観測で状態は確定する？

物理量の観測により波動関数が収縮し，状態はその物理量の固有状態のいずれかになる。例えば１個のスピンに対して σ_z を観測したとき，その値が $+1$ であったなら，それ以後の状態は確かに σ_z の固有状態 $|+\rangle$ である。ただ，量子力学では $|+\rangle, |-\rangle$ のいずれの固有状態になるかは決まらず，波動関数はどちらになるかの実現確率しか与えることはできない。状態がその物理量の固有状態のときだけは，対応する固有値が確実に見い出される.....。量子力学を学んだ者なら誰でもそのように理解している筋書きだ。

ここで，１個のスピンに対して，先ず σ_z を観測し，次いで σ_x を観測することを考えてみよう。冒頭の理解によれば，最初の σ_z の観測結果が何であろうと，後の σ_x の観測の後は，スピンは σ_x の固有状態 $|+'\rangle, |-'\rangle$ の いずれか になっているはずである。

途中に観測がはさまる過程を系統的に表現することは波動関数だけでは不可能で，**密度行列**（または**統計演算子**）が必要になる。まず，１つの波動関数（状態ベクトル）$|\psi(t)\rangle$ で表される状態（**純粋状態**）に対して，密度行列とそれを用いた物理量 Q の期待値は

$$\rho(t) = |\psi(t)\rangle\langle\psi(t)| \ , \quad \langle Q\rangle_t = \langle\psi(t)|Q|\psi(t)\rangle = \mathrm{Tr}\ Q\rho(t) \tag{1}$$

で与えられる。$|\psi(t)\rangle$，$\langle\psi(t)|$ に対するシュレーディンガ方程式を用いれば，$\rho(t)$ は

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\rho(t) = -\frac{i}{\hbar}[H, \rho(t)] \ , \quad \rho(t) = \mathrm{e}^{-iHt/\hbar}\rho(0)\mathrm{e}^{iHt/\hbar} \tag{2}$$

に従うことが示される。すなわち，密度行列の時間発展は**ユニタリ変換**で与えられる。(**注．**ハイゼンベルグ表示とは時間の符号が逆である。) これ等は以下の**混合状態**の密度行列でも同様である。

これに対して観測という非可逆な操作は，ユニタリ変換では表すことはできない。例えば σ_z を観測した場合の変化は，２つの固有状態への射影演算子 $P^+ = |+\rangle\langle+|$, $P^- = |-\rangle\langle-|$ を用いて

$$\rho_1 = P^+\rho P^+ \ + \ P^-\rho P^- \tag{3}$$

で表される。対角要素だけを取り出す操作であり，行列の線形変換ではあるがユニタリではない。この場合も密度行列の必須条件である $\mathrm{Tr}\rho_1 = \mathrm{Tr}\rho = 1$ が保存されていることは明らかだろう。

さて，スピンの初期状態は任意の純粋状態

$$|\psi\rangle = \alpha|+\rangle + \beta|-\rangle, \quad |\alpha|^2 + |\beta|^2 = 1 \tag{4}$$

$$\rho_0 = |\psi\rangle\langle\psi| = \begin{pmatrix} |\alpha|^2 & \alpha\beta^* \\ \alpha^*\beta & |\beta|^2 \end{pmatrix} \ , \quad \rho_0^2 = \rho_0 \tag{5}$$

であったとする。まず σ_z の観測を行うと，上記の射影演算により密度行列は**混合状態**を表す

$$\rho_1 = \begin{pmatrix} |\alpha|^2 & 0 \\ 0 & |\beta|^2 \end{pmatrix} = |\alpha|^2|+\rangle\langle+| \ + \ |\beta|^2|-\rangle\langle-| \ , \quad \rho_1^2 \neq \rho_1 \tag{6}$$

となる。これは σ_x を対角化する表示で表せば，ユニタリ変換により

$$\rho_1' = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 1 & |\beta|^2-|\alpha|^2 \\ |\beta|^2-|\alpha|^2 & 1 \end{pmatrix} \tag{7}$$

である。次いで σ_x を観測すれば，同じく σ_x を対角化する表示で

$$\rho_2' = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} = \frac{1}{2}|+'\rangle\langle+'| \ + \ \frac{1}{2}|-'\rangle\langle-'| \tag{8}$$

となる。これを見れば，確かに最初に期待したとおり「σ_x の２つの固有状態 $|+'\rangle$, $|-'\rangle$ のいずれかが実現されており，その確率が 1/2 ずつになっている」と納得したくなるところだ。

