}a_1)^* + (b_1^*B_{12}a_2)^* + (b_2^*B_{21}a_1)^* + (b_2^*B_{22}a_2)^* \\ &= b_1B_{11}^*a_1^* + b_1B_{12}^*a_2^* + b_2B_{21}^*a_1^* + b_2B_{22}^*a_2^* \\ &= a_1^*B_{11}^*b_1 + a_1^*B_{21}^*b_2 + a_2^*B_{12}^*b_1 + a_2^*B_{22}^*b_2\end{aligned}$$

  となります。よって $\langle a|\hat{A}|b\rangle = \langle b|\hat{B}|a\rangle^*$ のとき、$a_i^*b_j$ の係数の比較から

  $$A_{11} = B_{11}^*, \quad A_{12} = B_{21}^*, \quad A_{21} = B_{12}^*, \quad A_{22} = B_{22}^*$$

  あるいは両辺の複素共役をとって

  $$B_{11} = A_{11}^*, \quad B_{12} = A_{21}^*, \quad B_{21} = A_{12}^*, \quad B_{22} = A_{22}^*$$

  が得られ、行列で書くと

  $$\hat{B} = \begin{pmatrix} A_{11}^* & A_{21}^* \\ A_{12}^* & A_{22}^* \end{pmatrix}$$

となります。これは行列 $\hat{A}$ の転置複素共役ですが、定義より $\hat{B}=\hat{A}^\dagger$ だったので、行列の場合エルミート共役は転置複素共役で与えられます。

行列の例でわかるように、一般に $\hat{A}^\dagger$ は $\hat{A}$ と異なる演算子ですが、

$$\hat{A}^\dagger = \hat{A}$$

より厳密には（ヒルベルト空間の任意の元 $|a\rangle, |b\rangle$ に対して）

$$\langle a|\hat{A}|b\rangle = \langle b|\hat{A}|a\rangle^*$$

を満たす場合があります。このような演算子 $\hat{A}$ を**エルミート演算子**と呼びます。物理量に対応する演算子がエルミート演算子であることを認めると、期待値は $|b\rangle = |a\rangle$ ととることで

$$\langle A\rangle = \langle a|\hat{A}|a\rangle = \langle b|\hat{A}|a\rangle^* = \langle A\rangle^*$$

となりますが、これは

$$\mathrm{Im}[\langle A\rangle] = 0$$

を意味します[1]。よって物理量の期待値は実数になります。次の質問と関連しますが、実部の符号については制限がなく、期待値は**負の数でも良い**ことに注意しましょう。実際に演算子 $\hat{s}_z$ の $|\downarrow\rangle$ 状態による期待値は $-1/2$ です。

なお、不安定状態（時間が経つと崩壊する状態）を記述する際に、エネルギーなどの期待値を複素数にすると都合が良いことが知られており、これを発展させた非エルミート量子力学という分野が近年盛んに研究されています。複素数のエネルギーについては、虚部が崩壊率と関係するなど解釈の方法が確立していますが、一般の演算子の複素期待値をどのように解釈するのかは現在でも未解決の問題です。

- ゆらぎ (21) のルートの中身が負になる（結果ゆらぎが純虚数になる）ことはないでしょうか?

  ゆらぎ (21) のルートの中身

  $$\langle A^2\rangle - \langle A\rangle^2$$

  は**分散**と呼ばれる量です。引き算をしているので負になる心配がありますが、以下で説明するように**物理量に対応する演算子の分散は正の実数**になります。

  説明のため、ゆらぎの式の導出を補足します。まず、ある物理量 $\hat{A}$ の**期待値からのずれをはかる演算子** $\Delta\hat{A}$ を

  $$\Delta\hat{A} = \hat{A} - \langle A\rangle$$

[1] 実数 x, y を用いて $\langle A\rangle = x + iy$ とすると $x + iy = x - iy$ より $y = 0$ です。

として定義します。左辺はゆらぎ（ただの数）ではなく演算子であることに注意してください。右辺は演算子とただの数を引き算しているように見えますが、正確に書くと、

$$\Delta\hat{A} = \hat{A} - \langle A\rangle\hat{I}$$

と恒等演算子 $\hat{I}$ がかかっています。$\hat{I}$ は任意のベクトル $|a\rangle$ に対し $\hat{I}\,|a\rangle = |a\rangle$ と作用する（何もしない）演算子で、行列の場合は単位行列です。$\Delta\hat{A}$ は物理量 $\hat{A}$ をはかる演算子から期待値（多数の測定の平均値）を引いているため、**平均値を基準とした物理量 $\hat{A}$ の値を測定**していることになります。

