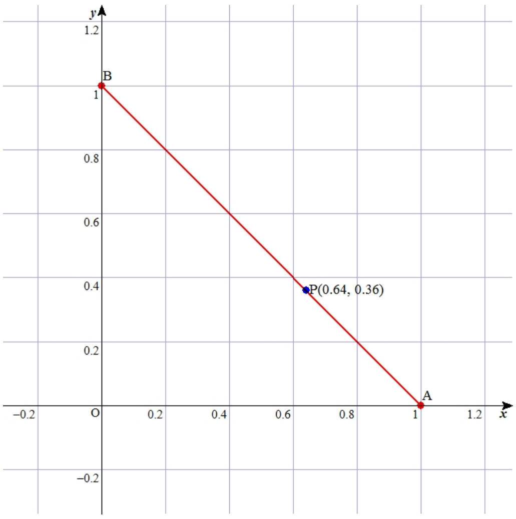
1　状態ベクトルの直感的理解

コインを投げて表が出る確率を p とすれば、裏が出る確率は $1-p$ である。いまコインは歪（いびつ）かもしれず、$p=1/2$ とは限らないとする。たとえば $p=0.64$ のとき、このコインについての情報を書き記しておくなら、下のような表を作っておくとよい。

表	0.64
裏	0.36

これでも充分に用をなすが、あえてグラフを持ち出して考えるなら、点 $(p, 1-p)$ を [図 1] のようにプロットすればコインの情報が記録される。すなわち、コインの表／裏の確率分布は、線分 AB 上の点と 1 対 1 に対応する。



[図 1]

さて、さらに凝り性の人が、今度は円を用いて記録しようと考えたとしよう。円 $x^2+y^2=1$ 上の各点は、その方程式が示すとおり、「x 座標の 2 乗」と「y 座標の 2 乗」との和が常に 1 となる。そこで、表の出る確率を（x 座標そのものではなく）x 座標の 2 乗に、裏の出る確率を y 座標の 2 乗に対応させれば、円上の 1 点で確率分布を表現できることになる。たとえば $p=0.64$ のときは、円上の点 $(0.8, 0.6)$ を対応させればよい。もしも「表／裏」の 2 通りでなく、3 通りの可能性があるなら、球面上の 1 点を用いればよいし、もっと多ければ（絵を描くことはできないが）n 次元球を考えればよい。ただし、座標の 2 乗を用いるので、複数の点が同じ確率分布に対応することもある。コインの例では $(\pm 0.8, \pm 0.6)$（復号は任意）はいずれも $p=0.64$ の場合を表している。

次に、このコインを使ってゲームを行なうとして、表が出れば 3 点、裏が出れば 2 点という得点がもらえるとしよう。このとき、もらえる得点の期待値は p によって次のように表される。

$$3p+2(1-p)$$

さきほどの方法で確率分布に対応させた点を $\mathrm{P}(\cos\theta, \sin\theta)$ とすれば、$p=\cos^2\theta$、$1-p=\sin^2\theta$ であるから、期待値は

$$3\cos^2\theta+2\sin^2\theta$$

と書くこともできる。これをグラフ上で直感的に捉えられるように工夫してみよう [図 2]。この式は

$$\begin{pmatrix} \cos\theta & \sin\theta \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} 3\cos\theta \\ 2\sin\theta \end{pmatrix}$$

と書き直せる。ただし「$\cdot$」は内積を表す。すなわち、点 $\mathrm{P}(\cos\theta, \sin\theta)$ をもとに、新たな点 $\mathrm{Q}(3\cos\theta, 2\sin\theta)$ をとれば、期待値は $\overrightarrow{\mathrm{OP}}$ と $\overrightarrow{\mathrm{OQ}}$ の内積で表されるのである。いま $|\overrightarrow{\mathrm{OP}}| = 1$ であるから、これは結局、$\overrightarrow{\mathrm{OQ}}$ の直線 OP への正射影 $\overrightarrow{\mathrm{OH}}$ の（符号付きの）長さに等しい。

点 P から点 Q を得るには、x 座標を 3 倍、y 座標を 2 倍すればよいが、これは

$$\overrightarrow{\mathrm{OQ}} = \begin{pmatrix} 3\cos\theta \\ 2\sin\theta \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 3 & 0 \\ 0 & 2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \cos\theta \\ \sin\theta \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 3 & 0 \\ 0 & 2 \end{pmatrix} \overrightarrow{\mathrm{OP}}$$

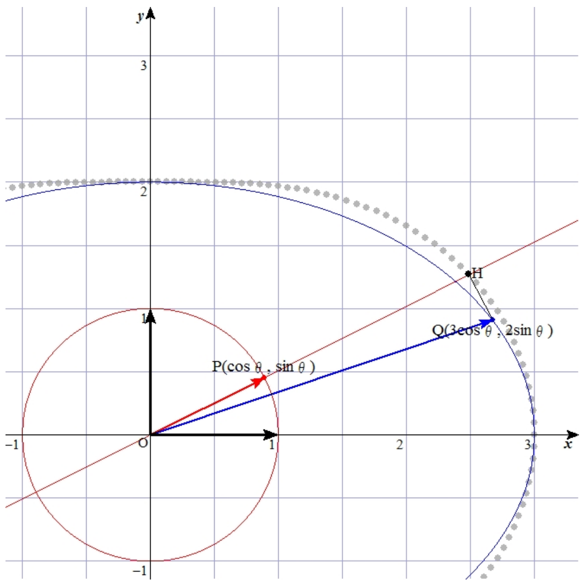
という一次変換と見ることもできる。$A = \begin{pmatrix} 3 & 0 \\ 0 & 2 \end{pmatrix}$ とおけば、期待値は

$$(\overrightarrow{\mathrm{OH}} \text{ の符号付き長さ}) = \overrightarrow{\mathrm{OP}} \cdot \overrightarrow{\mathrm{OQ}} = \overrightarrow{\mathrm{OP}} \cdot (A\ \overrightarrow{\mathrm{OP}})$$