しかしながらこの状態は，単位行列がユニタリ変換で不変であることにより，σ_z を対角化する元の表示でも，

$$\rho_2 = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} = \frac{1}{2}|+\rangle\langle+| \ + \ \frac{1}{2}|-\rangle\langle-| \tag{9}$$

と書けるのである。すなわち「σ_z の 2 つの固有状態 $|+\rangle$, $|-\rangle$ のいずれかが実現されており，その確率が 1/2 ずつになっている」とも言えるわけだ。さらに，σ_y はもちろん，任意の方向の成分を対角化する表示で表しても全く同じことが言える。

観測の順序が逆の場合は，初期状態を σ_x を対角化する表示で

$$|\psi\rangle = \alpha'|+'\rangle + \beta'|-'\rangle\ , \quad \alpha' = \frac{1}{\sqrt{2}}(\alpha+\beta),\ \beta' = \frac{1}{\sqrt{2}}(\beta-\alpha) \tag{10}$$

と書き直しておけば，全く同じ結果になることも上の計算から明らかであろう。

密度行列は，たとえ対角形になっている場合でも，そのことでもって「（その対角化表示に対応する物理量の）固有状態のいずれかが実現されている」とは，必ずしも断言することはできないということである。確かにそのように考えて観測後の密度行列を (3)，あるいは (6) で構成したのであるが，逆は必ずしも真ならずである。そもそも「固有状態である」とは，例えば「スピンが σ_z の固有状態，$|+\rangle$ の状態にある」ということは,「σ_z を観測したら必ず $+1$ の値が得られる」ということ以上には何の意味ももたない。したがって，σ_z でも σ_x でも $+1$ にも -1 にもなる可能性のある今のような場合,「どの物理量の固有状態になっているか」は全く意味のない話なのである。最後に観測された物理量の固有状態になっている可能性が，否定されてさえいなければよいのだ。

密度行列は，初期設定や観測によって知り得たこと，あるいは知り得ないことを，正確にそのとおりに反映した上で，物理量を観測したら何が期待できるかの**統計性**を，ミクロの法則である量子力学に則って与えるものである。ある物理量の観測により,「どれかは問わないが，ともかく波動関数で決まる確率でその物理量のいずれかの固有状態になった」ことだけ分かっている場合は，量子力学的な干渉（＝重ね合わせで別の状態になる）をすることなく独立に進展する，複数の状態の可能性を併記する**混合状態**の密度行列となる。どの固有値であったかが分かっている場合は，対応する固有状態の**純粋状態**の密度行列から再出発すればよい。したがって，上の (8) と (9) は，単に数学的に同等というだけでなく，この密度行列の役割として何ら矛盾するものではない。

上の話はいささかペテンじみているが，次のように言い換えると，もっといかがわしくなる。「もし,（仮に可能であるとして）１つのスピンに対して非可換な σ_z と σ_x の観測を同時に実施した場合，観測後はどちらの物理量の固有状態になっているだろうか？（どの固有状態が，ではなくて）どちらの物理量が選ばれるかの確率を与える原理は何か？」—— 量子力学では厳密に「同時」ということはあり得ないから,「どちらかはわからないが，一瞬でも遅れて観測が実現される方の物理量の固有状態になる」と答えたいところであるがそうではない。問いそのものがナンセンスなのである。繰り返しになるが,「固有状態になっている」という言い分は,「ある特定の 固有状態になっている」という場合にしか意味をもたない。上で見てきたように,「ある物理量の いずれかの 固有状態になっている」ことは,「別の物理量のいずれかの固有状態になっている」こととは排反事象ではなく，両立できる事象であるからである。

最後に一言，ことわっておこう。観測により演算子（q 数）で表される物理量を普通の数（c 数）である測定値に対応させるとき，固有状態の場合以外はどの値が得られるかを決めることはできないというのが，量子力学の宿命である。しかしながらこのことでもって「ミクロの世界の運動は本来的に確率的であり，量子力学は統計法則を与えるもの」というのは早計である。ユニタリ変換できちんと変化していく波動関数（状態ベクトル）が各時点で固有状態となるような物理量を観測するなら，決して変化は確率的ではなく確定的な測定値の列が得られる。少なくとも出発点がある物理量の固有状態であることが分かっているときには，その後どのような物理量（オブザーバブル）を観測すればよいかは，波動関数そのものから知ることもできる。波動関数はある場合には確率を与えると同時に，ちゃんとそういう確定的な性格もあわせもっている。