ゆらぎ（平均値からのずれ度合い）を評価するために、$\Delta\hat{A}$ の期待値を計算したくなりますが、これはゼロです：

$$\begin{aligned}
\langle a|\,\Delta\hat{A}\,|a\rangle &= \langle a|\,[\hat{A} - \langle A\rangle\hat{I}]\,|a\rangle \\
&= \langle a|\,\hat{A}\,|a\rangle - \langle A\rangle\,\langle a|\,\hat{I}\,|a\rangle \\
&= \langle A\rangle - \langle A\rangle\,\langle a|a\rangle \\
&= \langle A\rangle - \langle A\rangle \\
&= 0
\end{aligned}$$

ここで $|a\rangle$ が規格化されていることを用いました。ブラケットの間にある演算子はブラケットの外に出してはいけませんが、$\langle A\rangle$ のようなただの数は外に出すことができます。$\Delta\hat{A}$ の期待値がゼロになる理由は、平均値のまわりに測定値が均等に得られ、平均するとゼロになるためです。かわりに $\Delta\hat{A}$ の 2 乗の期待値を計算してみると、

$$\begin{aligned}
\langle a|\,(\Delta\hat{A})^2\,|a\rangle &= \langle a|\,[\hat{A} - \langle A\rangle\hat{I}]^2\,|a\rangle \\
&= \langle a|\,[\hat{A}^2 - \langle A\rangle\hat{A}\hat{I} - \langle A\rangle\hat{I}\hat{A} + \langle A\rangle^2\hat{I}\hat{I}]\,|a\rangle \\
&= \langle a|\,[\hat{A}^2 - 2\langle A\rangle\hat{A} + \langle A\rangle^2\hat{I}]\,|a\rangle \\
&= \langle a|\,\hat{A}^2\,|a\rangle - 2\langle A\rangle\,\langle a|\,\hat{A}\,|a\rangle + \langle A\rangle^2\,\langle a|a\rangle \\
&= \langle A^2\rangle - 2\langle A\rangle\langle A\rangle + \langle A\rangle^2 \\
&= \langle A^2\rangle - \langle A\rangle^2
\end{aligned}$$

となります。ここで $\hat{A}\hat{I} = \hat{I}\hat{A} = \hat{A}$、$\hat{I}\hat{I} = \hat{I}$ などを用いました。これが**分散**と呼ばれる量で一般にはゼロになりません。分散のルートをとったものがゆらぎです。演算子 $\hat{A}$ が位置などのように次元を持っている場合、分散は期待値と次元が異なりますが、ゆらぎは常に期待値と同じ次元になります。

ここで、$\hat{A}$ が物理量であるとき、**$\Delta\hat{A}$ がエルミート**であることに注意します。物理量であるため $\hat{A}^\dagger = \hat{A}$ であり、恒等演算子は $\hat{I}^\dagger = \hat{I}$ なので（定義に戻って示すか単位行列をイメージすればよい）、

$$\Delta\hat{A}^\dagger = (\hat{A} - \langle A\rangle\hat{I})^\dagger = \hat{A}^\dagger - \langle A\rangle^*\hat{I}^\dagger = \hat{A} - \langle A\rangle\hat{I} = \Delta\hat{A}$$

となります。ここで $\hat{A}$ が物理量なので $\langle A\rangle^* = \langle A\rangle$ であることを使いました。このとき、

$$\begin{aligned}\langle a| (\Delta\hat{A})^2 |a\rangle &= \langle a| \Delta\hat{A}\Delta\hat{A} |a\rangle \\ &= \langle a| \Delta\hat{A}^\dagger\Delta\hat{A} |a\rangle \\ &= \Big(\langle a| \Delta\hat{A}^\dagger\Big)\Big(\Delta\hat{A} |a\rangle\Big)\end{aligned}$$

となりますが、

$$\Delta\hat{A} |a\rangle = |b\rangle$$

と定義すると、

$$\langle b| = \Big(\Delta\hat{A} |a\rangle\Big)^\dagger = \langle a| \Delta\hat{A}^\dagger$$

なので[2]、式 (17) より

$$\langle a| (\Delta\hat{A})^2 |a\rangle = \langle b|b\rangle \geq 0$$

であることがわかります。つまり物理量に対応する演算子の分散は正の実数になります。

[2]一般の（エルミートと限らない）演算子 $\hat{A}$ に対し $\hat{A}|b\rangle = |c\rangle$ とすると、エルミート共役の定義より $\langle a|c\rangle = \langle a|\hat{A}|b\rangle = \langle b|\hat{A}^\dagger|a\rangle^*$ ですが、式 (16) から $\langle a|c\rangle = a_1^*c_1 + a_2^*c_2 = (c_1^*a_1)^* + (c_2^*a_2)^* = (c_1^*a_1 + c_2^*a_2)^* = \langle c|a\rangle^*$ なので $\langle c|a\rangle^* = \langle b|\hat{A}^\dagger|a\rangle^*$ となります。これが任意の $|a\rangle$ に対して成立するので $\langle b|\hat{A}^\dagger = \langle c| = |c\rangle^\dagger = (\hat{A}|b\rangle)^\dagger$ です。