と書ける。

ここまでの直感的理解を、量子論における状態ベクトルと（物理量を表す）エルミート行列との関係に対応させてみよう。すなわち、$\overrightarrow{\mathrm{OP}}$ を状態ベクトル $|\psi\rangle$、A をエルミート行列と考えれば（実際、A は自己共役である）、A の固有ベクトルは $\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$ と $\begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$ であり、いずれも規格化され、互いに直交している。また前者に対応する固有値は 3、後者は 2 である。点 P の x および y 座標は、2 つの固有ベクトルへの $\overrightarrow{\mathrm{OP}}$ の射影の長さでもあり、その 2 乗によって、測定値が各固有値をとる確率が与えられる。そして、期待値は $\langle\psi|\,A\,|\psi\rangle$ あるいは $\langle\psi|A\psi\rangle$ で表されるが、これが $\overrightarrow{\mathrm{OP}} \cdot \overrightarrow{\mathrm{OQ}}$ に対応する。

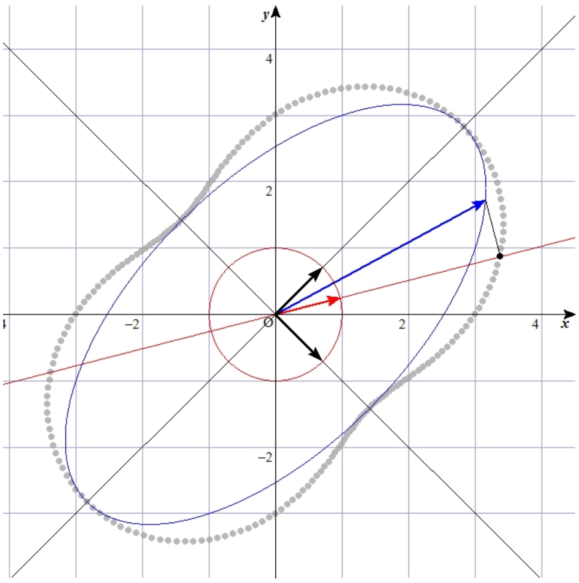
点 P が単位円上を動くに従い、点 Q は楕円 $(x/3)^2 + (y/2)^2 = 1$ を動く。一方、点 H は楕円よりも少し膨らんだ軌跡を描いているが、常に $2 \leq \mathrm{OH} \leq 3$ を満たしていることが分かる。また $\mathrm{P}(1,0)$ のとき $\mathrm{OH} = 3$、$\mathrm{P}(0,1)$ のとき $\mathrm{OH} = 2$ となることも、確率分布と期待値の関係を考えれば納得できる。



[図 2]

いまの例では、エルミート行列がイメージしやすいように、対角行列を用いた。しかし、実数正方行列に範囲を限ったとしても、自己共役行列は必ずしも対角行列である必要はなく、対称行列ならば何でもよい。そこで、今度は $B = \begin{pmatrix} 3 & 1 \\ 1 & 3 \end{pmatrix}$ という行列を例にとってみよう。この行列の固有ベクトルを探すと、$\begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}$（固有値 4）および $\begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix}$（固有値 2）がある。これらは確かに直交しており、規格化すれば $\begin{pmatrix} 1/\sqrt{2} \\ \pm 1/\sqrt{2} \end{pmatrix}$ となる。さきの例と全く同じように考えて図を描くと [図 3] のようになる。今度は固有ベクトルが $\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$、$\begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$ ではないので、点 P の座標の 2 乗がそのまま確率を与えるわけではないことに注意しよう。$\begin{pmatrix} 1/\sqrt{2} \\ 1/\sqrt{2} \end{pmatrix}$ への射影の長さの 2 乗が「測定値が 4 となる確率」を与え、$\begin{pmatrix} 1/\sqrt{2} \\ -1/\sqrt{2} \end{pmatrix}$ への射影の長さの 2 乗が「測定値が 2 となる確率」を与える。B によって点 P は点 Q に移り、今度は Q の軌跡は斜めに傾いた楕円となる。$\overrightarrow{\mathrm{OQ}}$ の直線 OP への正射影の符号付き長さが期待値を与えるのは、前の例と全く同様であり、$\overrightarrow{\mathrm{OP}}$ の方向によって 2 から 4 までの値をとりうる。

[図 2] と [図 3] を見比べて、一つの状態ベクトル $\overrightarrow{\mathrm{OP}}$ に対して、物理量 A および B を両方とも測定した場合を考えてみよう。例えば $\mathrm{P}(1, 0)$ のとき、物理量 A の測定値は必ず 3 になる。しかし、このとき $\overrightarrow{\mathrm{OP}}$ は B の固有ベクトルとは違う方向を向いており、B の測定値は 2 か 4 のどちらになるか、確率の問題（ここでは 50% ずつ）となり、確定しないのである。逆に B の測定値が確定するような $\overrightarrow{\mathrm{OP}}$ のときは、A の測定値が確定しない。これが不確定性原理である。



[図 3]